

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки Техническая физика 14.04.01

Отделение школы (НОЦ) Научно-образовательный центр Б.П. Вейнберга

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Моделирование магнетронной распылительной системы методом конечных элементов УДК 621.385.64:621.793.7:517.962

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ61	Марков С.А.		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Евдокимов К.Е.	к.ф.-м.н		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Меньшикова Е.В.	к.филос.н		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Гоголева Т.С.	к.ф.-м.н		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель НОЦ	Кривобоков В.П.	д.ф.-м.н, профессор		

Томск – 2018 г.

Министерство образования и науки Российской Федерации
 федеральное государственное автономное образовательное учреждение
 высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
 ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки (специальность) Техническая физика 16.04.01
 Отделение школы (НОЦ) НОЦ Б.П. Вейнберга

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП

 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерская диссертация

Студенту:

Группа	ФИО
ОДМб1	Марков С.А.

Тема работы:

Моделирование магнетронной распылительной системы методом конечных элементов	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	Объектом исследования является модель кинетики плазмы и магнетронная распылительная система. Исходные данные: сечения взаимодействия, модель кинетики плазмы.
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	Провести моделирование плазмы в скрещенных электрическом и магнитном поле в магнетронной распылительной системе. Разработать программное обеспечения для моделирования. Получить распределения концентрации носителей заряда, скоростей, магнитного поля, эклектического потенциала и температуры электронов. Сравнить

	полученные численные результаты с экспериментом.
Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Социальная ответственность	Ассистент отд. ЯТЦ Гоголева Т.С., к.ф.-м.н.
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Доцент, Меньшикова Е.В., к.филос.н
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	
1. Метод моделирования магнетронной распылительной системы.	
2. Вычислительный алгоритм	
3. Структура программы	
4. Результаты расчета	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	
---	--

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Евдокимов К.Е.	к.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ61	Марков С.А.		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

Группа	ФИО
ОДМ61	Марков Степан Алексеевич

Школа	Инженерная школа ядерных технологий	Отделение школы (НОЦ)	НОЦ Б.П. Вейнберга
Уровень образования		Направление/специальность	Техническая физика

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НИИ
2. Разработка устава научно-технического проекта
3. Планирование процесса управления НИИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок
4. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. «Портрет» потребителя результатов НИИ
2. Сегментирование рынка
3. Оценка конкурентоспособности технических решений
4. Матрица SWOT
5. График проведения и бюджет НИИ
6. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИИ
7. Потенциальные риски

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Меньшикова Е.В.	к.филос.н		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ61	Марков С. А.		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
ОДМ61	Марков С.А.

Школа	Инженерная школа ядерных технологий	Отделение школы (НОЦ)	Научно-образовательный центр Б.П. Вейнберга
Уровень образования	Магистр	Направление/специальность	Техническая физика

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

1. Описание рабочего места (рабочей зоны)	<ul style="list-style-type: none"> – вредных проявлений факторов производственной среды (метеоусловия, освещение, шум, вибрация, электромагнитное поле, ионизирующие излучение); – опасных проявлений факторов производственной среды электрической, пожарной и взрывной природы.
2. Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме	<ul style="list-style-type: none"> – требования охраны труда при работе на ПЭВМ; – электробезопасность – пожаровзрывобезопасность

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:	<ul style="list-style-type: none"> – действие фактора на организм человека; – приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); – предлагаемые средства защиты (коллективные и индивидуальные)
2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой произведённой среды в следующей последовательности:	<ul style="list-style-type: none"> – электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, средства защиты); – пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения).

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
---	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент отд. ЯТЦ	Гоголева Т.С.	к.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ61	Марков С.А.		

Оглавление

Аннотация	7
Введение	8
Глава 1. Метод моделирования магнетронной распылительной системы.	19
1.1. Объект моделирования	19
1.2. Система уравнений для моделирования кинетики плазмы	21
1.3. Метод конечных элементов	25
1.4. Вариационный метод и метод Галеркина.....	27
Глава 2. Вычислительный алгоритм.	33
2.1. Интегрирование по конечному элементу и контуру области	33
2.2. Дискретизация расчетной области	34
2.3. Общий вычислительный алгоритм	37
2.4. Устойчивость расчетного алгоритма	41
Глава 3. Структура программы.	46
3.1. Базовые классы	46
3.2. Класс сетки	48
3.3. Класс уравнения.....	48
3.4. Класс решателя	51
Глава 4. Результаты расчета.	53
4.1. Верификация программы	53
4.2. Расчет магнитного поля	57
4.3. Концентрация носителей заряда	61
4.4. Распределение скоростей носителей заряда	66
4.5. Электрический потенциал.....	68
4.6. Температура электронов	69
4.7. Открытые граничные условия	71
Глава 5. Финансовый менеджмент.	73
Глава 6. Социальная ответственность.	93
Основные выводы.....	102
Список литературы.....	104
Приложение 1.....	107

Аннотация.

В диссертации рассмотрена задача моделирования магнетронной распылительной методом конечных элементов и методом Галеркина. Рассматривается двухкомпонентная модель плазмы, описывающая кинетику плазмы в скрещенных электрическом и магнитном полях. Отличительной особенностью использованной модели от существующих является учет нестационарного и конвективного слагаемых в уравнении для переноса момента импульса для электронов. В работе представлены распределения концентрации носителей заряда, распределение скоростей, конфигурация электрического и магнитного поля, температура электронов, временные зависимости рассматриваемых переменных. Следующей отличительной особенностью является высокая точность реализации слагаемых в уравнениях, что позволяет снизить влияние численных погрешностей на результат.

Разработано программное обеспечение для моделирования с высокими функциональными возможностями построения собственных моделей, с возможностью усложнения существующих моделей. Введены алгоритмы распараллеливания задачи и повышения устойчивости расчетного алгоритма.

В результате исследовательской работы выяснено, что пренебрегать нестационарным и конвективным слагаемыми в уравнении для переноса электронов нельзя, несмотря на малую массу электрона. Произведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными.

Введение.

Актуальность работы.

Экспериментальные методы исследования в области физики плазмы, в частности, исследование магнетронных распылительных систем, сталкиваются с рядом проблем, замедляющих разработку и внедрение более конкурентоспособных и эффективных технологий. К таким проблемам относятся: большая длительность и дороговизна экспериментов; проблема интерпретации, повторяемости и достоверности полученных результатов; неопределённость в направлении совершенствования технологии, большое число управляемых параметров.

Задачей экспериментального исследования магнетронных распылительных систем является задача совершенствования технологии распыления, улучшение скорости напыления покрытия, уменьшения кривизны, повышение чистоты, улучшение адгезии покрытия, снижение энергетических затрат на процесс напыления, возможно, увеличение рабочего давления для экономии на высоковакуумном насосе и т.д. Стоит сложная комплексная задача, где параметры жестко связаны между собой. Количество возможных варьируемых параметров велико: геометрия вакуумной камеры; конфигурация магнитного и электрического полей; рабочее давление в камере и распределение давления; тип рабочего газа в камере и скорость его подачи; использование электронного пучка, тип распыляемого материала и т.д. Все вышеперечисленные параметры могут изменяться во времени, из-за чего под параметры попадает временная развертка, например, напряжения и магнитного поля. Таким образом, для подбора параметров может понадобится значительное количество экспериментов. Моделирование может задать вектор разработке и значительно сократить количество экспериментов с параметрами, которые не соответствуют требованиям, например, параметры,

при которых плазма неустойчива или скорость напыления покрытия слишком низкая.

Также существует проблема интерпретации и достоверности полученных результатов. Для промышленной реализации метода должна быть полная повторяемость эксперимента в других условиях. В случае отсутствия повторяемости результатов, необходимо выяснить причины, убедиться в точности измерения физических величин. В качестве ориентира для качества проведенного эксперимента может служить математическое моделирование.

Учитывая время и дороговизну экспериментов, а также наличие базы данных по сечениям взаимодействия разных процессов, моделирование является может стать одним из значимых этапов проектирования. Программное обеспечение для моделирования – одно из самых динамично развивающихся секторов экономики. Так, только за последние два года акции крупной и относительно старой компании ANSYS Inc, которая занимается исключительно программным обеспечением для моделирования физических процессов, выросла в 2 раза, а за последние 10 лет – почти в 10 раз. Стоит отметить одно из направлений разработок компании – это автоматическая оптимизация некоторых параметров исходя из необходимых требований установки. Таким образом, динамика развития индустрии соответствуют тезисам преимущества моделирования, описанным выше.

Анализируя недостатки и возможности программного обеспечения ANSYS и COMSOL, а также свойства решаемой системы дифференциальных уравнений для моделирования кинетики плазмы, разработан программный код для решения произвольной системы дифференциальных уравнений и произведено моделирование проточной магнетронной распылительной системы. К недостаткам ANSYS-FLUENT относится недостаточная сходимость уравнений неразрывности, сложность реализации граничных условий (даже с использованием программируемого модуля), не возможность решения системы из двух сжимаемых сред и множество других ограничений. COMSOL имеет модуль для моделирования плазмы, однако, моделирование

плазмы в скрещенных полях данным расчетным пакетом невозможно, что напрямую указывается производителем данного программного обеспечения.

Сложность моделирования плазмы, множество задач и вариантов моделей плазмы формирует особое требование к программному продукту – возможность построения произвольной модели для моделирования. Программа разработана именно с ориентацией на выполнение расчетов для широкого круга задач, на возможность построения собственной модели.

Таким образом, данная работа является актуальной и направлена на разработку продукта, который бы мог использоваться в исследовательских целях в широком кругу задач, в том числе для моделирования магнетронной распылительной системы, которое представлено в данной работе.

Степень разработанности темы.

На текущий момент существует программное обеспечение для моделирования плазмы, например, программа COMSOL содержит модуль для моделирования плазмы. Однако, моделирование плазмы в скрещенных магнитных полях, моделирование магнетрона невозможно, что напрямую указывается производителем программного обеспечения. Кроме того, COMSOL использует определенную модель плазмы с множеством допущений, что ограничивает возможности реализовать собственную модель кинетики плазмы.

Расчетный пакет ANSYS-FLUENT имеет возможности составления собственных систем уравнений путем внедрения собственного кода, при этом это минимальным образом сказывается на производительности, поскольку расчетный пакет компилирует код. Однако, несмотря на такие существенные возможности расчетного пакета, существуют ограничения, затрудняющие построение собственной модели. Собственный код, интегрированный в программу ANSYS, исполняется отдельно от основного кода, точный учет слагаемых в дифференциальном уравнении не выполняется. Например, сила Лоренца рассчитывается как постоянное значение в рамках конечного элемента, что является очень грубым приближением для моделирования

области, где существует магнитное поле, из-за высоких градиентов всех переменных (магнитного поля, концентрации, скорости). Кроме того, из-за существенных градиентов концентрации, стандартная реализация нестационарных и конвективных слагаемых приводит к вероятности расходимости решения.

В статье [2] проведено моделирование прямоточной магнетронной распылительной системы, результаты которой могут служить ориентиром при проведении собственных расчетов. В статье сделан ряд допущений, в частности, опускаются нестационарные слагаемые и конвективные слагаемые в дифференциальном уравнении для скорости (1.3). Отчасти, решаемая система дифференциальных уравнений выбрана аналогичной, как в статье, только с меньшим количеством допущений и с устранением ошибки в коэффициенте в слагаемом с магнитным полем в уравнении для температуры электронов (1.5) и (1.8). В данной статье предложен метод приведения задачи к двумерной задаче: несмотря на цилиндрическую симметрию, из-за наличия векторного произведения в уравнении для скорости угловая компонента скорости не равна нулю. В статье угловая компонента выражена через радиальную и аксиальную компоненты. Аналогичный способ приведения задачи к двумерной используется в данной работе. Также в статье приведен способ задания граничных условий.

Для составления системы уравнений также используется [3], где более подробно в общем виде описан метод вывода системы дифференциальных уравнений применительно к задаче кинетики плазмы. В данной литературе представлен метод Грэда для составления системы уравнений; описывается модель двухкомпонентной плазмы, которая используется в данной работе. В данной литературе описаны и сложные модели, например, $13N$ - моментное приближение, которое подтверждает необходимость построения функционального программного обеспечения, с помощью которого можно строить более сложные модели плазмы.

В литературе представлено [11] аналитическое решение задач, связанных с физикой плазмы, которое используется для верификации расчетов в данной работе. В частности, в данной работе используется аналитическое решение выхода электронов из расчетной области в отсутствие силы Лоренца. Описаны основные понятия физики плазмы и методы расчета физических величин, таких как мобильность электронов и коэффициент ионизации плазмы.

Архитектура программы построена с учетом архитектуры существующего программного пакета (ANSYS-FLUENT) для моделирования. Архитектуру программы можно отчасти определить с помощью программируемого модуля UDF («User-define functions»). Например, операции с граничными условиями и с конечными элементами в программе осуществляются с помощью указателей, существует метод повышения устойчивости алгоритма путем выделения диагональной части матрицы из слагаемых-источников в дифференциальном уравнении. Кроме того, в описании программного пакета описан общий алгоритм работы решателя.

Основной метод решения системы дифференциальных уравнений (метод Галеркина) описан в [1] на примере уравнений гидродинамики. Описанные методы расчета были проанализированы и адаптированы к рассматриваемой системе дифференциальных уравнений. В данной литературе описаны также другие методы, например, вариационный способ получения системы алгебраических уравнений, который позволяет определить систему независимых базисных функций в методе Галеркина. Также описаны методы стабилизации решения, в частности, описываются математические и физические основы использования оператора Лапласа для увеличения устойчивости решения.

Для применения метода Галеркина необходимо рассчитывать интегралы по конечному элементу и контуру расчетной области, решать систему алгебраических уравнений с разреженной матрицей, осуществлять контроль невязки. Таким образом, в работе используются численные методы, которые представлены в следующей литературе [7-9]. В работе использовались и

другие методы, например, метод градиентного спуска, который использовался для решения задачи в вариационной постановке; метод наименьших квадратов для определения оптимальных параметров при расчете магнитного поля.

Программный код написан на C++ с использованием современных средств программирования, которые описаны в руководстве по программированию «Microsoft Developer Network», в частности описаны методы распараллеливания задачи. Для распараллеливания задачи используется расширение языка OpenMP.

Для визуализации результатов расчета используется программа «ParaView», для использования которой необходимо знать форматы данных, которые данная программа использует. В работе используется формат данных «vtk». Разработанная программа генерирует vtk-файл, который считывается средством для визуализации «ParaView». В ходе исследовательской работы были изучены другие форматы данных, которые используют программы «ANSYS» и «TecPlot».

Для моделирования магнитного поля был изучен расчетный пакет «ANSYS-Maxwell», описание которого позволяет определить, какие параметры необходимы для моделирования системы постоянных магнитов в магнетроне, определить типы граничных условий для расчета магнитного поля. Из-за отсутствия свойств постоянного магнита в работе используется альтернативный способ моделирования магнитного поля через систему контурных токов (магнитная система представляется в виде контурных токов разных размеров с разной силой тока).

Для решения поставленной задачи необходимо знать зависимость сечений взаимодействий от температуры, например, сечение ионизации аргона. Сечения взаимодействия используются для расчета подвижности электронов, коэффициента диффузии и ионизации.

Также был проанализированы возможности программного пакета «COMSOL», который содержит модель плазмы, что позволяет решать ряд задач, например, позволяет моделировать плазму, индуцированную СВЧ и

моделировать проточный разряд. Уравнения, решаемые в данном программном обеспечении аналогичны уравнениям в [2], также нестационарные и конвективные слагаемые для электронов опускаются. Кроме того, стационарным считается и уравнение для энергии электронов. Программный модуль для плазмы имеет ряд ограничений, указанных производителем, в частности моделирование плазмы в скрещенных электрических и магнитных полях невозможно из-за проблем в области магнитного поля, а именно – из-за нефизической численной диффузии по линиям магнитного поля. В частности, производитель говорит о невозможности моделирования магнетрона. Стоит отметить, что методы, применяемые в COMSOL близки к разработанному методу, в частности в программе в качестве функции формы можно указать линейную функцию, а также постоянную, логарифмическую, квадратичную. Таким образом, анализ данной программы необходим для успешного развития данного проекта. COMSOL описывает проблемы с устойчивостью данной задачи, поэтому при написании расчетного алгоритма необходимо принимать меры для повышения устойчивости и точности алгоритма.

Высокая численная вязкость может возникать из-за неточности учета магнитных компонент, которые требуют для расчета моментов функции формы высоких порядков. В работе предпринята попытка максимально точно реализовать слагаемые, это приводит к увеличению скорости расчета, но позволяет точно решать задачу. Также в работе не опускаются слагаемые, которые в других моделях считаются пренебрежительно малыми. В частности, конвективное слагаемое, которое может также быть значимым в области высоких градиентов скорости.

Научная новизна.

В данной работе используется точная реализация всех слагаемых в дифференциальных уравнениях, моделирующих плазму в скрещенных

магнитных и электрических полях. Из системы дифференциальных уравнений не исключаются нестационарные и конвективные слагаемыми, в отличие от существующих моделей. Построен алгоритм возможности реализации различных моделей, что позволяет решать широкий круг задач моделирования плазмы различными способами. Разработана собственная архитектура программы с использованием современных средств программирования, позволяющая значительно ускорить скорость расчета.

Теоретическая значимость работы.

Полученные результаты расчета, например, анализ сходимости, являются важными для развития средств моделирования плазмы в скрещенных электрических и магнитных полях, которое является нерешенной проблемой. Помимо устойчивости расчетного алгоритма, необходимо определить адекватность самой модели.

Практическая значимость работы.

В работе представлены пространственные распределения скоростей носителей заряда, концентрации и температуры электронов и проведено сравнение с экспериментальными данными. Выяснено, что разброс значений по температуре электронов и концентрации электронов может быть значительным и зависит от времени и координаты, что может быть причиной в разбросе значений экспериментальных данных. Например, в области магнитного поля электроны совершают колебания от катода до оси и обратно. При приближении электронов к оси концентрация плазмы возрастает. Выяснено, пренебрегать конвективным слагаемым нельзя, при учете конвективных слагаемых в граничных условиях решение меняется, в частности, температура электронов становится ниже и колебания электронов менее выражены.

Методология и методы исследования.

В работе используется множество численных методов для решения системы дифференциальных уравнений: метод конечных элементов, метод Галеркина, вариационный метод, итерационный метод решения системы уравнений, интегрирование по области и контуру, методы наименьших квадратов, градиентный спуск. Для стабилизации и увеличения устойчивости разработана технология извлечения диагональных элементов из слагаемых уравнений, используется метод с нижней релаксацией.

Используются методы для увеличения скорости вычисления: устранение нулевых элементов матрицы с помощью системы указателей, разделение матрицы на постоянную и переменную часть, используются методы распараллеливания задачи.

Положения, выносимые на защиту.

1) В рассмотренной модели пренебрегать конвективным и временным слагаемым плазмы нельзя. Подтверждением являются разные результаты при постановке граничных условий с учетом конвективного слагаемого и без его учета.

2) В рассмотренной модели температура электронов зависит от наличия дисбаланса заряда в магнетроне и колебаний плотности и скорости, от величины скорости. При отсутствии колебаний и высоких скоростей температура снижается.

3) Проведена верификация расчетного алгоритма, качество полученных результатов зависит от вида использованной модели и граничных условий.

Достоверность полученных результатов.

Для обеспечения достоверности полученных результатов проведена верификация разработанной программы с помощью решения более простых задач, например, уравнение теплопроводности с различными граничными условиями и геометриями, уравнение Бюргерса и задача, аналогичная исходной без действия силы Лоренца и уравнения теплопроводности.

Во время расчета осуществляется контроль невязки решения, в случае роста невязки расчетный процесс останавливается, поэтому результаты расчета не содержат данных, искаженных расходимостью задачи.

Достоверность результатов во многом определяется используемой моделью плазмы. В частности, результаты чувствительны к граничным условиям. В работе обнаружены случаи, когда результаты расчета не являются достоверными, например, при бомбардировке электронами анода или ионами катода. Из-за ограниченного выходящего потока наблюдаются колебания концентрации на уровне размера сетки, что не является физическим результатом. Поэтому вопрос стоит больше сколько не о корректности расчетного алгоритма, сколько о адекватности модели и корректности граничных условий.

В модели есть множество упрощений, например, не учитывается процесс рекомбинации электронов и ионов, искажение магнитного поля движением носителей заряда. Несмотря на слабые токи в магнетроне в целом, в определенных областях влияние этих процессов может быть значительным. Влияние данных процессов не выяснено, однако, эти процессы могут быть учтены при усовершенствовании модели.

Апробация результатов работы.

Материалы диссертации были представлены в научно-образовательном центре Б.П. Вейнберга на научных семинарах. Методы решения и алгоритмы были апробированы в компании ООО «Globexu», которая, в частности, занимается разработкой программного обеспечения с использованием метода конечных элементов. В результате апробации в данной компании были внесены изменения в исходный код программы, улучшающие качество и скорость работы программы. Обсуждены возможности применения программы с представителем АО НПФ «Микран» для моделирования СВЧ-фильтров. Также выполнена визуализация результатов, и выложены в сеть результаты расчета с временными зависимостями распределений концентраций, скоростей и потенциала.

Структура работы.

Работа содержит 4 основные главы, первая глава посвящается теоретическому материалу и содержит описание методов моделирования, модели плазмы. Вторая глава содержит описание расчетного алгоритма и методы оптимизации вычислительного процесса. Третья глава описывает более подробно структуру, архитектуру кода. Четвертая глава содержит результаты расчета и верификацию разработанной программы.

Глава 1. Метод моделирования магнетронной распылительной системы.

Для моделирования магнетронной распылительной системы необходимо построить модель кинетики плазмы. В диссертации используется двухкомпонентная модель, которая описывается с помощью 8 дифференциальных, 6 интегральных и 2 алгебраических уравнений. Далее необходимо определить граничные условия для потока концентрации и энергии электронов на границе, определить геометрию расчетной области, выбрать метод решения системы дифференциальных уравнений.

Данная глава описывает вышеперечисленные задачи и содержит описание системы дифференциальных уравнений, граничных условий, расчетной области и метода моделирования.

1.1. Объект моделирования

Для определения расчетной области задачи используется геометрия прямого магнетрона, имеющего цилиндрическую симметрию и представленного на рисунке 1.1. Напряжение, подаваемое на катод, составляет -320 В, анодом является стенка камеры и находится под напряжением 0 В. В камеру осуществляется подача рабочего газа (аргон). Поддержка вакуума осуществляется с помощью турбомолекулярного насоса, скорость откачки 150 л/с. Давление в камере может варьироваться от 0.05 до 0.4 Па, в диссертации моделируется давление 0.1. Ток и мощность также варьируется, при мощности 1 кВт ток равен 1 А. С помощью спектрометра и зонда возможно измерение концентрации плазмы и температуры электронов, концентрация плазмы находится в пределах от 10^{15} до 10^{17} м⁻³, температура порядка 7-8 эВ. В качестве материала мишени может использоваться титан.

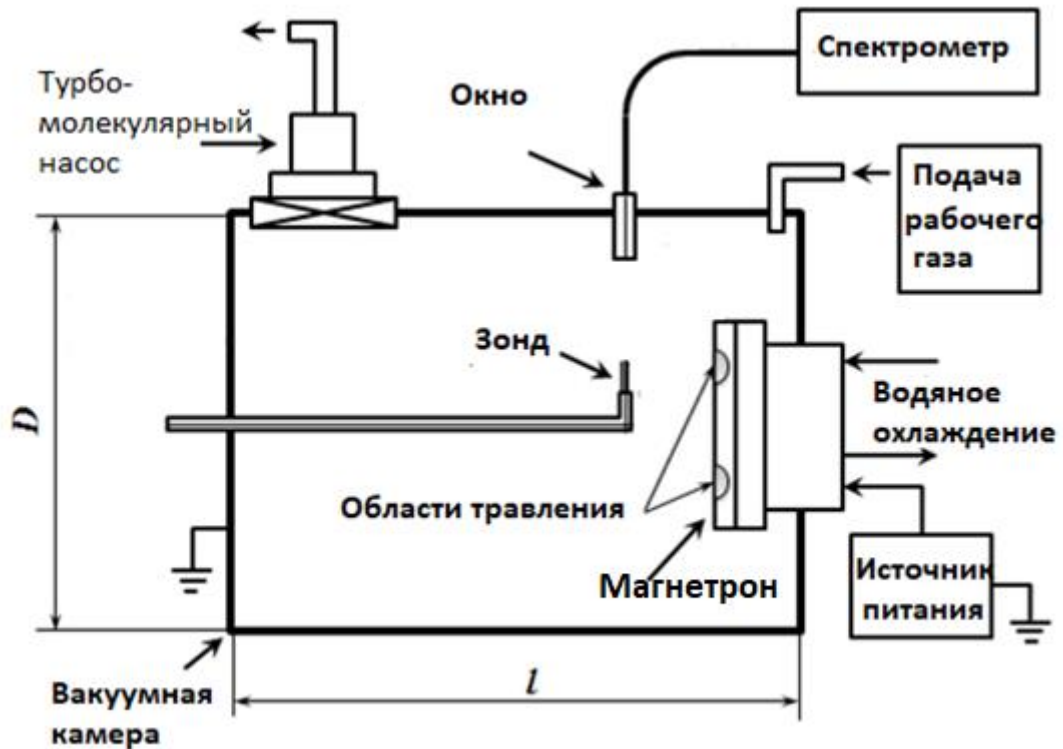


Рисунок 1.1 – Схема установки магнетронной распылительной системы, диаметр камеры $D = 380$ мм, длина камеры $l = 380$ мм.

Напряжение на катоде подается импульсами с частотой 60 кГц. Для упрощения задачи при расчете напряжение полагается постоянным. Симметрия расчетной области и симметрия граничных условий не обеспечивает полностью симметричность решения. Это подтверждают результаты расчета турбулентных потоков с помощью прямого численного решения (DNS) или решение задач с автоколебаниями. Более того, уравнения не имеют цилиндрическую симметрию из-за наличия векторного произведения в слагаемых. В диссертации задача считается в цилиндрической системе координат, вопрос о влиянии такого допущения остается открытым. В результате работы был разработан метод построения трехмерных сеток, однако, не был применен из-за ограниченности вычислительных мощностей и незавершенностью алгоритма для моделирования на графических картах.

1.2. Система уравнений для моделирования кинетики плазмы.

Система дифференциальных уравнений кинетики плазмы содержит 8 дифференциальных уравнений: уравнения неразрывности для электронов и ионов аргона (1.1) и (1.2); уравнения для скоростей ионов и электронов (1.3) и (1.4); уравнение для температуры электронов (1.5); уравнение для электрического потенциала (1.6). Магнитное поле полагается стационарным.

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla(n_e \mathbf{v}_e) = n_e n_a K_{iz} \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla(n_i \mathbf{v}_i) = n_e n_a K_{iz} \quad (1.2)$$

$$\begin{aligned} m_e n_e \left[\frac{\partial \mathbf{v}_e}{\partial t} + (\mathbf{v}_e \nabla) \mathbf{v}_e \right] \\ = -en_e (\mathbf{E} + \mathbf{v}_e \times \mathbf{B}) - \nabla(n_e e \theta_e) - (m_e f_{iz} + e \mu_e) n_e \mathbf{v}_e \end{aligned} \quad (1.3)$$

$$m_i n_i \left[\frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} + (\mathbf{v}_i \nabla) \mathbf{v}_i \right] = en_i \mathbf{E} - \nabla(n_i k T_i) - m_i f_{iz} n_e \mathbf{v}_i - m_i n_i f_{mi} \mathbf{v}_i \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial(n_e \theta_e)}{\partial t} + \nabla \mathbf{Q}_e = -\frac{2}{3} n_e \mathbf{v}_e \mathbf{E} - \frac{2}{3} \frac{n_e n_a \alpha_e}{e} \quad (1.5)$$

$$\Delta \varphi = -\frac{e}{\varepsilon_0} (n_i - n_e) \quad (1.6)$$

$$\vec{E} = -\nabla \varphi \quad (1.7)$$

$$\vec{Q}_e = -n_e \theta_e \vec{E} - \nabla(n_e \theta_e D_{ee}) + \frac{3}{5} \mu_e \vec{B} \times \vec{Q}_e \quad (1.8)$$

Где n_e, n_i, n_a – концентрация электронов, ионов и нейтральных атомов [м^{-3}]; \vec{v}_e, \vec{v}_i – скорости электронов и ионов [м/с]; θ_e – температура электронов [эВ]; φ – электрический потенциал [В]; K_{iz} – коэффициент ионизации; \vec{E} – напряжённость электрического поля; \vec{B} – вектор индукции магнитного поля; e – величина элементарного заряда; m_e – масса электрона; f_{iz} – частота ионизации; μ_e – подвижность электронов; m_i – масса атома аргона; k – постоянная Больцмана; α_e – коэффициент потери энергии электрона; ε_0 – диэлектрическая постоянная; \vec{Q}_e – плотность потока температуры электронов; D_e – коэффициент диффузии; μ_ε – подвижность электронов в энергетическом пространстве; D_ε – коэффициент диффузии в энергетическом пространстве.

Источник в уравнениях неразрывности (1.1) и (1.2) соответствует процессу ионизации атомов аргона, коэффициент ионизации зависит от температуры и рассчитывается через выражение (1.13), σ_{iz} – микроскопическое сечение ионизации, которое зависит от температуры электронов.

Зависящие от температуры электронов значения рассчитываются следующим образом:

$$\mu_e = -\frac{e}{3} \sqrt{\frac{2}{m_e}} \int_0^\infty \frac{\varepsilon}{\sigma_{em} n_a} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[\frac{f_\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}} \right] d\varepsilon \quad (1.9)$$

$$D_e = \frac{1}{3} \sqrt{\frac{2}{m_e}} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}}{\sigma_{em} n_a} f_\varepsilon d\varepsilon \quad (1.10)$$

$$\mu_\varepsilon = -\frac{2e}{9n_a \theta_e} \sqrt{\frac{2}{m_e}} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^2}{\sigma_{em}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[\frac{f_\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}} \right] d\varepsilon \quad (1.11)$$

$$D_\varepsilon = \mu_\varepsilon = \frac{2}{9n_a\theta_e} \sqrt{\frac{2}{m_e}} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^2}{\sigma_{em}} f_\varepsilon d\varepsilon \quad (1.12)$$

$$K_{iz} = \int_{\varepsilon_{iz}}^\infty \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m_e}} \sigma_{iz} f_\varepsilon d\varepsilon \quad (1.13)$$

$$\alpha_e = \frac{2m_e}{m_a} \sqrt{\frac{2}{m_e}} \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} \sigma_{em} f_\varepsilon d\varepsilon + \sum_j \varepsilon_j K_j + \varepsilon_{iz} K_{iz} \quad (1.14)$$

Граничные условия для уравнения неразрывности электронов и ионов имеют следующий вид:

$$(\vec{n}\vec{\Gamma}_e)_s = -\mu_e n_e (\vec{n}\vec{E}) \delta_E^- + \frac{1}{4} n_e \langle v_e \rangle - \gamma_i (\vec{n}\vec{\Gamma}_i)_s \quad (1.15)$$

$$(\vec{n}\vec{\Gamma}_i)_s = \mu_i n_i (\vec{n}\vec{E}) \delta_E^+ + \frac{1}{4} n_i \langle v_i \rangle \quad (1.16)$$

Первое слагаемое в выражениях (1.15) и (1.16) отвечают выход носителей заряда через границы за счет напряженности электрического поля и зависит от направления вектора напряженности электрического поля и нормали границы (нормаль границы идет от области). $\delta_E^- = 1$, $\delta_E^+ = 0$ если скалярное произведение нормали и \vec{E} больше нуля; $\delta_E^- = 0$, $\delta_E^+ = 1$ — если меньше нуля. Ввод операторов δ_E^- и δ_E^+ объясняется тем, что от стенки не должны поступать внутрь области носители заряда для данного слагаемого.

Второе слагаемое отвечает потери носителей заряда за счет распределения скоростей у носителей заряда, которое связано с температурой и тепловой скоростью $\langle v_e \rangle = \sqrt{\frac{8e\theta_e}{\pi m_e}}$. Третье слагаемое в граничном условии для электронов соответствует вторичной эмиссией электронов.

В работе рассмотрены также другие граничные условия для потока на границе. Граничные условия (1.15) и (1.16) не учитывают конвективное слагаемое и магнитное поле, что приводит к тому, что поток электронов, падающих на границу выше потока, задаваемого граничным условием, что подтверждается расчетами. Для устранения проблемы поставлено граничное условие открытой границы, если поток направлен из области, и закрытой границы, если поток направлен внутрь области.

Граничное условие для температуры электронов имеет следующий вид:

$$(\vec{n}\vec{Q}_e)_s = -\mu_e n_e \theta_e (\vec{n}\vec{E}) \delta_E^- + \frac{1}{4} n_e \theta_e \langle v_e \rangle - \gamma_i (\vec{n}\vec{\Gamma}_i)_s \varepsilon_0 \quad (1.17)$$

Где $\varepsilon_0 = 1$ эВ – энергия вторичных электронов.

Граничные условия для электрического потенциала: граничное условие первого рода на катоде – 320 В, на аноде – 0 В. Для улучшения сходимости значения потенциала на границах не фиксируется и задается через граничное условие третьего рода:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = \alpha (\varphi - \varphi_0) \quad (1.18)$$

Коэффициент α выбран большим, чтобы значение потенциала было близко к 320 В и 0 В.

Анализируя уравнение (1.3) можно сделать вывод, что задача, строго говоря, не сводится к двумерной из-за наличия векторного произведения, т.е. угловая компонента скорости в цилиндрической системе координат не равна нулю. Если пренебречь угловой компонентой, то вклада от магнитного поля в уравнение (1.3) не будет, поэтому пренебрегать угловой скоростью нельзя. Тем не менее, можно выразить угловую скорость через другие компоненты скорости. Распишем более детально силу Лоренца:

$$\vec{v} \times \vec{B} = \begin{vmatrix} \vec{e}_r & \vec{e}_\varphi & \vec{e}_z \\ v_r & v_\varphi & v_z \\ B_r & 0 & B_z \end{vmatrix} \quad (1.19)$$

Угловая скорость связана с другими компонентами скорости следующим образом:

$$v_{\varphi} = \mu_e (v_r B_z - v_z B_r) \quad (1.20)$$

Подставляя (1.19) в (1.18) можно более подробно расписать силу Лоренца:

$$\begin{aligned} \vec{e}_r: \mu_e B_z (v_r B_z - v_z B_r) \\ \vec{e}_z: \mu_e B_r (v_z B_r - v_r B_z) \end{aligned} \quad (1.21)$$

Из уравнения (1.8) также видно, что угловая компонента потока температуры электронов не равна нулю, раскрытие векторного произведения в (1.8) происходит таким же образом, как и для уравнения для скорости электронов (1.3).

1.3. Метод конечных элементов.

В основу метода решения системы дифференциальных уравнений лежит метод конечных элементов. Расчетная область разбивается на конечные элементы, в качестве конечных элементов выбраны треугольники, а в качестве аппроксимирующей функции – линейная аппроксимация.

Использование аппроксимации переменной внутри конечного элемента – одно из преимуществ использования метода конечных элементов по сравнению с методом конечных разностей и метода контрольных объемов, в котором дискретизация переменных имеет ступенчатый вид, т.е. переменные (концентрация, скорость, температура) испытывают разрыв в узлах сетки, что приводит к некорректности с точки зрения решения газодинамической задачи (к которой относится задача моделирования плазмы). Для использования метода конечных разностей в газодинамических задачах используют специальные разностные схемы (метод Годунова), однако, адаптация

конечных разностей к модели плазмы затруднена из-за сложности и само согласованности задачи.

Из-за взаимосвязи переменных между собой необходимо обратить особое внимание на сходимость решения. Для обеспечения лучшей сходимости в основу метода конечных элементов положен вариационный принцип – система уравнений для искомых переменных строится исходя из минимизации G , экстремум которого соответствует решению системы дифференциальных уравнений:

$$err = \int G \left(x, y, \Phi, \frac{\partial \Phi}{\partial x}, \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) dx dy \rightarrow min \quad (1.22)$$

Таким образом, для решения системы дифференциальных уравнений необходимо определить вид функционала для каждого из дифференциальных уравнений. Еще одним из преимуществ использования линейной аппроксимации – это соответствие вариационного метода и метода Галеркина, в котором уравнение интегрируется по пространству после умножения на функцию формы. Функция форма – это функция весового коэффициента, которая равна 1 в узле и 0 в других узлах конечного элемента:

$$\Phi(x, y) = \sum_j F_j(x, y) \Phi_j \quad (1.23)$$

Φ – некоторая переменная, F_j – функция формы, Φ_j – значение переменной в узле, j – номер узла в конечном элементе.

Вид функции формы может быть разным, например, логарифмическим. Основным недостатком линейной аппроксимации является возможность переменной принять отрицательное значение, например отрицательными могут стать концентрация или температура, поэтому в других расчетных пакетах, например, ANSYS – FLUENT, аппроксимация имеет более сложный вид, основанный на решении базовых простых задач с использованием критерия подобия (например, число Пекле). При этом в FLUENT используется экспоненциальная аппроксимация. Использование такой аппроксимации с

использованием вариационного метода затруднено: затруднен поиск функционала, затруднена реализация построения системы уравнений из-за экспоненты (необходимость разложения экспоненты в ряд с некоторой точностью).

С другой стороны, в ходе расчетов выяснено, что сходимость при использовании линейной аппроксимации выше: невязка в расчетном алгоритме для уравнения неразрывности сходится существенно лучше, чем в FLUENT, где невязка уравнения неразрывности, как правило, имеет ограниченную сходимость (невязка перестает снижаться при относительно высоком значении и во время внутренних итераций спадает слабо). Наличие отрицательных значений концентрации скорее свидетельствует о высоких значениях шага по времени, большого размера сетки или некорректности решаемой задачи.

При построении модели плазмы учтена возможность появления отрицательных значений. В дифференциальных уравнениях отсутствуют операции деления, например, деления на концентрацию в уравнении для скорости. Расчет производится точно с единственным допущением - линейная аппроксимация внутри конечных элементов. Итерационным способом решается система нелинейных уравнений с максимальным порядком полинома 5.

1.4. Вариационный метод и метод Галеркина.

Как было указано выше, при использовании линейной аппроксимации вариационный метод соответствует методу Галеркина (если в качестве базиса использовать функции формы), что существенно упрощает построение системы уравнений для получения решения. Проблемой вариационного метода является сложность получения или проблема существования необходимого функционала, поэтому использование более сложных расчетных схем для вариационного метода проблематично.

Функционал $G(x,y)$ из (1.1) при минимизации соответствует следующему уравнению:

$$G_z - \frac{\partial}{\partial x}\{G_p\} - \frac{\partial}{\partial y}\{G_q\} = 0 \quad (1.24)$$

Где $p = \frac{\partial \Phi}{\partial x}$, $q = \frac{\partial \Phi}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial x}\{G_p\}$ и $\frac{\partial}{\partial y}\{G_q\}$ – полные производные по x и по y соответственно:

$$\frac{\partial}{\partial x}\{G_p\} = G_{px} + G_{pz} \frac{\partial z}{\partial x} + G_{pp} \frac{\partial p}{\partial x} + G_{pq} \frac{\partial q}{\partial x} \quad (1.25)$$

$$\frac{\partial}{\partial y}\{G_q\} = G_{qy} + G_{qz} \frac{\partial z}{\partial y} + G_{qp} \frac{\partial p}{\partial y} + G_{qq} \frac{\partial q}{\partial y} \quad (1.26)$$

Таким образом, необходимо определить функционал G , который бы соответствовал минимуму невязки (1.1) и уравнениям (1.4) и (1.5). Уравнения (1.4) и (1.5) определяют вид дифференциального уравнения. Фактически, необходимо решить обратную задачу: имея дифференциальные уравнения необходимо определить вид функционала, что может быть затруднительно при моделировании сложных слагаемых в дифференциальном уравнении.

Минимизация ошибки (1.1) производится по неизвестным переменным – значениям концентрации, скорости, потенциала, температуры в узлах расчетной сетки. Влияние узла на невязку ограничено количеством конечных элементов, которые содержат этот узел. Таким образом, система алгебраических уравнений строится из выражения (1.1). Система уравнений имеет разреженный вид и включает только коэффициенты матрицы при соседних узлах. Разреженность матрицы необходимо учитывать при разработке архитектуры программы.

Если в уравнении присутствует некоторый постоянный источник Q , то его реализация в дифференциальном уравнении происходит следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial \Phi_p} \int Q \cdot \Phi \cdot dxdy = \int Q F_p dxdy = \sum_i Q M_p^i$$

Где p – узел элемента, i – конечный элемент, содержащий узел p . $M_p^i = \int F_p^i dxdy$. M_p^i называется моментами функциями формы некоторого порядка, в данном случае – первого порядка. Эти величины рассчитываются заранее перед расчетом (интегрирование по конечному элементу). Интегрирование величины по произвольной области и по контуру в готовых математических библиотеках нет, поэтому реализован собственный алгоритм. В текущем случае, возможно произвести суммирование заранее, увеличив скорость расчета. Такой механизм реализован при расчете, матрица коэффициентов делится на постоянные и обновляемые части матрицы.

Аналогичным способом реализуется нестационарное слагаемое:

$$\frac{\partial}{\partial \Phi_p} \int \frac{\partial \Phi}{\partial t} \cdot \Phi \cdot dxdy = \int \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \Phi_p \partial t} \Phi + \frac{\partial \Phi}{\partial t} \frac{\partial \Phi}{\partial \Phi_p} \right) dxdy = \int \frac{\partial \Phi}{\partial t} F_p dxdy$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \Phi_p} = F_p(x, y), \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \Phi_p \partial t} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial t} \approx \frac{\Phi^n - \Phi^{n-1}}{\Delta t}$$

n – Текущий временной слой, $n-1$ – предыдущий временной слой, Δt – шаг по времени. Для реализации нестационарного слагаемого необходим момент функции формы второго порядка, а в случае нестационарного слагаемого ($n \frac{\partial \Phi}{\partial t}$) в уравнении для скорости – третьего порядка.

Оператор Лапласа реализуется следующим образом:

$$\int \Delta \Phi F_p dxdy = - \int \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \frac{\partial F_p}{\partial x} + \frac{\partial \Phi}{\partial y} \frac{\partial F_p}{\partial y} \right) dxdy + \oint \frac{\partial \Phi}{\partial n} F_p dl$$

Интеграл по контуру реализует граничные условия путем задания производной переменной по нормали.

Дивергенция реализуется следующим образом:

$$\int \text{div} \vec{\Phi} F_p dxdy = - \int \left(\Phi_x \frac{\partial F_p}{\partial x} + \Phi_y \frac{\partial F_p}{\partial y} \right) dxdy + \oint \Phi_n F_p dl$$

Для реализации граничных условий используются моменты функции формы с интегрированием элемента границы. Рассмотрим более подробно граничное условие третьего рода $\frac{\partial \Phi}{\partial n} = \alpha(\Phi_0 - \Phi)$:

$$\oint \frac{\partial \Phi}{\partial n} F_p dl = \oint \alpha(\Phi_0 - \Phi) F_p dl = \alpha \Phi_0 M_p - \alpha \sum_j M_{pj} \Phi_j$$

Таким образом, для реализации граничного условия третьего рода необходимы моменты первого и второго порядка. С помощью граничных условий третьего рода можно задать условие первого рода (фиксация значений переменной) путем задания высокого значения α , сходимость в таком случае выше.

Рассмотренный метод может быть применен при решении других актуальных задач, в перспективе возможно решение задач моделирования СВЧ – фильтров, где необходимо решение дифференциальных уравнений для каждой из частот. Т.е. линейную аппроксимацию можно проводить следующим образом:

$$\Phi = Ax + By + C\omega + D$$

При решении задач СВЧ-фильтров в качестве независимой переменной выступает частота.

Для перехода в цилиндрическую систему координат достаточно заменить метод вычисления моментов функции формы, умножив подынтегральную функцию на радиус. Например, вычисление момента второго порядка в цилиндрической системе координат:

$$M_{ij} = \int F_j F_i r dr dx$$

Это можно показать на примере оператора Лапласа.

$$\begin{aligned} & \int \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) \right) F_p r dr dx \\ & = - \int \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} F_{px} + \frac{\partial \Phi}{\partial r} F_{pr} \right) F_{px} r dr dx + \oint \frac{\partial \Phi}{\partial n} F_p r dr dx \end{aligned}$$

Сравнивая с предыдущими выражениями выше, можно убедиться, что для учета цилиндрической системы координат достаточно изменить алгоритм

расчета моментов функции формы. Использование такого перехода в цилиндрическую систему координат приводит к точному решению уравнения Лапласа с граничными условиями первого рода на границах, решением которого является логарифмический профиль:

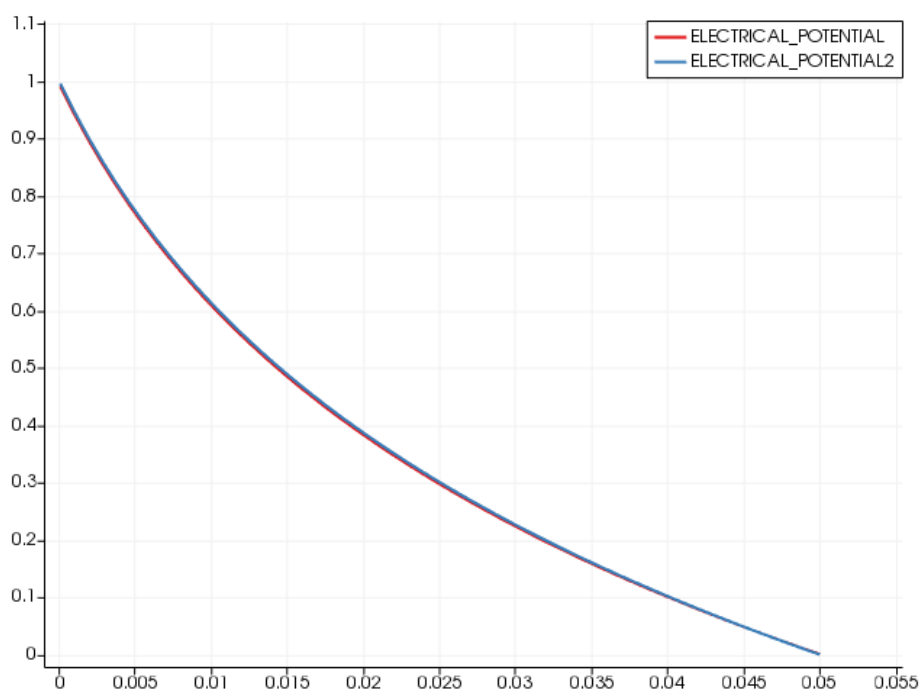


Рисунок 1.2 – Верификация перехода в цилиндрическую систему координат

На графике изображены результаты расчета и точного аналитического решения, которое имеет логарифмический профиль.

Для определения функции формы используется систему трех уравнений:

$$\Phi_j = Ax_j + By_j + C$$

Определяются неизвестные коэффициенты А, В, С и определяется вид функции формы перед Φ_j . Детерминант уравнения соответствует половине площади элемента и определяется следующим образом:

$$\Delta = \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \end{vmatrix}, \quad \Delta_A = \begin{vmatrix} \Phi_1 & y_1 & 1 \\ \Phi_2 & y_2 & 1 \\ \Phi_3 & y_3 & 1 \end{vmatrix}, \quad \Delta_B = \begin{vmatrix} x_1 & \Phi_1 & 1 \\ x_2 & \Phi_2 & 1 \\ x_3 & \Phi_3 & 1 \end{vmatrix}, \quad \Delta_C = \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & \Phi_1 \\ x_2 & y_2 & \Phi_2 \\ x_3 & y_3 & \Phi_3 \end{vmatrix}$$

Далее выражаем функцию формы, номер функции формы соответствует номеру узла в конечном элементе:

$$F_1(x, y) = (x \cdot (y_2 - y_3) + y \cdot (x_3 - x_2) + x_2 y_3 - x_3 y_2) / \Delta$$

Функция формы зависит только от координат, и моменты функции формы могут быть вычислены перед началом расчета. Функция формы может иметь разный вид, в программе COMSOL доступны разные виды функции формы, например, логарифмический вид.

Таким образом, построена модель кинетики плазмы, определена расчетная область и вид граничных условий, выбраны и описаны методы решения системы дифференциальных уравнений. Для получения результатов необходимо построить вычислительный алгоритм и обеспечить приемлемую скорость расчета.

Глава 2. Вычислительный алгоритм.

Для построения программы необходимо описать алгоритмы построения расчетной сетки, интегрирования, распараллеливания и методы повышения устойчивости задачи, общий алгоритм расчета. Эти алгоритмы определяют архитектуру программы.

2.1. Интегрирование по конечному элементу и контуру области.

Для определения моментов функции формы необходимо провести интегрирование произведений функций форм по области конечного элемента и элемента границы. Несмотря на линейную аппроксимацию переменных интегрирование усложняется формой конечного элемента, поэтому интегрирование производится численным способом.

Сначала определяются максимальные и минимальные координаты узлов конечного элемента, строится сетка для численного интегрирования с равным числом разбиений по оси абсцисс и ординат (это обеспечивает адаптивность интегрирования к форме элемента), с помощью псевдоскалярного произведения определяется принадлежность координаты узла построенной вспомогательной сетки к рассматриваемому конечному элементу. Далее производится суммирование, осреднение и умножение на площадь элемента значений подынтегральной функции в узлах, принадлежащих к вспомогательной сетке.

Для вычисления моментов функции формы для границ расчетной области (интеграл по контуру), необходимо верно определить направление интегрирования в каждом из граничных элементов. В качестве направления интегрирования выбрано направление против часовой стрелки. Для правильного интегрирования производится вычисление векторного произведения между направлением границы и вектором, проведенным из центра конечного элемента к границе области.

2.2. Дискретизация расчетной области.

Для применения метода конечных элементов необходимо провести дискретизацию расчетной области. Поскольку используется линейная аппроксимация переменных оптимально использовать треугольные конечные элементы, поскольку количество узлов в элементе соответствует количеству неизвестных коэффициентов в линейной аппроксимации.

Первый этап дискретизации – создание правильных треугольников в расчетной области. Граница расчетной сетки на первом этапе не совпадает с границей расчетной области. Второй этап – оптимизация расчетной сетки, производится выравнивание конечных элементов и процесс корректировки граничных узлов для соответствия сетки и расчетной области. Методом дихотомии определяется направление движения граничного узла, которое соответствует минимальному расстоянию между узлом и границей расчетной области. Создается фиксированное число направлений корректировки граничных узлов, определяется расстояния между узлом и границей вдоль каждого направления, осуществляется поиск минимального расстояния.

Итерационным способом происходит корректировка координат граничных узлов. Поскольку во время этого процесса происходит деформация граничных конечных элементов, введен алгоритм выравнивания элементов. Выравнивание осуществлено следующим образом: определяется следующая величина, направление которой соответствует направлению смещения:

$$\vec{F} = \varepsilon \cdot \sum_j (distance(\vec{x}_p, \vec{x}_j) - size) \cdot norm(\vec{x}_j - \vec{x}_p) \quad (7.1)$$

Где, ε – параметр, определяющий скорость выравнивания, необходим, чтобы во время совершения итераций не произошло пересечение сторон граничных элементов, характерное значение 10^{-4} . j – это соседние элементы рассматриваемого узла p , $distance$ – расстояние между двумя векторами, $size$ – размер шага расчетной сетки, $norm$ – нормированный вектор. Таким образом, влияние соседнего узла равно нулю, если расстояние между узлами равно шагу расчетной сетки. Если ввести пространственное распределение

значения *size*, возможно сгущение сетки в области высоких градиентов переменных.

Количество соседних узлов может быть различно, у граничных конечных элементов связей с узлами меньше. Во время построения сетки введен алгоритм удаления элементов, у которых количество связей мало, такие элементы могут вырождаться во время оптимизации расчетной сетки.

Необходимо учесть, что граничные узлы нельзя смещать в сторону от расчетной области, иначе будет выход узла за расчетную область. В таком случае направление смещения происходит вдоль проекции силы на направление границы:

$$\vec{F}_b = \text{dot}(\vec{F}, \text{normal}(\vec{n})) \cdot \text{normal}(\vec{n})$$

\vec{F}_b – направление смещения для граничных элементов, *normal* – поворот вектора на $\pi/2$ против часовой стрелки, \vec{n} – вектор нормали элемента границы (в сторону от расчетной области).

Выравнивание конечных элементов необходимо, поскольку это увеличивает точность метода конечных элементов, уменьшается количество скошенных элементов – источников расходимости решения. В более старом программном обеспечении для построения расчетных сеток (Gambit) имеется анализ на качество расчетных сеток, в современном программном обеспечении (ANSYS) нет возможности мониторинга качества сетки из-за более полной автоматизации построения сетки, что может приводить к появлению скошенных ячеек, резкого изменения размера конечных элементов – еще одного источника расходимости решения. Так, в методе конечных разностей, нельзя использовать сетку с сгущением / растяжением узлов 1.1 из-за потери устойчивости решения. Несмотря на относительную устойчивость метода конечных элементов к этому факту, данное правило рациональней наследовать от метода конечных разностей.

Таким образом, необходимость построения собственного алгоритма построения сетки объясняется необходимостью построения сетки с более

высоким качеством и более простой интеграцией с вычислительным алгоритмом.

Построенный алгоритм позволяет строить сетку на произвольной области, пример сетки приведен ниже:

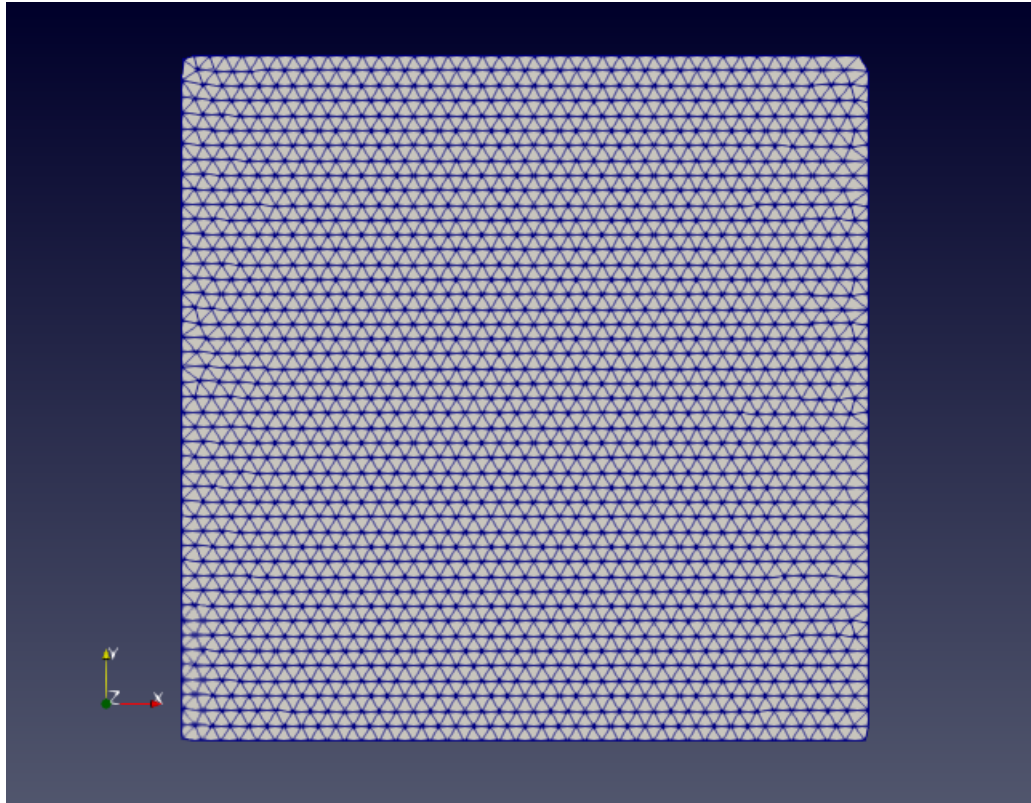


Рисунок 2.1 – Пример расчетной сетки

Если изменять параметр $size$ в выражение (7.1), то возможно сгущение сетки у границы:

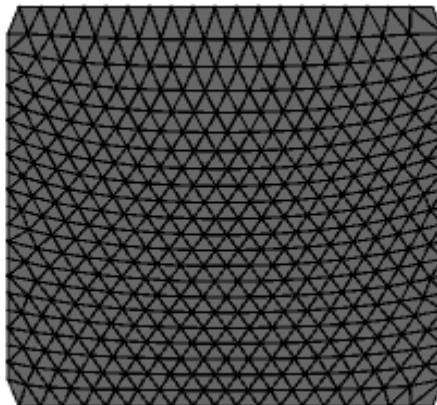


Рисунок 2.2 – Сгущенная к границе расчетная сетка

2.3. Общий вычислительный алгоритм.

Вычислительный алгоритм содержит следующие этапы: инициализация системы дифференциальных уравнений; инициализация переменных; формирование подсеток для распараллеливания задачи; построение постоянной матрицы коэффициентов, которая не меняется при совершении внутренних итераций; внутренняя итерация; обновление непостоянной части матрицы; вычисление невязки; переход на новый временной слой.

Под инициализацией системы дифференциальных уравнений понимается формирование связей между переменными, построении структуры дифференциальных уравнений и граничных условий. На стадии инициализации переменных производится постановка начальных условий и других вспомогательных переменных.

После построения начальной системы дифференциальных уравнений происходит построение идентичных систем уравнений в количестве, соответствующим количеству параллельных вычислительных потоков и числу подсеток. Количество узлов в подсетке одинаковое, что обеспечивает более быструю синхронизацию потоков после расчета. Ниже представлены подсетки (отмечены разным цветом), каждый поток обрабатывает свою подсетку.

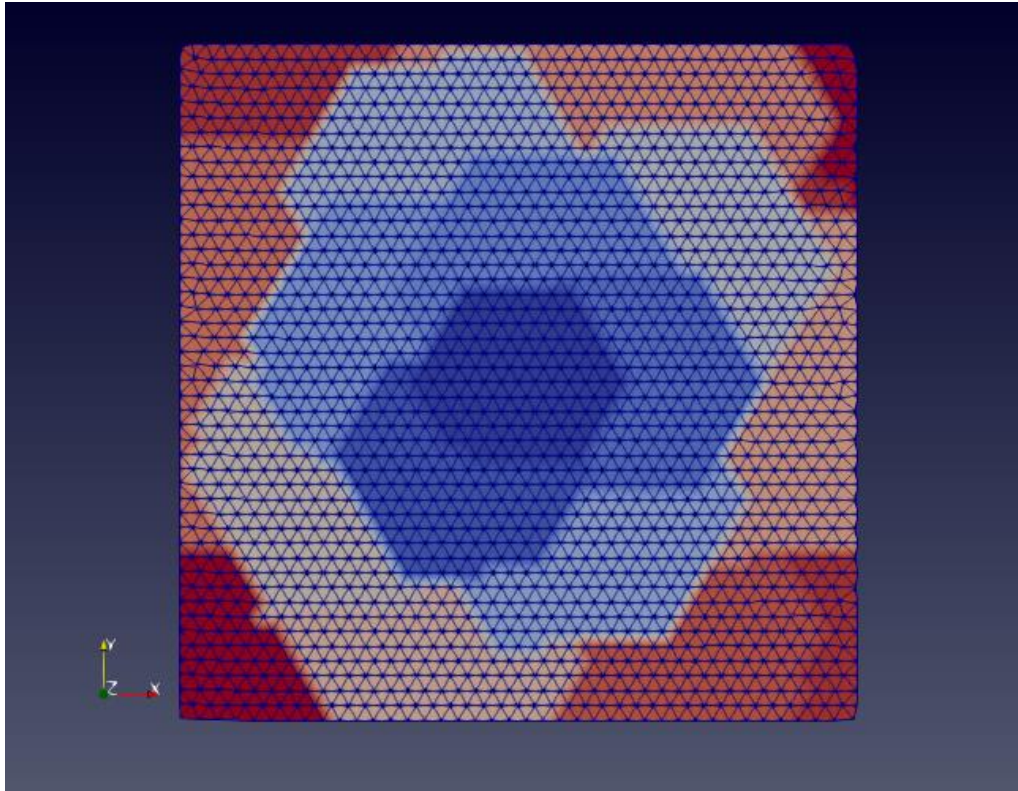


Рисунок 2.3 – Подсетки расчетной области, 16 подсеток, одноступенчатая синхронизация

Во время запуска параллельных потоков, возможно обращение потоков к одному адресу в памяти (в узлах на границе двух подсеток), что может снизить скорость вычисления. Проведен анализ этого влияния путем создания пограничных дополнительных подсеток и введением двухступенчатой синхронизации, где на втором этапе внутренней итерации происходит обработка дополнительных подсеток. Использование двухступенчатой синхронизации потоков снижает скорость вычислений на 10 %, поэтому использование двухступенчатой синхронизации нерационально. Ниже представлено разбиение области в случае двухступенчатой синхронизации:

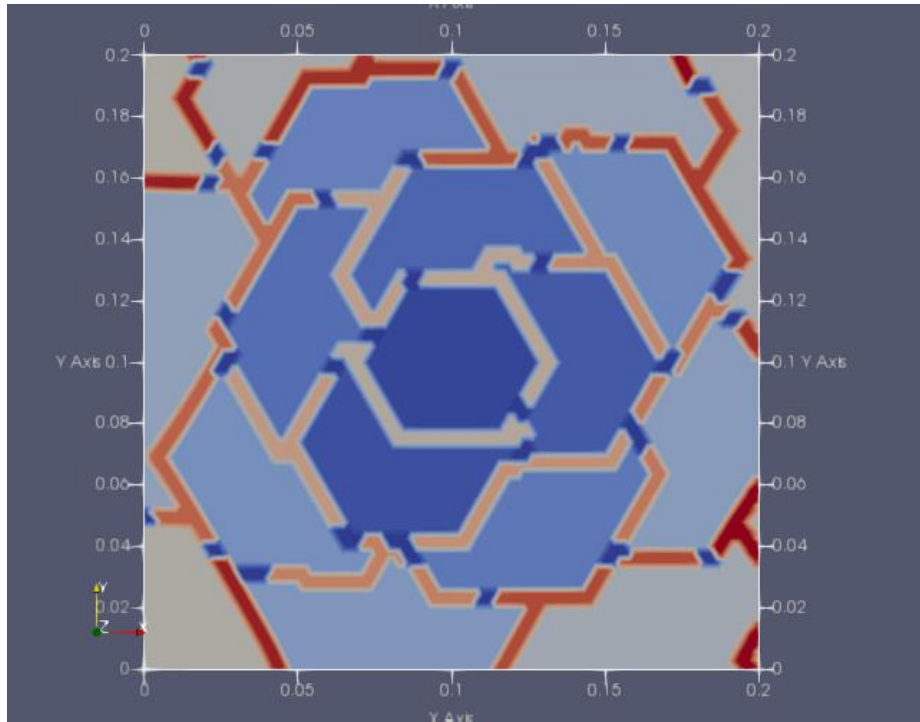


Рисунок 2.4 – Подсетки расчетной области, двухступенчатая синхронизация

Проведен анализ эффективности распараллеливания путем определения скорости вычисления при различном используемом числе ядер процессора:

Таблица 2.1 – Эффективность распараллеливания

Число ядер/логических ядер	Частота процессора	Время исполнения
8/16	3.2 ГГц	77 сек
4/8	3.2 ГГц	143 сек
2/4	3.8 ГГц	232 сек

Таким образом, эффективность распараллеливания высокая, распараллеливание используется при расчете моментов функции формы и при оптимизации расчетной сетки.

Как отмечалось ранее, для ускорения скорости вычисления проведено разделение матрицы системы линейных уравнений, которая строится на внутренней итерации, на две компоненты – постоянную и компоненту, которая зависит от решения, т.е. переменную компоненту.

Постоянная матрица системы линейных уравнений строится на основании наиболее распространённых слагаемых – нестационарного слагаемого, постоянного источника и оператора Лапласа. Это обеспечивает более высокую скорость вычисления уравнения для электрического потенциала и уравнений неразрывности в рассматриваемой системе уравнений. Матрица представляет собой коэффициенты при значениях переменной в рассматриваемом узле (диагональная компонента) и при значениях в соседних узлах.

Переменная матрица строится на основании более сложных слагаемых: нестационарное слагаемое в уравнении для скоростей; источники, зависящие от переменных (например, источник электронов при ионизации в уравнении неразрывности для электронов), конвективные слагаемые, оператор дивергенции. Коэффициенты обновляются на каждой внутренней итерации, при этом происходит выделение диагональных составляющих из слагаемых для увеличения устойчивости расчетного алгоритма. Так, без выделения диагональных компонент из силы Лоренца в уравнении для скорости электронов, существенно снижается устойчивость решения из-за преобладания силы Лоренца вблизи катода над другими слагаемыми в уравнении.

После вычисления коэффициентов, происходит корректировка переменных с применением нижней релаксации:

$$x_i = eps \cdot x^{n+1} + (1 - eps) \cdot x_{i-1}$$

x^{n+1} – полученное в результате итерации значение переменной, x_{i-1} – значение на предыдущей итерации, eps – коэффициент релаксации, в расчетах используется значение от 0.3 до 0.7.

На этом же этапе происходит вычисление невязки, которая служит для остановки вычислений в случае резкого роста невязки. Поскольку вычислительный процесс занимает достаточно количество времени, имеет смысл продолжить расчет, уменьшив коэффициент релаксации или ввести в уравнение оператор Лапласа для сглаживания возмущений решения с

последующим уменьшением коэффициента при операторе Лапласа. Это особенно важно на начальном этапе вычислений, когда переменные изменяются слишком быстро и начальное распределение далеко от решения.

Завершающим этапом решения является переход на новый временной слой, переменным со старого временного слоя присваиваются значения переменной с нового временного слоя. Количество итераций на временном слое фиксировано. В работе была попытка адаптировать число итераций на временном слое, чтобы уменьшить число итераций при малом изменении переменной и увеличить число итераций при значительных изменениях. Однако, адаптация имеет ряд проблем, например, при стационарном поведении уравнения, когда невязка перестает изменяться при переходе на новый временной слой. Также зафиксирована возможность роста невязки при совершении внутренних итераций из-за изменения других переменных.

2.4. Устойчивость расчетного алгоритма.

Во время исследования обнаружена проблема со сходимостью поставленной задачи моделирования кинетики плазмы. Алгоритм расходимости имеет следующий вид: поскольку начальное распределение выбрано равномерным, на начальном этапе расчета у границ возникают возмущения концентрации, которые распространяются внутрь расчетной области. Поскольку у границ концентрация падает, то через некоторое время в область низких концентраций проникает возмущение с высокой амплитудой колебания, что приводит к возникновению крупных областей с отрицательной концентрацией и потере устойчивости решения. Пример неустойчивости приведен ниже:

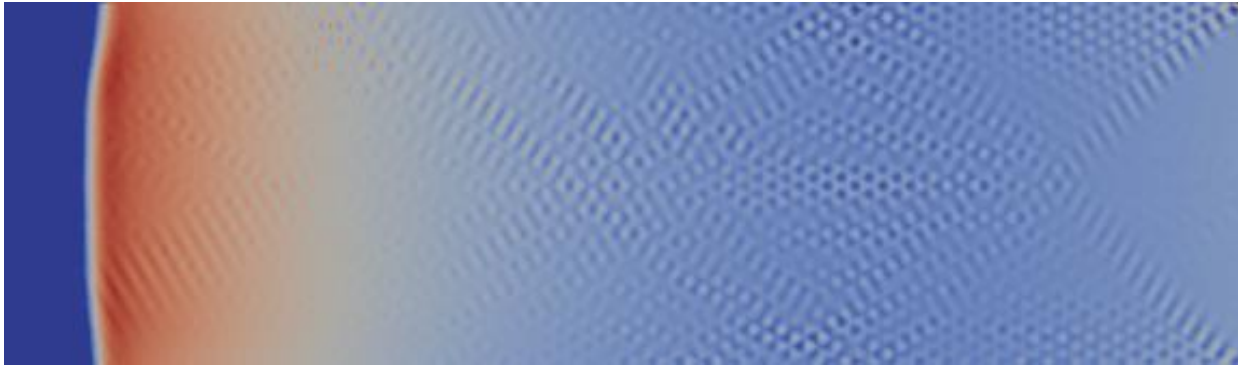


Рисунок 2.5 – Возмущения концентрации электронов в расчетной области, приводящие к расходимости задачи

Колебания распространяются слева на право и достигают области с малой концентрацией (синяя область).

Расходимость решения происходит только спустя значительное время расчета, когда образуются области с малой концентрацией (начальное распределение концентрации равномерное). Этот факт затрудняет отладку расчетного алгоритма.

Для стабилизации решения введен оператор Лапласа, который сглаживает колебания на уровне сетки. Введение оператора имеет под собой физическую основу: оператор Лапласа - это слагаемое второго порядка при переходе от переменных Лагранжа в переменные Эйлера, который не равен нулю в дискретной области.

Выяснено, что оператор Лапласа требуется, когда решение сильно меняется. С течением времени коэффициент при операторе можно уменьшить, когда концентрация электронов в камере уменьшится, а у катода возрастет.

В ходе исследовательской работы была осуществлена попытка добавить стабилизирующий оператор, полностью соответствующий слагаемому второго порядка при переходе к Эйлеровым переменным, т.е. слагаемое имеет вид:

$$u_x \Delta t \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + u_y \Delta t \frac{\partial^2 n}{\partial y^2}$$

n – концентрация, u – скорость

Если $u_y = 0$, то сглаживания вдоль y не происходит. Если электроны передвигаются по x , то возмущения от боковых стенок не сглаживаются и распространяются по всей расчетной области. Таким образом, не хватает смешанной производной концентрации по координатам, вопрос требует более детального изучения.

В ходе расчета производится мониторинг значения невязки, пример поведения невязки изображен ниже:

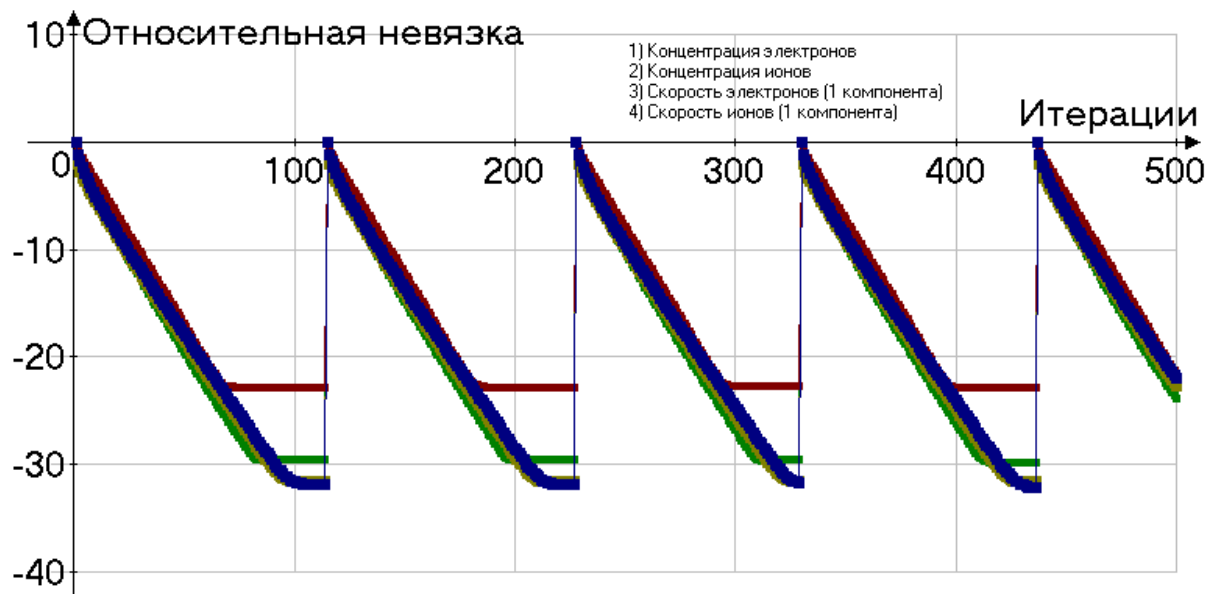


Рисунок 2.6 – Зависимость логарифма относительной невязки от номера итерации

Логарифм относительной невязки нормирован на значение невязки на первой итерации внутри временного слоя и п. Из поведения невязки 2.6. видно, что точность расчета может быть высокой и ограничена точностью математических операций. В ANSYS-FLUENT расчет для уравнений неразрывности не дает такой точности на временном слое, и невязка перестает меняться на определенном уровне.

Стоит отметить, что наличие магнитного поля только улучшает сходимости метода, особенно на начальном этапе расчета. Электроны удерживаются плазмой, скорость электронов ниже, поскольку электроны не ускоряются электрическим полем. Одна из причин расходимости – это

взаимодействие электронов с границей расчетной области. Поток электронов, уходящих из области, ограничен граничными условиями, поэтому у границы возможен рост концентрации и возникновение колебаний концентрации на уровне расчетной сетки.

Общий алгоритм расчета представлен на блок-схеме:

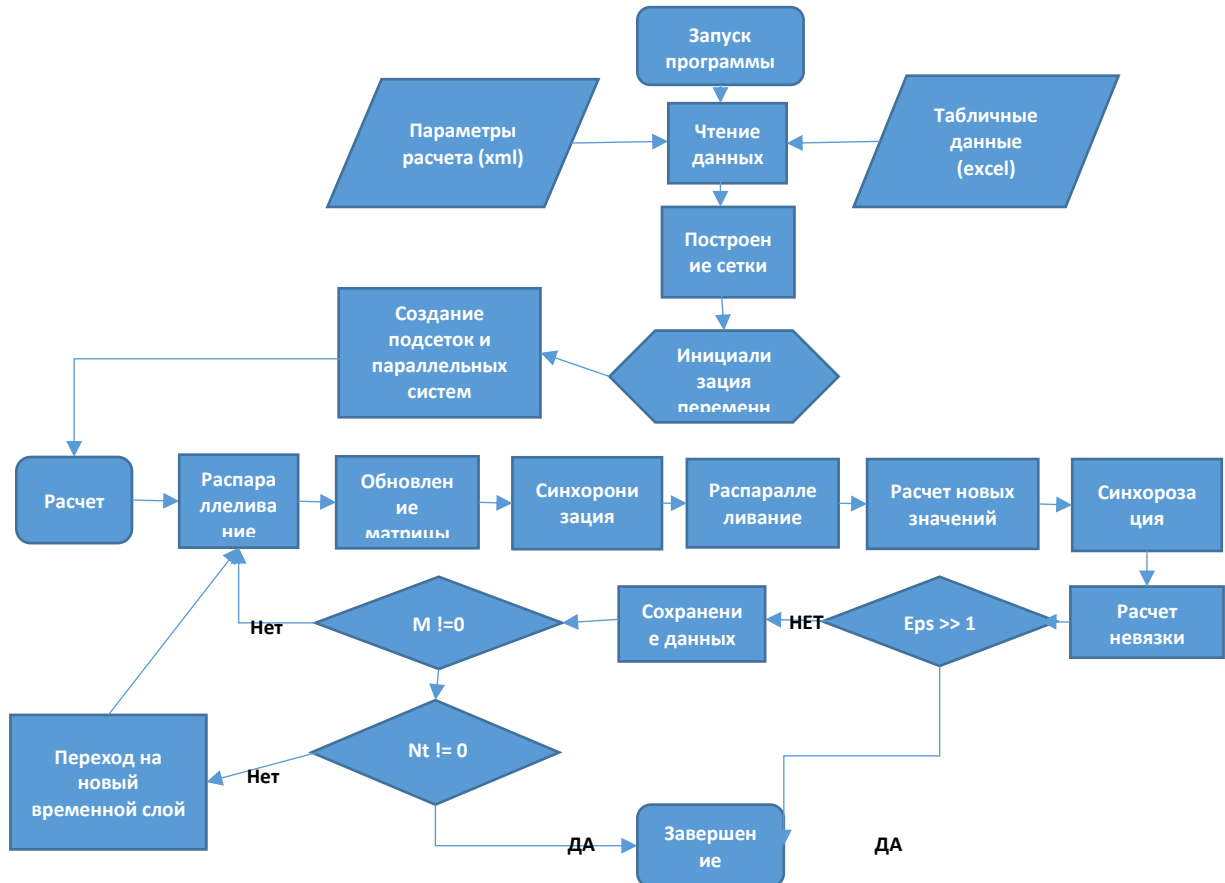


Рисунок 2.7 – Блок-схема расчетного алгоритма, M – число внутренних итераций, Nt – количество временных шагов, eps – невязка (нормирована на невязку на первой итерации).

После запуска программы производится чтение данных зависимостей мобильности электронов, коэффициентов ионизации и других переменных от температуры. Далее считываются параметры расчета (коэффициент релаксации, размер сетки, размер шага по времени и т.д.). Если необходимо продолжить предыдущий расчет, считываются значения переменных из файла. Далее осуществляется построение расчетной сетки. После

построения сетки производится инициализация переменных и уравнений, создаются параллельные версии уравнений, которые решаются в разных вычислительных потоках. Далее запускается основной алгоритм расчета. Сначала корректируется матрица коэффициентов, значения переменных на этом этапе не должны меняться, поэтому после расчета матрицы коэффициентов производится синхронизация потоков, после чего определяются сами новые значения переменных. Во время вычисления новых значений вычисляются и значения невязки. После синхронизации определяется общая невязка для каждого из уравнений. В случае расходимости, программа завершает расчет и запись новых значений не осуществляется. Таким образом, можно вернуться к предыдущему временному слою и принять меры по устранению расходимости (уменьшить коэффициент релаксации или временной шаг).

Таким образом, построен общий алгоритм работы программы и описаны методы для построения программы для расчета.

Глава 3. Структура программы.

Программа пишется на языке программирования C++ в среде разработки Microsoft Visual Studio. Структура программы построена исходя из требований моделирования магнетронной распылительной системы. Первым требованием к архитектуре программы является высокая функциональность и гибкость, возможность построения сложных моделей. Вторым требованием является достаточная скорость вычислений.

1.1. Базовые классы.

К базовым классам относятся классы узла, элемента границы и конечного элемента. Классы содержат указатели на связанные элементы. Объект узла содержит указатели на соседние узлы, указатели на конечные элементы, которые содержат данный узел. Аналогично, конечный элемент содержит указатели на связанные с ним объекты. Линковка объектов происходит на стадии построения расчетной сетки. Каждый объект узла содержит информацию о своей части матрицы коэффициентов, т.е. матрица коэффициентов системы уравнений имеет децентрализованный вид. Это позволяет полностью устранить проблему разреженности матрицы коэффициентов, поскольку нулевых элементов матрицы не существует и на них не выделяется память.

Класс узла содержит следующие поля: вектор указателей на соседние узлы; вектор указателей на конечные элементы, содержащие узел; вектор значений переменных на текущем и предыдущем временных слоях; матрицы коэффициентов в системе линейных уравнений; координата узла; личный номер узла; логическая переменная, указывающая на то, граничный ли узел; индексирующие переменные, указывающие на индекс узла в конечных элементах. Класс узла содержит следующие методы: инициализация индексирующих переменных; функция, определяющая связаны ли два узла; функция, обновляющая связи между узлами (удаление NULL – указателей на

соседние узлы и удаление NULL - указателей на текущий узел у соседних узлов).

Класс элемента границы содержит следующие поля: указатели на узлы из которых состоит элемент границы; указатель на конечный элемент, содержащий данную границу; моменты функции формы (интегралы по контуру); центр, нормаль и длина элемента границы. Класс элемента границы содержит следующие методы: инициализация элемента границы; интегрирование некоторой функции по элементу границы.

Класс конечного элемента содержит следующие поля: указатели на узлы, из которых состоит конечный элемент; указатели на соседние конечные элементы; указатели на элементы границы расчетной области; моменты функции формы; геометрические параметры (площадь, барицентр, максимальное и минимальные координаты). Класс конечного элемента содержит следующие методы: расчет переменных, зависящих только от формы элемента; метод, определяющий принадлежит ли некоторая координата конечному элементу; добавление узла; функция, возвращающая градиент некоторой переменной; интегрирование некоторой функции; сравнение конечных элементов; определение, являются ли два конечных элемента соседними.

Таким образом, построенные базовые классы узла, границы и элемента позволяют свободно получать доступ к соседним узлам или элементам, что не позволяет, например, в полной мере программные модули в других расчетных пакетах (модуль User-Defined functions в ANSYS – FLUENT). Так, задавая граничные условия во FLUENT с помощью программируемого модуля нет возможности получить ссылку на соседние элементы границы или на конечный элемент, что затрудняет постановку граничных условий.

1.2. Класс сетки.

Для объединения объектов базовых классов создан класс сетки, который содержит все узлы, границу и конечные элементы расчетной области и методы построения этих объектов, связывание их в единое целое. Именно с помощью методов класса сетки производится построение узлов и конечных элементов.

Класс сетки содержит следующие поля: размер сетки; логическая переменная, определяющая цилиндрическая система координат или нет; указатель на геометрию расчетной области (на функцию, указывающую принадлежит ли координата геометрии); указатели на все узлы расчетной области; указатели на элементы границы; указатели на все конечные элементы сетки; а также названия переменных. Класс сетки содержит следующие методы: первый этап построения расчетной сетки; оптимизация расчетной сетки; создание конечных элементов и элементов границы на основе узлов; фиксация координат некоторых узлов.

Первый этап построения расчетной сетки – это создание равномерной сетки, линковка узлов, удаление узлов с малым количеством связей. Второй этап построения – это оптимизация, выравнивание конечных элементов, «прилипание» узлов к границе расчетной области. После создания узлов, на их основе начинается формирование конечных элементов и элементов границы – линковка связей и вычисление параметров элементов. Фиксация координат некоторых узлов служит для полного соответствия расчетной сетки и геометрии, например, фиксация угловых узлов в прямоугольной геометрии.

1.3. Класс уравнения.

Для возможности построения модели, создан класс уравнения. Именно с помощью него происходит построение системы дифференциальных уравнений. Для описания уравнения указывается тип слагаемого в дифференциальном уравнении; указываются переменные, которые содержит

слагаемое; указывается метод расчета коэффициента при слагаемом с помощью лямбда-выражений.

Раздел с описанием класса дифференциального уравнения содержит класс слагаемого, класс уравнения, класс граничного условия и класс табличных данных.

Класс слагаемого содержит тип слагаемого (например, нестационарное, оператор Лапласа и т.д.); длину слагаемого – число множителей переменных (например, в слагаемое $n \cdot u_y \cdot B_x$ имеет длину 3); вектор с индексами – определяет какие переменные перемножаются; лямбда-выражения для вычисления постоянных коэффициентов при этих множителях.

Класс граничного условия содержит вектор объектов класса слагаемого (который описан выше); указатели на элементы границы, где задается граничное условие. Класс содержит метод, выделяющий из сетки элементы границы с помощью указателя на функцию, описывающую местоположение границы.

Класс уравнения содержит указатель на сетку; указатели на слагаемые из которых состоит уравнение; указатели на граничные условия; табличные данные; невязку решения; номер уравнения; логическая переменная, указывающая, являются ли данные соответствующие номеру уравнения постоянными (используется для неменяющихся значений магнитного поля); логическая переменная указывающая, должна ли переменная быть больше нуля. Также содержит список перечислений возможных типов слагаемых в дифференциальном уравнении (нестационарное слагаемое, оператор Лапласа, источник, конвективное слагаемое, дивергенция, производная, табличные данные). Слагаемые из перечисленных типов может иметь различную длину (например, дивергенция от вектора и дивергенция от произведения вектора на скалярную величину).

Класс уравнения содержит следующие методы: инициализация переменной; построение постоянной части матрицы; построение переменной части матрицы; внутренняя итерация; переход на новый временной слой;

возвращение на старый временной слой. На рисунке 3.1. приведен пример учета магнитного поля в уравнении для скорости электронов:

```
Term.Type = EQUATION::SOURCE;
Term.Len = 4;
Term.ConstCell = [&](FemCell2D c)
{
    return qe * c->GetValueBarycenter(CMU_CORD) / ng;
};
Term.param1[0] = ELECTRON_DENSITY;
Term.param1[1] = ELECTRON_VELOCITY_Y;
Term.param1[2] = MAG_FIELD_X;
Term.param1[3] = MAG_FIELD_X;
Equation.TERMS.push_back(Term);
```

Рисунок 3.1 – Пример построения уравнения в программе

Первая строчка кода указывает тип слагаемого – источник. Вторая строчка указывает количество множителей – переменных в слагаемом. Далее указывается метод расчета коэффициента, в данном случае подвижность электронов (CMU_CORD) считается постоянной. Лямбда-выражение принимает указатель на ячейку. Далее указываются переменные в слагаемом, в данном случае это концентрация электронов, радиальная компонента скорости и квадрат аксиальной компоненты магнитного поля. Таким образом, слагаемое реализовано с помощью полинома 4 степени. Далее построенное слагаемое записывается в уравнение.

На рисунке 3.2. приведен пример реализации граничного условия:

```
Term.ConstSide = [&](FemSide2D s) //уход электронов за счет скорости
{
    if (dot(s->CellLink->GetGradient(ELECTRICAL_POTENTIAL), s->Norm) <= 0.0) return 0.0;
    return dot(s->CellLink->GetGradient(ELECTRICAL_POTENTIAL), s->Norm) / ng;
};
Term.Len = 2;
Term.param1[0] = ELECTRON_DENSITY;
Term.param1[1] = CMU_CORD;
Bound.TERMS.push_back(Term);
```

Рисунок 3.2 – пример реализации граничного условия, уход электронов с границы за счет скорости.

Граничное условие зависит от направления напряженности электрического поля и нормали границы. Лямбда-выражение принимает

элемент границы в качестве параметра. Элемент границы «s» содержит указатель на конечный элемент «CellLink», с помощью которого можно определить градиент электрического потенциала. Элемент границы содержит нормаль («s->Norm»). «dot» - скалярное произведение. Далее аналогично определяются множители, в данном случае граничное условие реализуется полиномом второго порядка. Далее в объект класса граничного условия добавляется описанное слагаемое.

Класс табличных данных служит для более эффективного использования данных, которые могут быть посчитаны заранее (например, зависимости подвижности электронов от температуры). Класс содержит следующие поля: табличные данные зависимости; вектор номеров позиции; вспомогательный номер текущего узла. Класс содержит следующие методы: функция возвращения значения необходимой величины по значению аргумента; инициализация данных (задаются табличные данные и размер сетки). Табличные данные зависимости могут иметь значительные размеры, и поиск необходимых значений может занимать много вычислительного времени. После обращения к объекту класса для получения значения переменной, происходит поиск номера строки в таблице и его запись в векторе номеров позиций. Размер вектора номеров позиций равен размеру узлов в расчетной сетки, таким образом, для каждого узла класс запоминает расположение строки и при последующем обращении гораздо быстрее выдает результат. При каждом обращении к объекту класса происходит увеличение номера текущего узла, так как полагается, что последующее обращение к объекту должно возвращать значение для следующего узла в сетке. По номеру текущего узла определяется номер в векторе массива, содержащий номера строки в табличных данных.

1.4. Класс решателя.

Самым главным классом, организующий процесс расчета, является класс решателя. Именно решатель содержит алгоритм распараллеливания задачи,

осуществляет внутренние итерации на временном слое, контролирует невязку, сохраняет результаты расчета.

Класс решателя содержит следующие поля: количество временных шагов; размер временного шага; указатель на главную расчетную сетку; вектор объектов дифференциальных уравнений; распараллеленная версия системы дифференциальных уравнений; указатели на подсетки; невязки дифференциальных уравнений. Решатель содержит следующие методы: создание подсеток для распараллеливания; создание распараллеленной системы дифференциальных уравнений; общий алгоритм расчета.

Некоторые методы повышения эффективности расчета не реализованы до конца. Например, для увеличения скорости расчета предполагалось применять двухуровневую модель компиляции программы, т.е. предполагалось, что программа будет генерировать исходный код непосредственно рассматриваемой задачи. После второй компиляции исходный код содержит в основном операции сложения и умножения, без использования сложных структур данных, которые необходимы только для организации расчета. После второй компиляции код можно использовать для расчетов на графической карте. Однако обнаружены проблемы компиляции крупных исходных кодов, поэтому данная проблема осталась открытой.

Таким образом, разработана архитектура программы, соответствующая требованиям моделирования кинетики плазмы, однако, существует значительный потенциал улучшения программы.

Глава 4. Результаты расчета.

В данной главе представлена верификация разработанной программы, результаты, анализ полученных распределений концентраций, скоростей, температуры, магнитного поля и электрического потенциала, зависимость данных величин от времени.

4.1. Верификация программы.

Для верификации расчетного алгоритма были проведены вспомогательные расчеты: решение уравнения теплопроводности при различных граничных условиях и формах геометрии расчетной области; решение уравнения Бюргерса; решение уравнения газовой динамики – выход газа из расчетной области; решение системы уравнения для моделирования плазмы без магнитного поля.

Решение уравнения теплопроводности при различных граничных условиях в некоторый момент времени, зеленый трек – решение ANSYS-FLUENT с использованием более мелкой сетки. Граничное условие второго рода (постоянный поток):

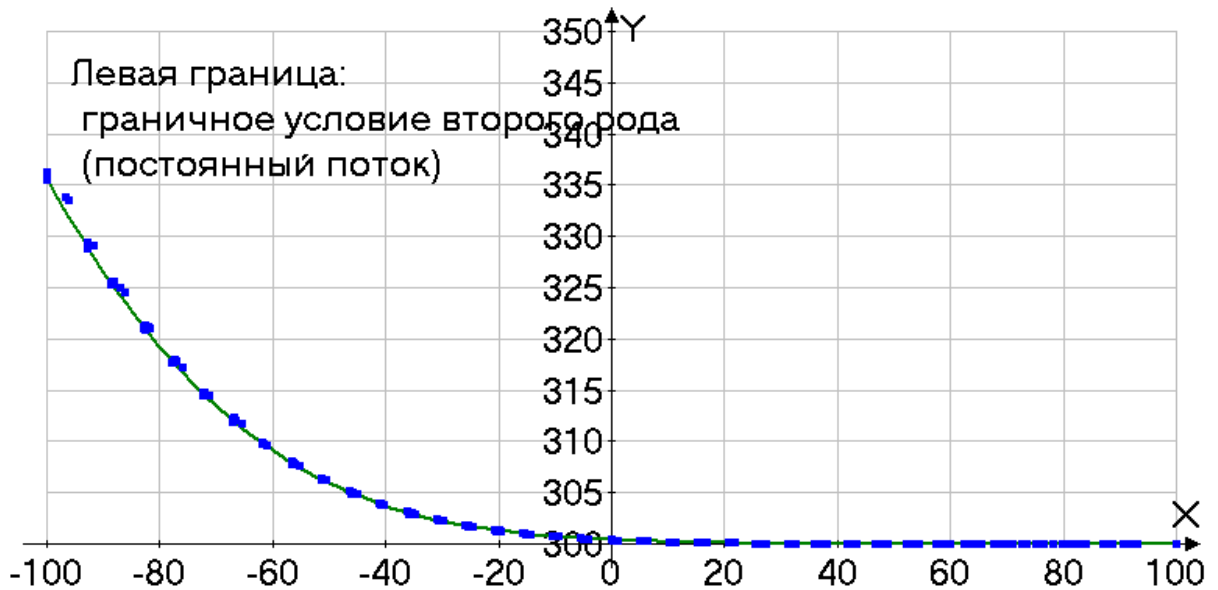


Рисунок 4.1 – Верификация программы, зеленый трек – ANSYS-FLUENT, синий трек – результаты расчета программы, граничное условие второго рода слева ($x = -100$), условие изоляции справа ($X = 100$).

Граничное условие третьего рода:

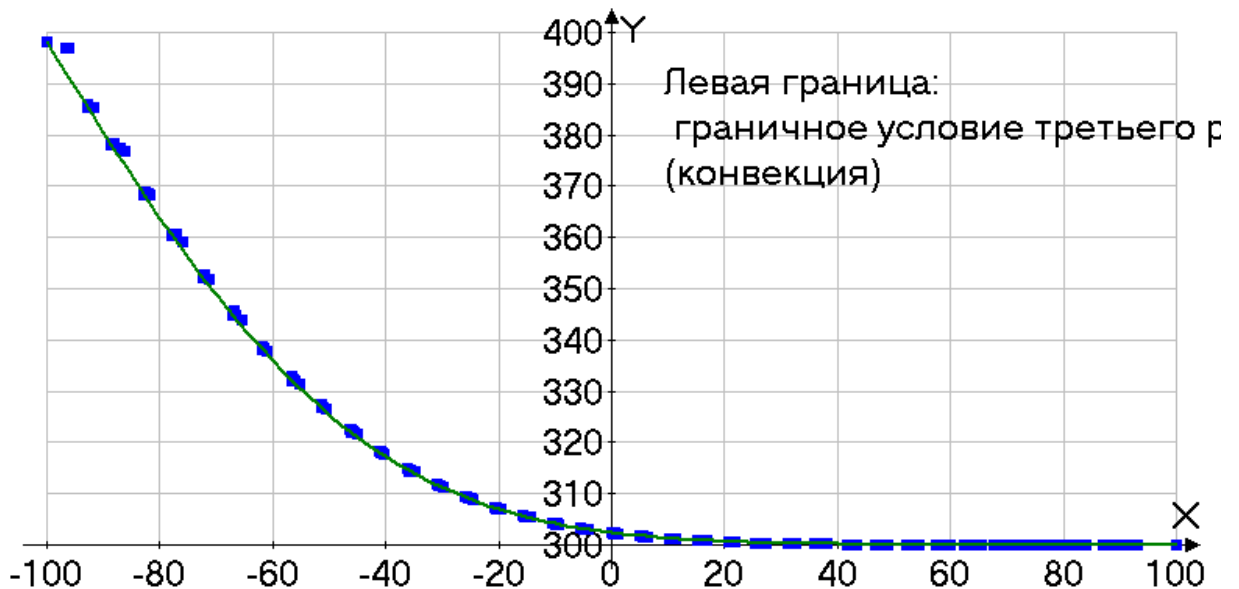


Рисунок 4.2 – Верификация программы, зеленый трек – ANSYS-FLUENT, синий трек – результаты расчета программы, граничное условие третьего рода слева ($x = -100$), условие изоляции справа ($X = 100$).

Верификация произведена для геометрии следующей формы:

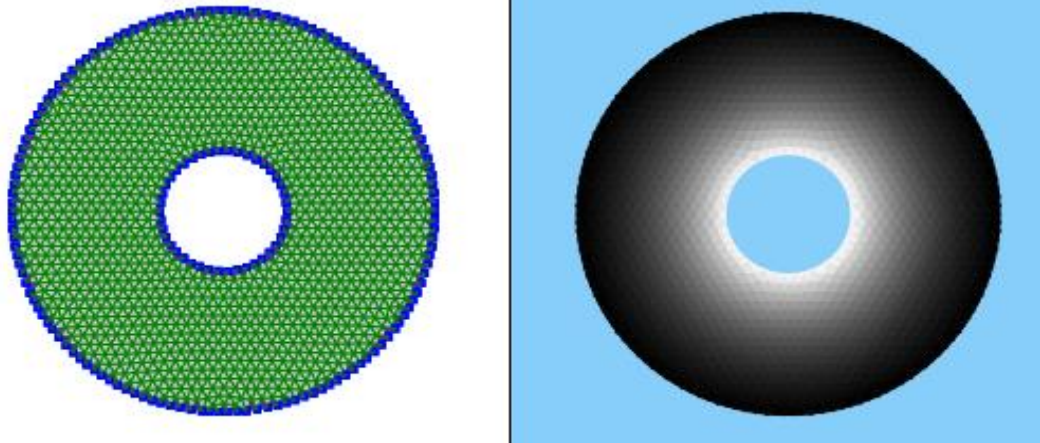


Рисунок 4.3 – Слева геометрия расчетной области, синим цветом выделены граничные узлы, справа – результат расчета, на внутренней границе задается граничное условие третьего рода, на внешней – первого рода.

Сравнение результатов расчета на геометрии (4.3) с ANSYS-FLUENT:

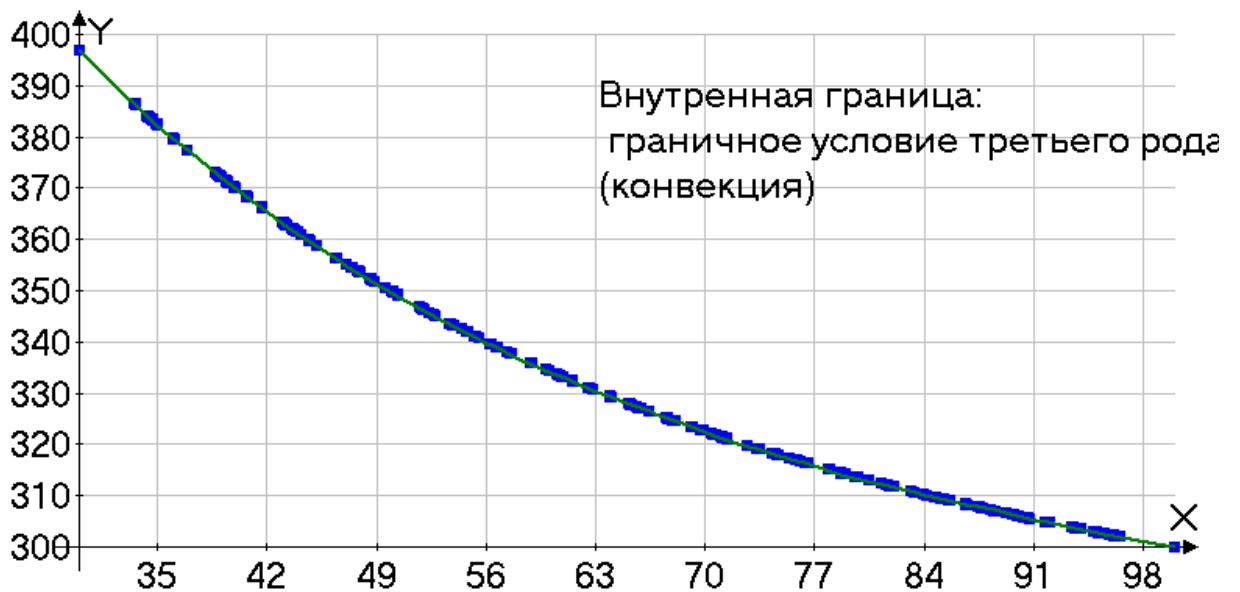


Рисунок 4.4 – Верификация расчета на области 11.3, зеленый трек – ANSYS FLUENT, синий – результат расчета

Верификация программы была проведена на решении системы уравнений близкой к текущей, но без учета магнитного поля, уравнения для температуры и без силы Лоренца для электронов. На двух границах (слева и справа) поставлено граничное условие для потока электронов – постоянное значение.

В таком случае распределение концентрации внутри области должно близко к квадрату косинуса (с минимум концентрации у границ и максимумом в центре). Результаты расчета представлены ниже (11.5):

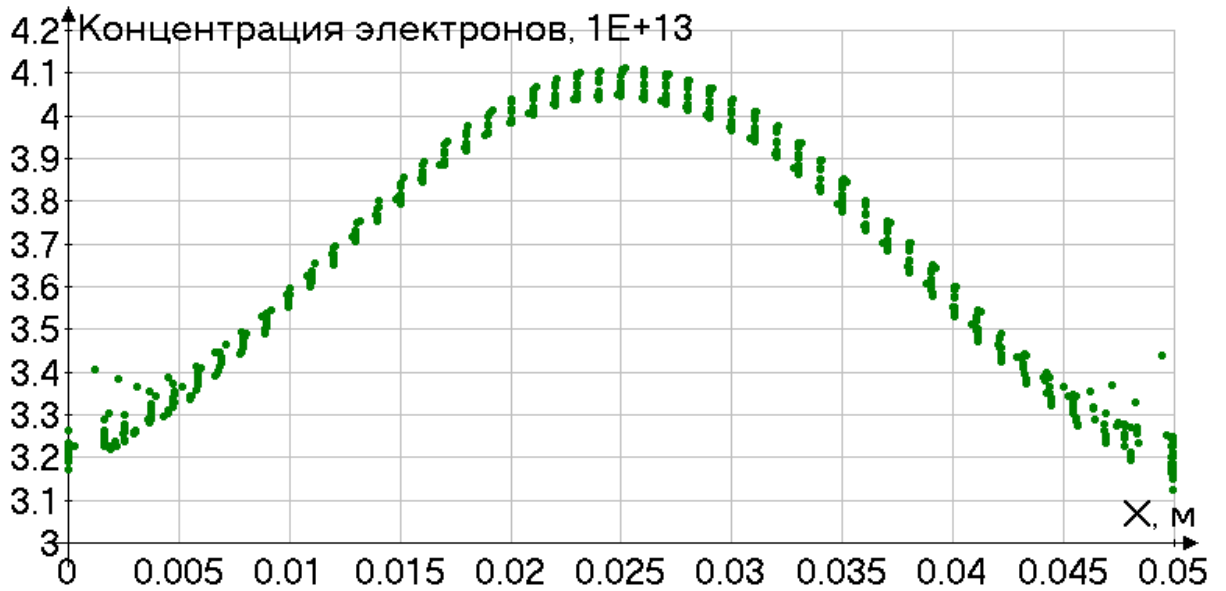


Рис 4.5 – Распределение концентрации электронов

Распределение электронов в расчетной области выглядит следующим образом:

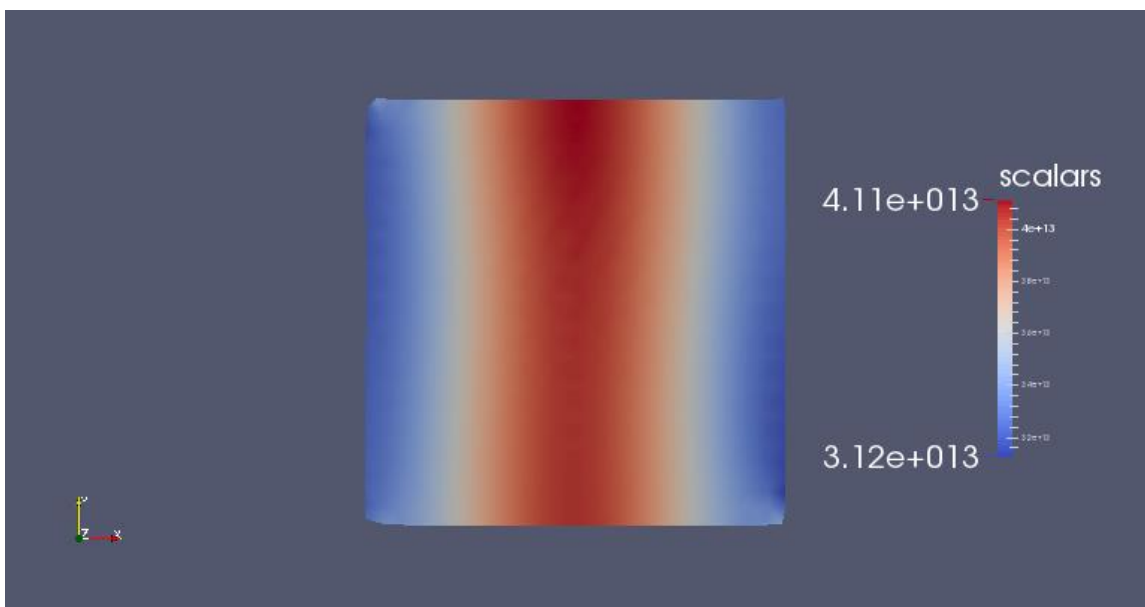


Рисунок 4.6 – Распределение концентрации в расчетной области

Регрессионный анализ подтверждает, что корреляция между квадратом косинуса и результатом расчета высокая.

Также верификация расчетного алгоритма проведена на решении уравнения Бюргера, которое описывает соотношение диффузии и конвективного слагаемого:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{1}{Re} \Delta \Phi = 0 \quad (11.1)$$

Результаты расчета приведены ниже (11.7):

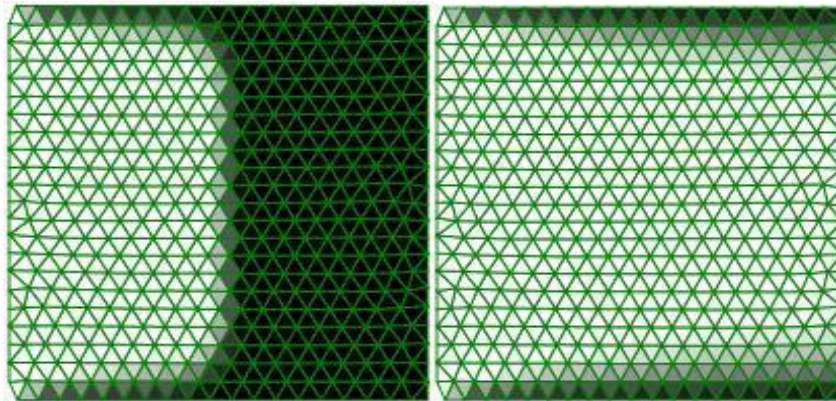


Рисунок 4.7 – Результаты расчета уравнения Бюргера в разные моменты времени, левая граница $\Phi = 1$, правая граница выход потока $\frac{\partial \Phi}{\partial n} = 0$, верхняя и нижняя граница $\Phi = 0$

Результаты проверены с помощью расчетного пакета Mathematica путем определения времени достижения фронта середины расчетной области.

4.2. Расчет магнитного поля.

Расчет магнитного поля производится на стадии инициализации переменных, и во время расчета конфигурация магнитного поля не меняется. Предполагается, что влияние токов носителей заряда дает незначительный вклад в поле магнитной системы магнетрона и находится на уровне погрешности измерения самого магнитного поля.

Магнитная система представляется как совокупность контурных токов разных радиусов и с разным значением силы тока. Используя значения индукции в некоторых точках, производится минимизация ошибки между магнитным полем контурных токов и магнитным полем в контрольных точках. Таким образом, подбираются значения силы тока контуров и рассчитывается магнитная индукция во всей расчетной области. Магнитная система из трех кольцевых магнитов представляется как 6 контурных токов с разными направлениями. Ниже в таблице указаны параметры контурных токов (радиус контура тока и сила тока), моделирующих магнитное поле:

Таблица 4.1 – Параметры контурных токов для расчета конфигурации магнитного поля

№	I, А	R, м
1	-54041.8	0.008718
2	54041.8	0.011718
3	-40337.9	0.022174
4	40337.9	0.025174
5	16393.2	0.082567
6	-16393.2	0.085567

Использование контурных токов для расчета магнитного поля имеет ограничение – нельзя рассчитывать поле в координатах расположения самого контурного тока, поэтому контурные токи смещены относительно катода на 0.01 м (контурные токи находятся вне геометрии расчетной области).

Расчет магнитного поля производится с помощью выражения Био-Савара-Лапласа, поскольку имеется цилиндрическая симметрия, контуры имеют форму окружности и центр контура не смещен относительно оси, то выражения для расчета упрощаются и имеют следующий вид:

$$B_z(r, z) = \frac{\varepsilon_0}{4\pi} \sum_i \int_0^{2\pi} I_i \frac{R_i(R_i - r)}{((z_0 - z)^2 + r^2 + R_i^2 + 2R_i r \cdot \cos(\varphi))^{3/2}} d\varphi \quad (4.1)$$

(4.2)

$$B_r(r, z) = \frac{\varepsilon_0}{4\pi} \sum_i \int_0^{2\pi} I_i \frac{R_i(z - z_0)}{((z_0 - z)^2 + r^2 + R_i^2 + 2R_i r \cdot \cos(\varphi))^{3/2}} d\varphi$$

Интегралы (4.1) и (4.2) рассчитываются численно на стадии инициализации в каждом узле расчетной сетки. При реализации слагаемых с магнитным полем в уравнениях для скорости и температуры электронов магнитное поле внутри конечных элементов аппроксимируется линейно, как и для любой другой переменной.

На графике представлены компоненты магнитного поля на поверхности катода (x- аксиальная компонента, y – радиальная компонента).

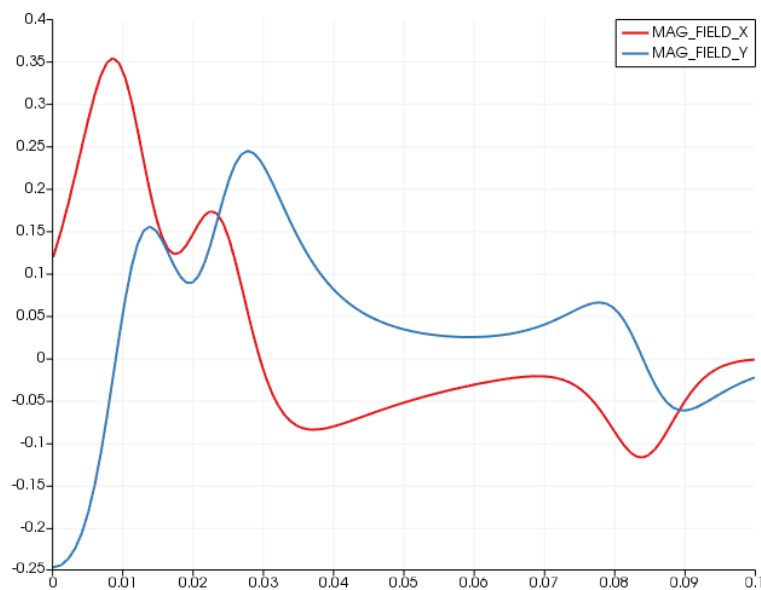


Рисунок 4.8 – Конфигурация магнитной индукции на поверхности катода, ось абсцисс в метрах, ось ординат в Тс.

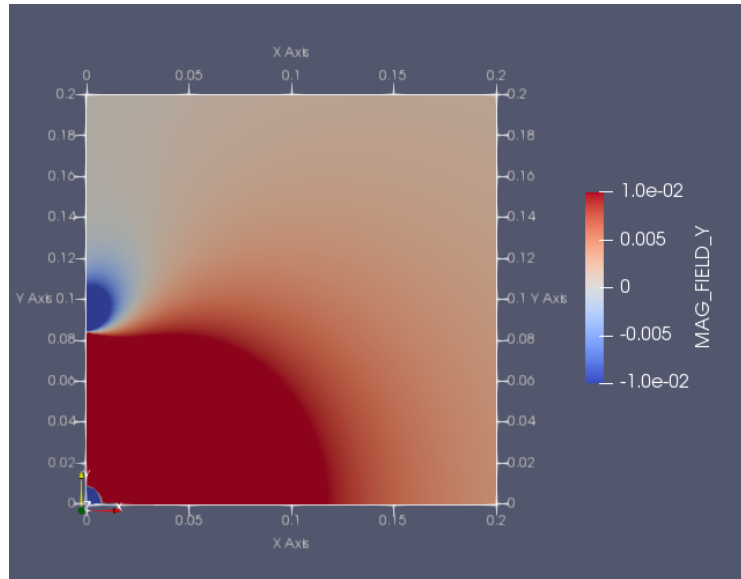


Рисунок 4.9 – Радиальная компонента магнитного поля, максимальное значение индукции магнитного поля 0.24 Тс.

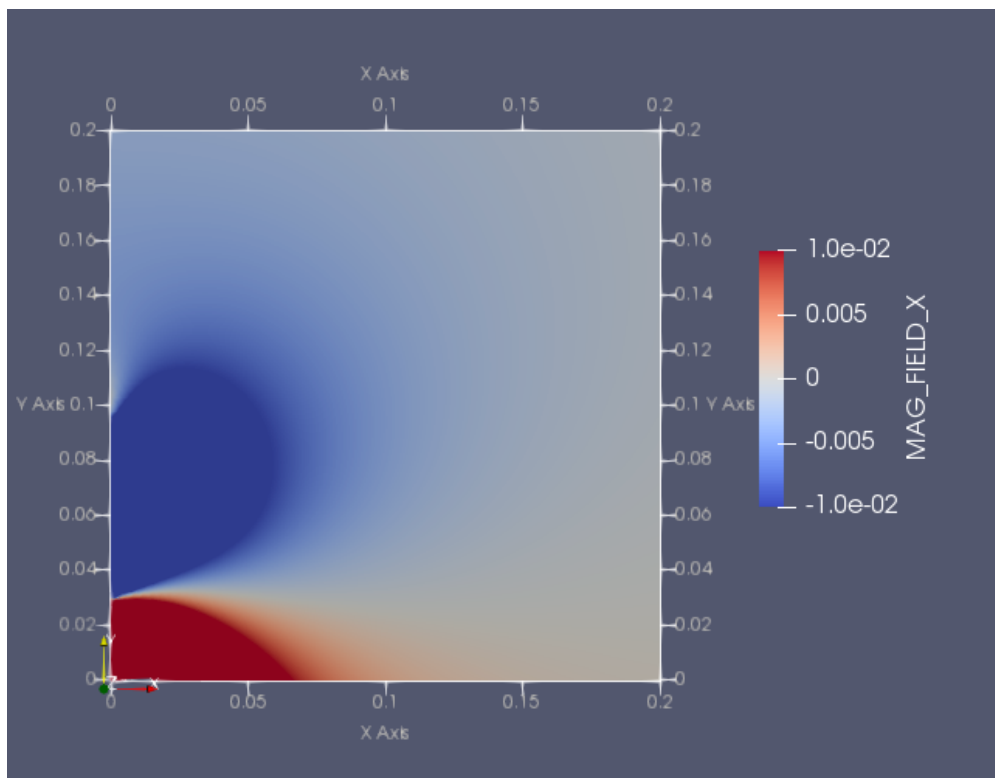


Рисунок 4.10 – Аксиальная компонента магнитного поля, максимальное значение индукции магнитного поля равно 0.35 Тс.

Диапазон значений индукции магнитного поля в рис. (4.9) и (4.10) выбран ориентировочно для визуализации областей, где магнитное поле имеет влияние на скорость электронов.

4.3. Концентрация носителей заряда.

Начальная концентрация носителей выбрана одинаковой во всей расчетной области. Носителей заряда должно быть достаточно для возникновения плазмы. Если концентрация плазмы мала, то при потерях электронов у границ расчетной области (кроме оси) не возникает значительных изменений в конфигурации электрического поля и сил, возвращающих электроны в камеру. Выяснено, что концентрации плазмы 10^{13} м^{-3} вполне достаточно для развития плазмы в магнетроне. При концентрации ниже 10^{12} м^{-3} плазма в магнетроне затухает. Начальное значение концентрации не должно быть велико, чем выше концентрация плазмы, тем меньше должен быть шаг по времени, особенно на начальном этапе расчета.

Сразу после начала расчета динамика концентрации принимает нестационарный вид, из-за большей подвижности электронов, чем у ионов аргона, в расчетной области наблюдается избыток ионов и электроны попадают в осциллятор, происходят колебания и движения электронов от оси к боковой стенке и обратно. Магнитное поле у не позволяет электронам покидать область у катода, колебания электронов у катода менее выражены, чем в камере. Через 1 мкс распределение концентрации электронов выглядит следующим образом:

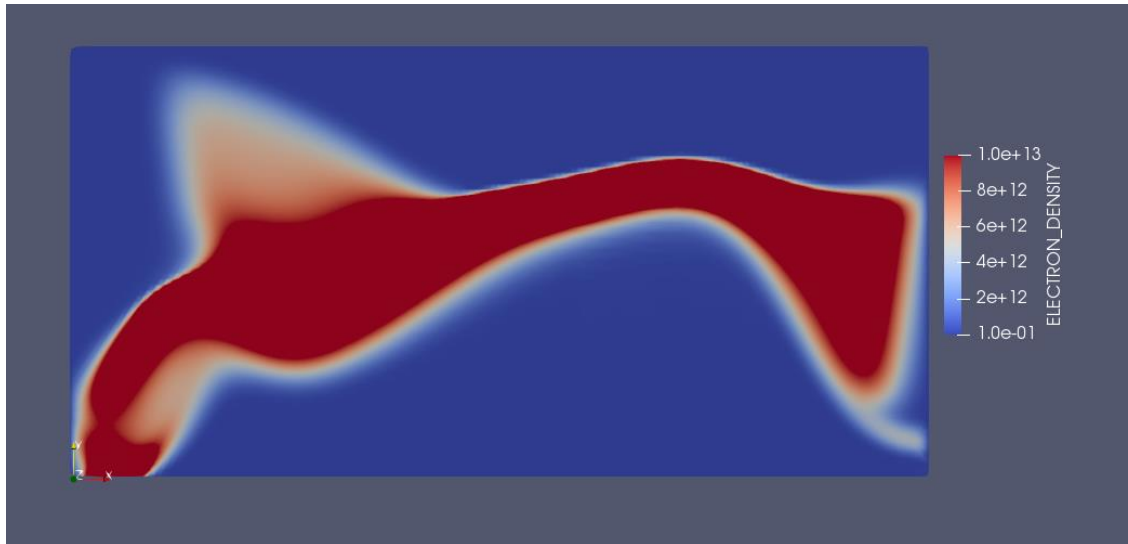


Рисунок 4.1 – Распределение концентрации электронов через 1 мкс, нижняя граница соответствует оси, слева катод, верхняя и левая граница – анод. Максимальное значение концентрации электронов $1.5 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-3}$ на оси в 2 см от катода.

Через 1 мкс распределение концентрации ионов аргона выглядит следующим образом:



Рисунок 4.2 – Распределение концентрации ионов аргона через 1 мкс. нижняя граница соответствует оси, слева катод, верхняя и левая граница – анод. Максимальное значение концентрации $1.7 \cdot 10^{13} \text{ м}^{-3}$ в области у левой границы

Таким образом, из-за меньшей подвижности аргона, распределение концентрации разных носителей заряда существенно отличаются. Через 10 мкс распределение концентрации электронов выглядит следующим образом:

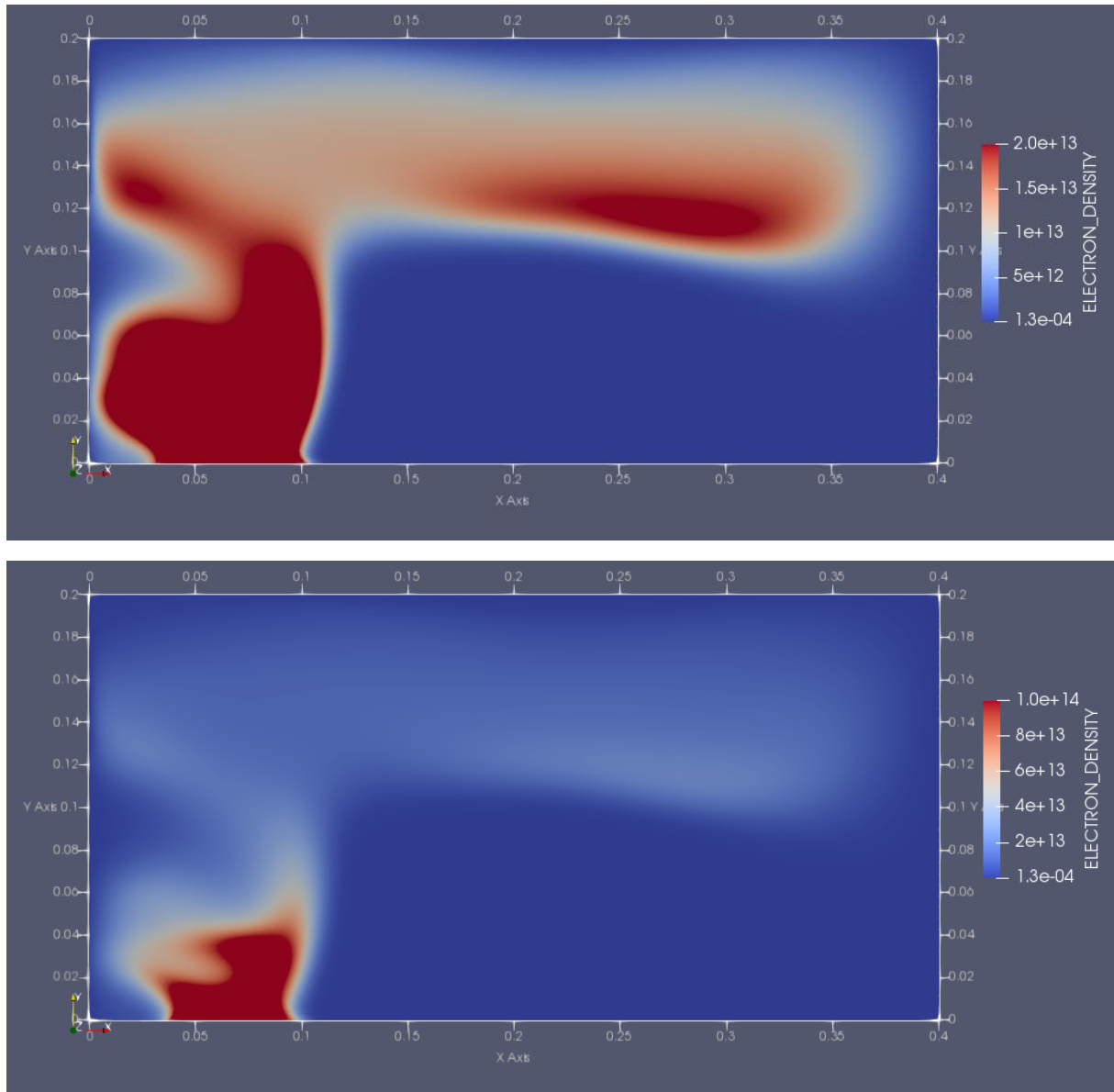


Рисунок 4.3 – Распределение концентрации электронов через 10 мкс, нижняя граница соответствует оси, слева катод, верхняя и левая граница – анод. Максимальное значение концентрации электронов $3.3 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-3}$ на оси в 5 см от катода. Данные представлены с разными шкалами.

При 10 мкс наблюдается снижение колебаний электронов, что объясняется развитием концентрации ионов аргона:

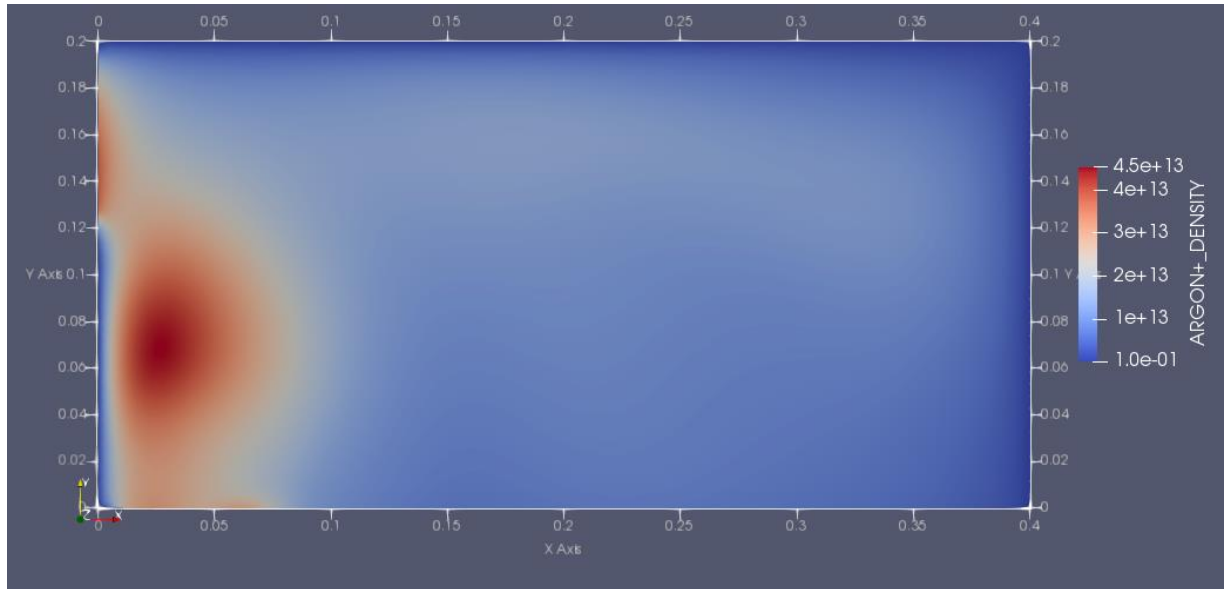


Рисунок 4.4 – Распределение концентрации ионов аргона через 10 мкс. нижняя граница соответствует оси, слева катод, верхняя и левая граница – анод. Максимальное значение концентрации $4.5 \cdot 10^{13} \text{ м}^{-3}$ в области катода.

При 20 мкс распределение концентрации электронов выглядит следующим образом:

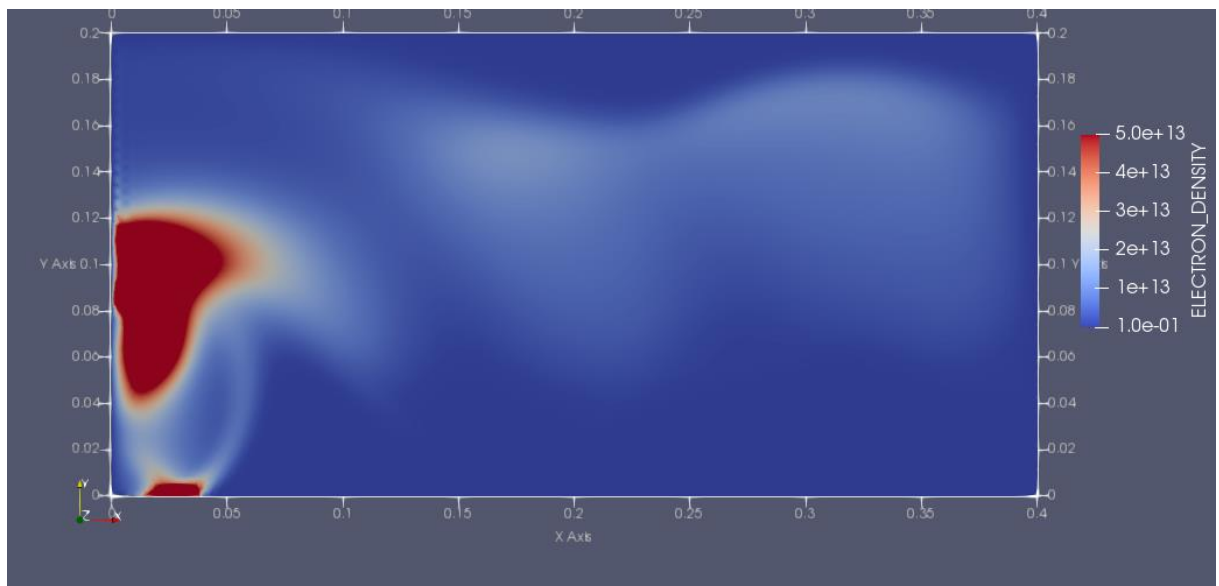


Рисунок 4.5 – Распределение концентрации электронов через 20 мкс. нижняя граница соответствует оси, слева катод, верхняя и левая граница – анод. Максимальное значение концентрации $5 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-3}$ в области катода и на оси в 3 см от катода.

При 20 мкс наблюдаются колебания электронов в области магнитного поля с периодом колебаний 200-300 нс. Электроны движутся от катода к аноду и обратно, что осложняет расчет, поскольку при приближении электронов к оси сильно повышается концентрация электронов. А при движении к катоду электроны на скорости сталкиваются с катодом, поскольку поток электронов из области ограничен (так поставлены граничные условия), появляются признаки расходимости: колебания концентрации на уровне сетки, которые можно увидеть на рис 4.5. на левой границе при радиусе (Y-ось) 0.12 – 0.14. Ось симметрии является одним из проблемных мест при расчете, что наводит на мысль о необходимости решения трехмерной постановки задачи. Как правило, колебания, турбулентные потоки, неустойчивости не совсем корректно описываются двумерной постановкой.

Концентрация ионов аргона при 20 мкс выглядит следующим образом:

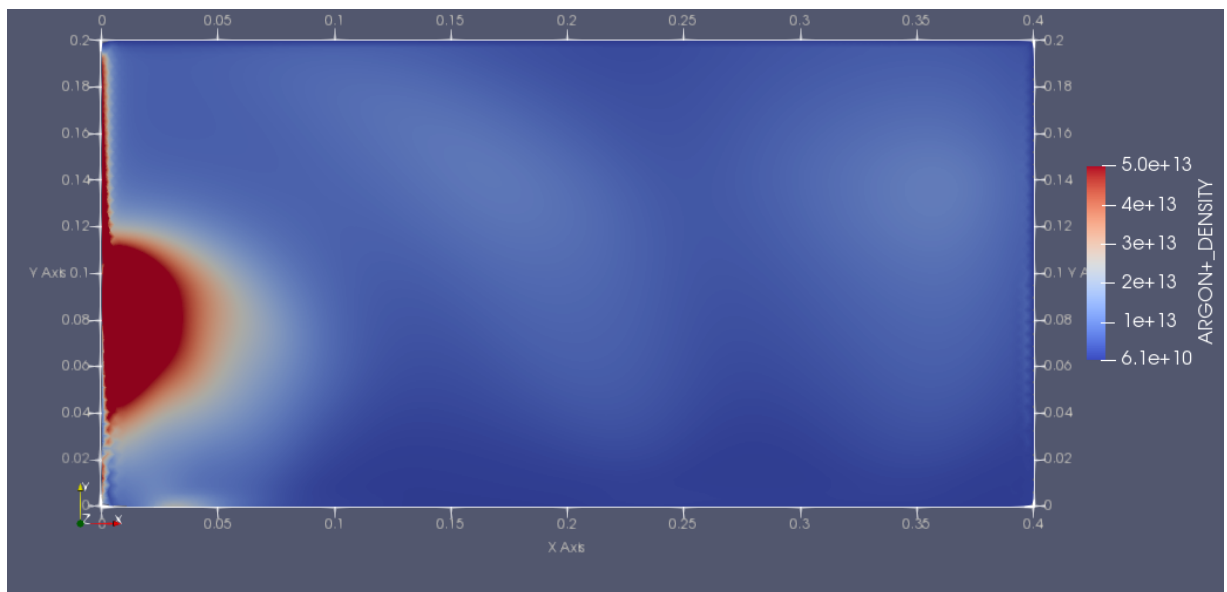


Рисунок 4.6 – Распределение концентрации ионов аргона через 20 мкс. нижняя граница соответствует оси, слева катод, верхняя и левая граница – анод. Максимальное значение концентрации $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-3}$.

Также необходимо улучшить модель, введя уравнения для температуры аргона, градиенты концентрации значительны и допускать, что температура не изменяется не совсем корректно.

4.4. Распределение скоростей носителей заряда.

Распределение скорости электронов через 20 мкс представлено на рис 4.7:

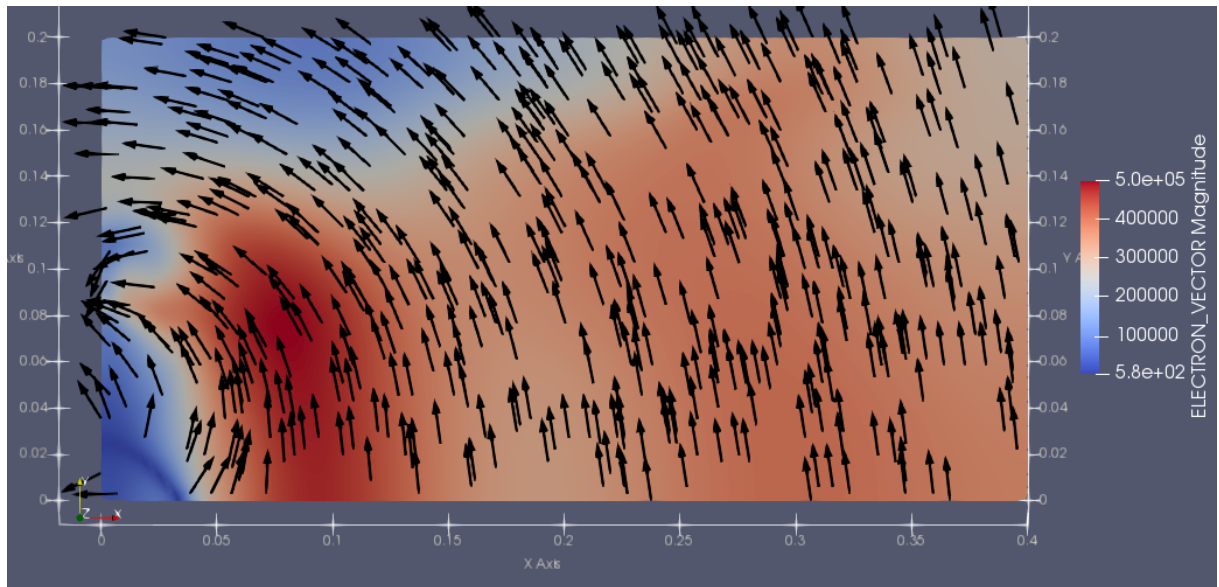


Рисунок 4.7 – Распределение скорости электронов через 20 мкс. нижняя граница соответствует оси, слева катод, верхняя и левая граница – анод.

Стрелками указано направление движения электронов, контур соответствует модулю скорости. Наблюдаются колебания направления скорости, через 20.15 мкс направление движения электронов в области магнитного поля выглядит иначе:

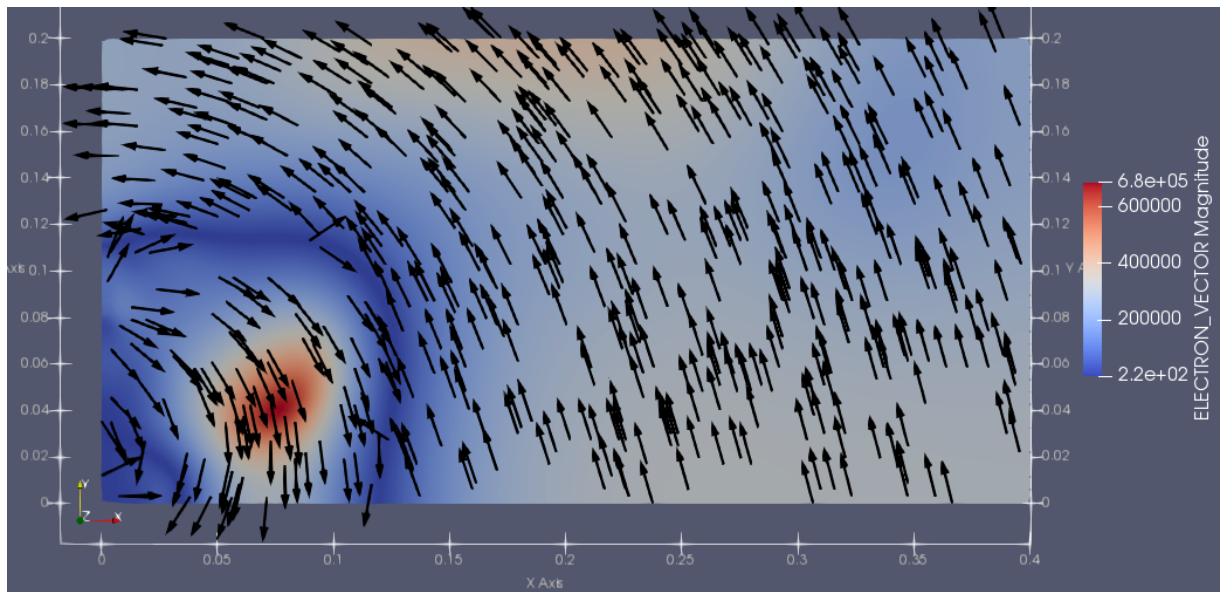


Рисунок 4.8 – Распределение скорости электронов через 20.15 мкс. нижняя граница соответствует оси, слева катод, верхняя и левая граница – анод.

За 150 нс произошли существенные изменения конфигурации скорости, при этом шаг по времени составляет 1 нс.

Распределение скорости ионов аргона при 20 мкс представлено на рис 2.9.

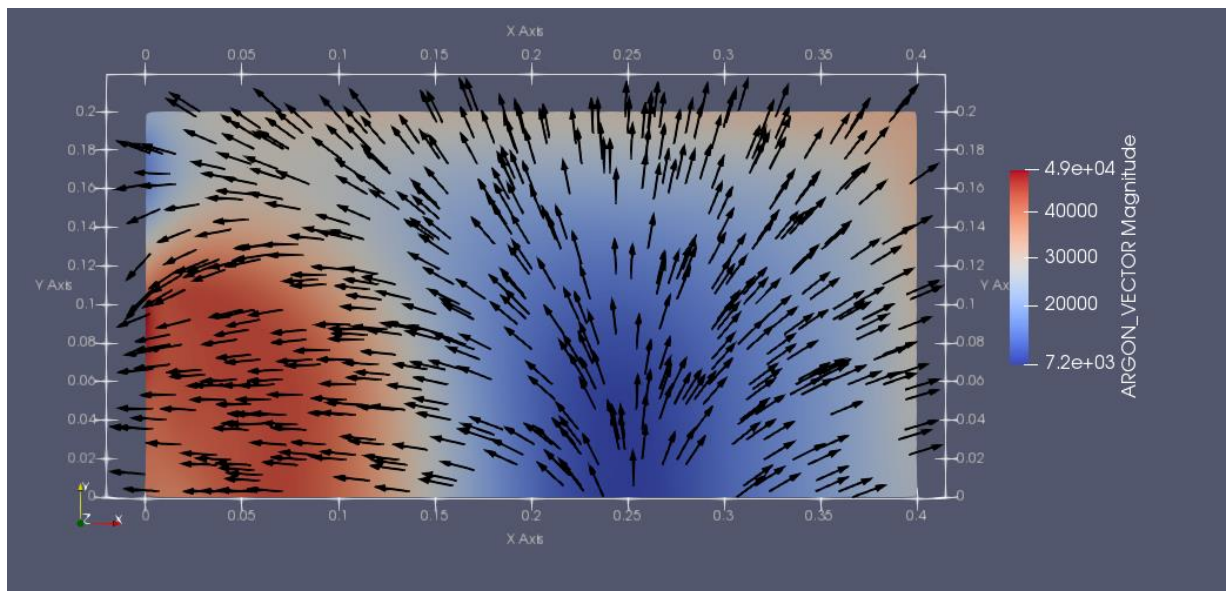


Рисунок 4.9 – Распределение скорости ионов аргона через 20 мкс. нижняя граница соответствует оси, слева катод, верхняя и левая граница – анод.

Таким образом, наибольший поток ионов приходится на катод, при такой конфигурации скорости и концентрации, а также углу между нормалью

границы и направлению скорости, области травления находятся при радиусе (Y) 7-10 см.

4.5. Электрический потенциал.

До 3.5 мкс наблюдается рост дисбаланса в области, о чем свидетельствует максимальное значение потенциала 2000 В, конфигурация потенциала при 3.5 мкс представлена на рис 4.9:

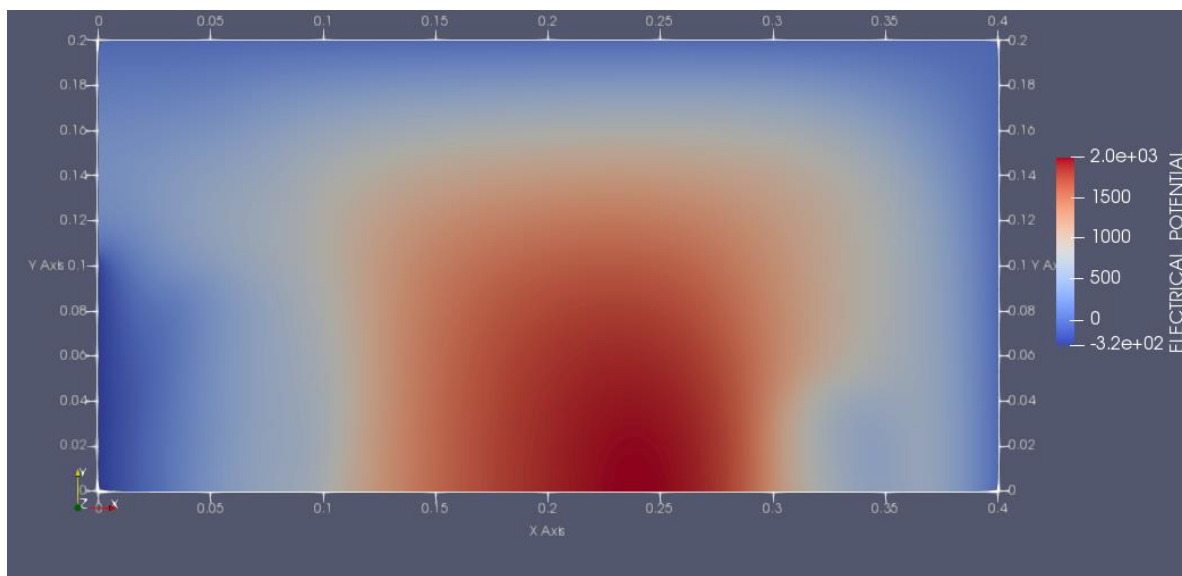


Рисунок 4.9 – Конфигурация электрического потенциала при 3.5 мкс, нижняя граница соответствует оси, слева катод, верхняя и левая граница – анод.

При 20 мкс дисбаланс заряда исчезает, появляются области избытка электронов:

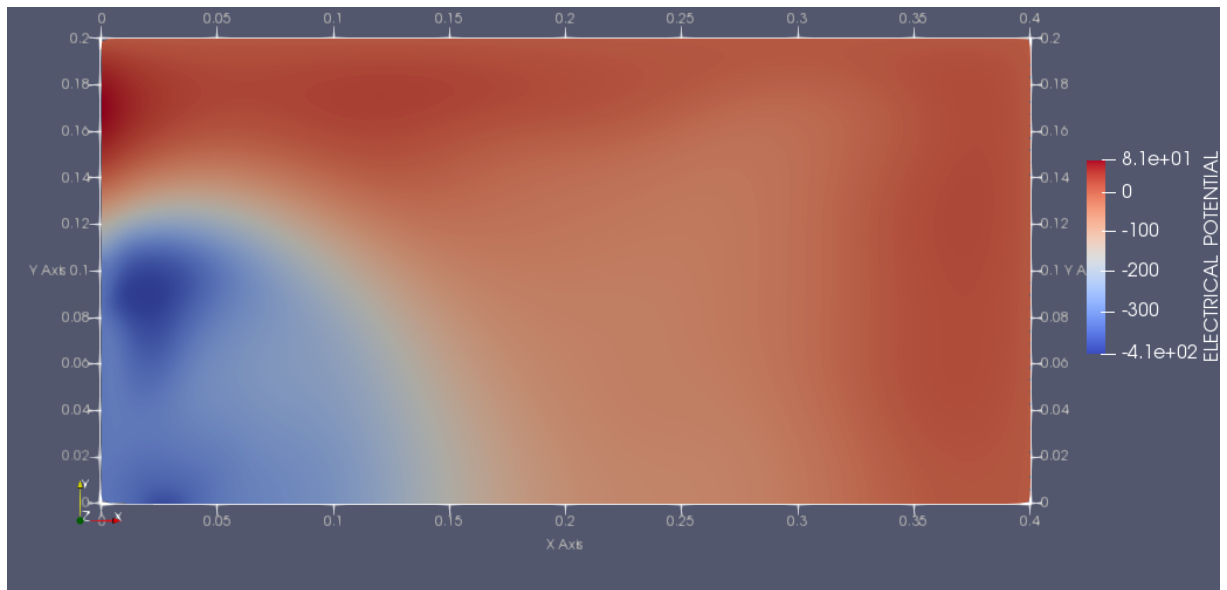


Рисунок 4.10 – Конфигурация электрического потенциала при 20 мкс, нижняя граница соответствует оси, слева катод, верхняя и левая граница – анод.

Минимальное напряжение имеет значение -400 В, при этом на катод подается -320 , следовательно, вблизи катода наблюдается избыток электронов и это связано с движением электронов к катоду. Из-за электрического поля на электроны действует сила, направленная к оси. При смене направления электроны пробегают по инерции до оси, создавая там избыток электронов.

4.6. Температура электронов.

Температура электронов определяет подвижность, коэффициент ионизации и потерь энергии, коэффициент диффузии, зависимости от температуры значительны. В качестве начальной температуры выбрано значение 7 эВ.

При решении задачи определено, что на рост температуры существенное влияние оказывает дисбаланс заряда в расчетной области и колебания электронов. Проведены вспомогательные расчеты, при которых колебания электронов глушатся с помощью оператора Лапласа и грубой расчетной сетки. Пока дисбаланс минимален и колебания незначительны, роста температуры не наблюдается, температура опускается до 3 эВ во всей расчетной области. Как

только возникают колебания (которые описаны в пункте 4.4) температура поднимается до 15 эВ в некоторых областях. Также возможны небольшие области с очень низкими температурами ниже 0.1 эВ, возникновение отрицательных температур, как правило, у оси расчетной области. Проблемное поведение температуры у оси свидетельствует о необходимости решения в трехмерной постановке, а существование областей низких температур – об необходимости учета рекомбинации электронов и ионов.

Температура электронов и поток энергии при 20 мкс представлен на рис. 4.11:

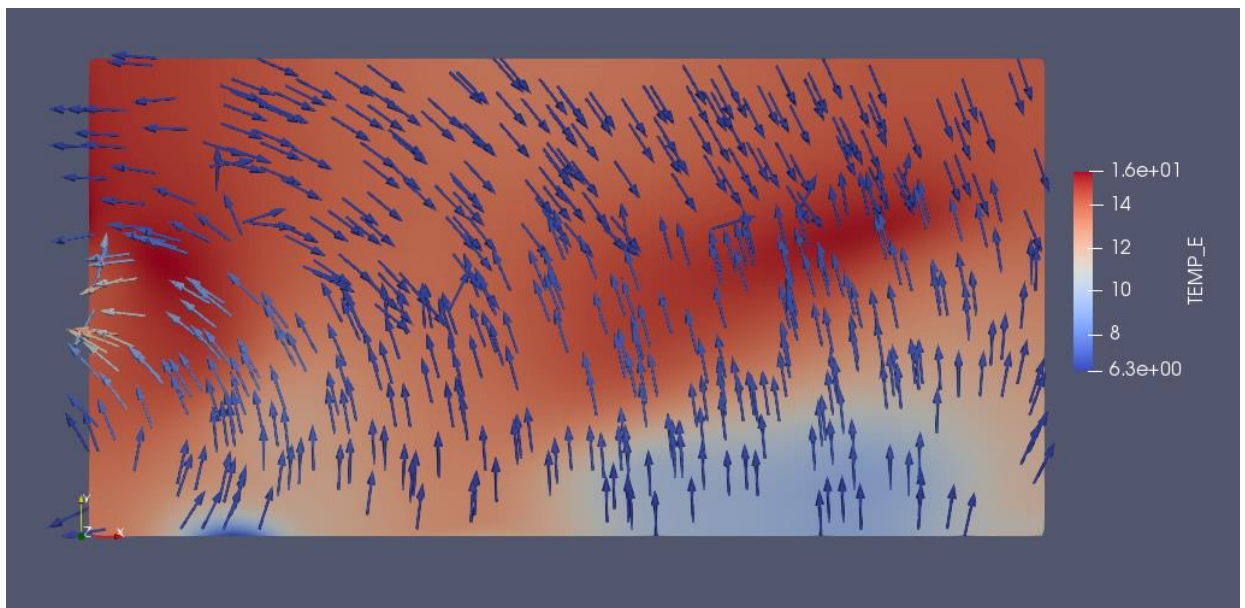


Рисунок 4.11 – Распределение температуры электронов, векторами отмечен поток энергии, 20 мкс.

Направление потока энергии, как и скорость испытывают колебания.

Таким образом, получены результаты расчета, рассчитаны пространственные распределения концентрации носителей заряда, скорости, электрического потенциала, магнитного поля, потока энергии и температуры электронов. Рассмотрены зависимости от времени, особенности сходимости разработанной модели плазмы.

4.7. Открытые граничные условия.

Колебания концентрации и скорости, образование виртуального катода свидетельствует о значимом влиянии конвективного слагаемого в уравнении для скорости электронов. Таким образом, необходимо учитывать конвективное слагаемое в граничных условиях. Были рассмотрен другой тип граничных условий с открытой границей. Граница считается открытой, если поток направлен из области к границе, и считается закрытым, если поток направлен от границы:

$$(\mathbf{n}\Gamma_e)_s = (n_e \mathbf{v}_e)_s \delta_{v_e}^- - \gamma_i (\mathbf{n}\Gamma_i)_s \quad (4.1)$$

Начальное распределение имеет следующий вид:

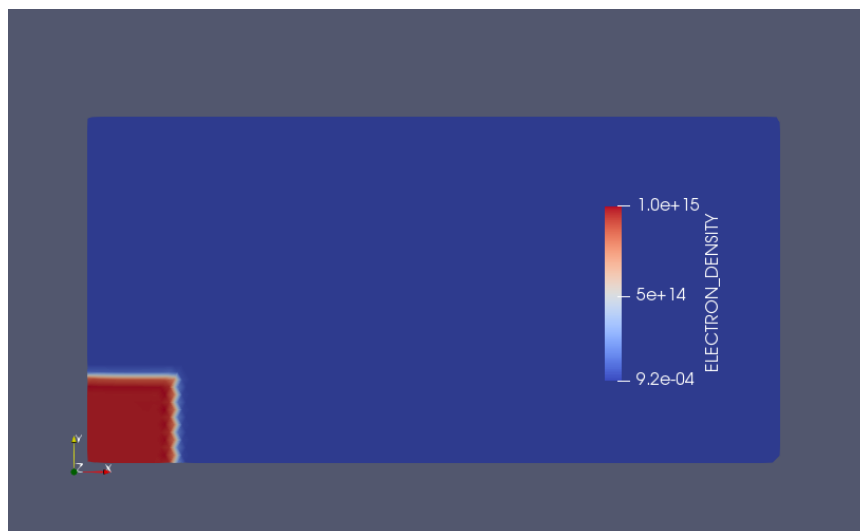


Рисунок 4.12 – Начальные граничные условия для концентрации электронов

Результаты расчета концентрации электронов при 100 мкс:



Рисунок 4.13 – Концентрация электронов при 100 мкс.

При использовании граничного условия с открытой границей, колебания плазмы не происходит, скорость электронов ниже, температура падает и больше соответствует реальным значениям:



Рисунок 4.14 – Температура электронов при 100 мкс

Таким образом, результаты сильно зависят от типа поставленных граничных условий. Влияние конвективного слагаемого значимо, несмотря на то, что в существующих моделях этим слагаемым пренебрегается. Решение сильно зависит от граничных условий, и для получения качественных результатов необходимо тщательным образом исследовать взаимодействие электронов с границей.

Глава 5. Финансовый менеджмент.

5.1. Предпроектный анализ.

На сегодняшний день одной из наиболее развивающихся отраслей экономики является математическое моделирование и инжиниринг. Только за последние 10 лет капитализация американской компании ANSYS, которая занимается разработкой программного обеспечения для моделирования физических процессов, выросла в 10 лет, а за последние 2 года – в 2 раза, при этом компания представлена на рынке достаточно давно (с 1970-х). Такой рост объясняется существенными изменениями в области разработки новых технологий. На текущий момент можно утверждать, что неполное непонимание физических процессов, механизма работы технологий, проблемы с интерпретацией экспериментальных данных приводит к существенному замедлению внедрения новых технологий в экономику. Технологии усложнены настолько, что эмпирически или интуитивно определить огромное количество параметров невозможно. Экспериментальные методы становятся слишком долгими и дорогостоящими из-за необходимости варьирования большого количества параметров. Кроме того, стоит вопрос об адекватности самих полученных данных. Накопление базы данных по сечениям взаимодействия фактически позволяет отчасти заменить экспериментальное исследование моделированием, т.е. расчет – это альтернатива экспериментальным методам исследования.

На стадии предпроектного анализа были изучены расчетные пакеты для моделирования и было выяснено, что существует ряд проблем при решении сложных физических задач. Как правило, готовые расчетные пакеты ориентированы на стандартные задачи и модели, что существенно уменьшает область их применения, в частности ограничивает возможности моделирования физики плазмы. Одним из важных критериев при решении сложных задач – это гибкость, возможность произвольным образом строить задачи, их модифицировать. Программный пакет ANSYS-FLUENT содержит

программируемый модуль («User-defined functions»), позволяющий расширить область решаемых задач, однако, более детальное изучение возможностей этого программируемого модуля дает сделать выводы, что использование данного расчетного продукта для решения поставленной задачи затруднительно. Также задача была решена с использованием другого расчетного пакета – «Mathematica», однако, данный расчетный пакет имеет более низкую скорость расчета и получить решение не предоставляется возможным из-за расходимости используемого в данном расчетном пакете метода.

Следующим критерием проекта является цена – лицензирование программного обеспечения требует существенных затрат. На фоне проблем получения решения, закупка этого программного обеспечения рискованна с точки зрения решения поставленной цели. Также, аргументом в сторону разработки собственного софта является наличие бесплатных средств визуализации (ParaView). Таким образом, разрабатывать обеспечение, напрямую не связанное с поставленной задачей, нет необходимости.

На текущий момент в России ведутся разработки методов моделирования, например, компания ООО «Globexu» ведет разработки в этой области (автор принимал участие в проекте данной компании). Однако, проект в данной компании не ориентирован на решение сложных физических задач, кроме того, существуют проблемы с эффективностью применяемых в данной компании методов и отсутствии координации между программированием и требованиями к архитектуре программы с точки зрения численных методов и физических задач.

Таким образом, предпроектный анализ показывает, что на текущий момент на рынке есть необходимость в наличии новых программных продуктов, позволяющих решать сложные, нестандартные физические задачи, в частности, моделирование кинетики плазмы в магнетронной распылительной системе.

5.2. Потенциальные потребители результатов исследования.

Результатом исследования являются расчетный пакет и результаты расчета, демонстрирующие возможности данного продукта. Одной из проблем реализации продукта является склонность крупных компаний к использованию проверенных расчетных пакетов, занимающий рынок с 1970-х годов. Так, при поступлении заказа на моделирование, заказчик может потребовать, чтобы заказ был выполнен именно в расчетном пакете ANSYS или COMSOL. Таким образом, программное обеспечение направлено на средние компании и на научно-исследовательские проекты. При этом, учитывая стадию проекта, проект можно использовать только для инжиниринга без реализации программного обеспечения как лицензируемого продукта, т.о. проект не ориентирован на мелкие компании.

Таб. 5.1 – Карта сегментирования рынка.

Размер компании	Инжиниринг
Крупные	ANSYS, COMSOL, Mathematica
Средние	
Мелкие	

В таблице 1 представлена карта сегментирования рынка. Красным цветом представлены области, на которые проект не направлен в связи с занятостью рынка или невозможностью реализации проекта на этом сегменте. Зеленым цветом отмечен интересующий сегмент. В целом можно утверждать, что рынок для средних компаний относительно свободен (особенно для специфических задач) и именно средний сегмент представляет наибольший интерес.

5.3. Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

Основным параметром, определяющим ресурсоэффективность и ресурсосбережение является функциональность продукта, т.е. возможность реализации сложных комплексных физических задач. Как было отмечено ранее именно функциональность является приоритетом проекта и является преимуществом по отношению к существующим расчетным пакетам. Именно ограниченная функциональность, отсутствие гибкости в использовании существующих расчетных пакетах делает данную работу актуальной.

Следующим немаловажным параметром является скорость вычислений. Из-за решения сложных систем дифференциальных и интегральных уравнений, актуальной остается проблема скорости вычислений. При разработке проекта учитываются современные тенденции, а именно: мультипроцессорность и вычисления на графических картах. Реализован метод распараллеливания задачи, а также начата разработка более сложных технологий оптимизации кода, в частности, генерация исходного кода под конкретную задачу, что существенным образом может ускорить вычисления. В текущем проекте полностью раскрыты возможности современных микропроцессоров. В проекте реализованы различные механизмы ускорения вычислений: создана архитектура, при которой полностью исключается проблема разреженности матрицы алгебраических уравнений путем создания децентрализованной матрицы коэффициентов; произведено разделение матрицы на две компоненты (постоянная и переменная), что позволяет исключить повторных вычислительных операций и т.д.

Следующим фактором является потребность в ресурсах памяти. Имея высокую функциональность и отсутствие интерфейса разработанная библиотека с методами занимает 15 Мбайт памяти, что существенно ниже конкурентных программ. Разработанный софт не использует сторонних библиотек и все методы, включая интегрирование, построение сетки и т.д.,

прописаны именно под архитектуру программы. Этот факт делает программу простым в эксплуатации, однако, требует базовых знаний программирования для его использования. Также стоит отметить затраты на оперативную память, которые также минимизированы с помощью системы умных указателей, позволяющих исключить утечку памяти и исключить ненужные затраты (например, нулевые элементы в матрице коэффициентов).

Основное преимущество в экономических критериях эффективности – это цена. Как было указано выше, лицензирование готовых программных продуктов дорогостоящее и существенно снижает рентабельность проекта. Следующим положительным фактором является диверсификация продукта: разработанный проект может применяться для различных задач и не специализируется на определенных задачах, что свойственно готовым расчетным проектам. Минусом является отсутствие проникновения продукта на рынке. Ф- данный проект, К1 – Mathematica К1 – ANSYS-FLUENT.

Таблица 5.2 – Критерии оценки ресурсоэффективности

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Скорость вычислений	0.2	5	4	3	1	0.8	0.6
2. Функциональность (с точки зрения поставленных задач)	0.5	5	3	4	2.5	1.5	2
3. Качество интерфейса	0.05	1	5	5	0.05	0.25	0.25
4. Простота эксплуатации	0.05	5	3	4	0.25	0.15	0.2
5. Потребность в ресурсах памяти	0.05	5	3	4	0.25	0.15	0.2
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Уровень проникновения на рынок	0.33	1	5	5	0.33	1.67	1.67
2. Цена	0.33	5	2	2	1.67	0.67	0.67
3. Диверсификация	0.33	5	3	5	1.67	1	1.67
					7.72	6.18	7.25

Таким образом, общие показатели конкурентоспособности Ф и К2 близки по значениям, данный проект способен конкурировать с другими проектами несмотря на низкий уровень проникновения на рынок и отсутствием пользовательского интерфейса. Основным преимуществом данного проекта (Ф) является функциональность программного обеспечения.

5.4. SWOT – анализ.

SWOT – анализ показывает сильные и слабые стороны проекта, возможности и угрозы проекта.

Сильной стороной проекта является его расширенная функциональность и возможность подстраиваться под определенный расчет; уникальность самого расчетного алгоритма (в расчете используются более точный метод, основанный на вариационном исчислении и минимизации невязки); более высокая устойчивость расчета из-за алгоритма выделения диагональных элементов из уравнений; универсальность и высокая скорость расчета; эффективный механизм распараллеливания задачи; интеграция с бесплатными средствами визуализации расчетных данных (через ParaView).

Слабой стороной проекта является ограниченные вычислительные мощности, нулевой уровень проникновения на рынок и отсутствия пользовательского интерфейса (осуществлена только back-end разработка).

Возможности проекта – это вытеснение зарубежных средств моделирования с российского рынка из-за высокой цены программного обеспечения и проблем моделирования в стратегически важных областях, в частности, моделирование магнетронной распылительной системы. Особенностью существующих расчетных пакетов для моделирования – это специализация на конкретной области задач (например, ANSYS-Maxwell – магнитного поля). Данный проект может вытеснить все расчетные пакеты для моделирования физических задач ввиду высокой функциональности проекта.

Основная угроза – это отсутствие спроса на выполнение расчетов, в частности, в связи с предпочтением наиболее популярных средств моделирования, очень низкий уровень материально-технического оснащения и финансирования по сравнению с конкурентами.

	<p>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>C1. Высокая функциональность.</p> <p>C2. Уникальность расчетного алгоритма</p> <p>C3. Универсальность расчетного алгоритма.</p> <p>C4. Более высокая устойчивость расчета</p> <p>C5. Интеграция с бесплатными средствами визуализации.</p>	<p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>Сл1. Слабые вычислительные мощности в проекте.</p> <p>Сл2. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров по работе с научной разработкой</p> <p>Сл3. Отсутствие интерфейса программы</p> <p>Сл4. Отсутствие команды для реализации проекта</p> <p>Сл5. Низкий уровень финансирования разработки</p>
<p>Возможности:</p> <p>V1. Использование разработанного алгоритма при решении задач в других секторах экономики</p> <p>V2. Возможность бюджетного финансирования как приоритетное направление</p>	<p>C1 и C3 позволяет реализовать V1; высокая функциональность (C1) позволяет использовать проект в приоритетных направлениях, что позволяет реализовать V2. C1, C2 и C4 позволяет реализовать возможность V3 и V5 из-за возможности решения</p>	<p>Сл1 и Сл2 замедляет время реализации продукта V5 из-за значительного времени расчета и необходимостью квалификации для использования продукта, Сл3 и Сл4 препятствует V3 и V4, Сл4 также снижает возможность финансирования V2, Сл5</p>

<p>В3. Появление дополнительного спроса на выполнение расчетных задач со стороны зарубежных организаций</p> <p>В4. Вытеснение конкурирующих средств моделирования с российского рынка</p> <p>В5. Возможность реализации результатов разработки как программного продукта</p>	<p>сложных специфических задач, С4 и С5 способствует реализации программы В5.</p>	<p>снижает все возможности В1-В5.</p>
<p>Угрозы:</p> <p>У1. Отсутствие спроса на разработку и моделирование</p> <p>У2. Развитая конкуренция технологий со стороны зарубежных компаний</p> <p>У3. Слабое научно-техническое обеспечение разработки по сравнению с конкурентами</p> <p>У4. Нарушение прав интеллектуальной собственности</p> <p>У5. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства.</p>	<p>Стратегия устранения угроз У1 и У2 – бесплатное распространение программного обеспечения и занятие коротких позиций акций конкурентов. Стратегия устраняет У4 поскольку нет необходимости регулирования прав интеллектуальной собственности. Данной стратегии способствуют все сильные стороны проекта.</p> <p>Стратегия устранения У2 и У5 заключается в поиске альтернативного источника финансирования, например, использование программного обеспечения для управления активами сторонних компаний. Данную стратегию обеспечивает С1.</p>	<p>У1, У5 и Сл1, Сл5 связаны между собой, слабые стороны увеличивают У1. У2 усиливаются всеми слабыми сторонами проекта.</p> <p>Стратегия устранения влияния Сл1 на угрозы заключается в увеличении эффективности расчетов, значительный потенциал вычислительных мощностей в оптимизации кода.</p> <p>Устранение Сл2 – выпуск дополнительно программного обеспечения с уменьшенным функционалом, но простотой эксплуатации.</p> <p>Устранение Сл4 заключается в подборе имеющие междисциплинарные навыки и заинтересованность в реализации проекта</p>

Ниже представлена интерактивная матрица проекта

Таблица 5.3 – Интерактивная матрица проекта

Сильные стороны проекта						
Возможности проекта		C1	C2	C3	C4	C5
	B1	+	-	+	+	-
	B2	+	-	+	-	-
	B3	+	-	+	+	+
	B4	+	-	+	+	+
	B5	-	+	-	-	+

Анализируя интерактивную матрицу проекта, можно представить проект в форме сильно коррелирующих сторон: B1C1C3C4, B2C1C3, B3B4C1C3C4C5, B5C2C5.

1.4. Оценка готовности коммерциализации.

Для оценки перспективности и завершенности текущего проекта проведена оценка готовности коммерциализации. Степень готовности проекта к коммерциализации приведена в следующей таблице:

Таб 5.4 – Оценка готовности коммерциализации			
№ п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1.	Определен имеющийся научно-технический задел	4	4
2.	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	4	4
3.	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	4	4

4.	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	4	2
5.	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	2	2
6.	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	2	2
7.	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	1	1
8.	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	1	1
9.	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	1	1
10.	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	3	3
11.	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	1	1
12.	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	1	1
13.	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	1	1
14.	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	4	2
15.	Проработан механизм реализации научного проекта	3	3
	ИТОГО БАЛЛОВ	36	32

Таким образом, перспективность коммерциализации средняя, основные направления улучшения уровня перспективности – повышение уровня компетенции в области маркетинга, финансирования, охране прав авторов и международного сотрудничества. Тем не менее, на текущей стадии проекта наиболее важными параметрами являются компетенции коллектива, поскольку существует большой потенциал по улучшению текущего проекта (с технической точки зрения).

5.5. Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования.

В качестве метода коммерциализации выбран инжиниринг. Это связано с характеристикой научно-исследовательской деятельности: отсутствие пользовательского интерфейса, необходимостью обучения и навыков программирования для использования разработки, что затрудняет использование других методов коммерциализации, например, торговля патентными лицензиями. В качестве альтернативного метода может быть организация собственного предприятия. Инжиниринг заключается в выполнении численных расчетов сложных физических задач, предоставление и анализ полученных результатов, усовершенствование технологий с помощью расчетов. Тем не менее, по мере развития проекта откроются новые возможности коммерциализации, на текущей стадии развития проекта наиболее оптимальным вариантом является инжиниринг. Таким образом, предполагается проведение расчетов специфических задач, визуализация и анализ результатов,

5.6. Инициация проекта.

Лица, заинтересованные в результатах проекта приведены в следующей таблице:

Таблица 5.5 – Заинтересованные стороны

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
ТПУ, Инженерная школа ядерных технологий, Научно-образовательный центр Б.П. Вейнберга	Проведение расчетов сложных физических задач, в частности моделирование плазмы, магнетронных распылительных систем

Результаты проекта ожидается применять на различных задачах, например, исследование сильноточных магнетронов, где необходимо учитывать изменение магнитного поля; исследование влияния двухзарядных ионов и т.д.

Цели проекта и критерии достижений цели приведены ниже:

Таблица 5.6 – Цели проекта и критерии достижений цели

Цели проекта:	Построить и реализовать метод численного моделирование магнетронной распылительной системы
Ожидаемые результаты проекта:	Результаты вычислений (данные о распределении концентрации носителей заряд, их скорости, электрический потенциал, распределение магнитного поля, температуры электронов), изменение физических величин во времени. Математический аппарат для решения комплексных физических задач.
Критерии приемки результата проекта:	Верификация расчетного алгоритма и полученных результатов Адекватность используемой модели плазмы Величина невязки расчетного алгоритма, устойчивость вычислений
Требования к результату проекта:	Требование:
	Наличие данных о физически величинах в разные моменты времени

	Наличие вспомогательных расчетов, подтверждающие адекватность построенного расчетного алгоритма и построенной модели плазмы
	Наличие разработанной библиотеки для возможности применения метода к решению других комплексных физических задач
	Анализ результатов расчета, интерпретация полученных результатов
	Анализ актуальности проведенной работы

Организационная структура проекта:

В рабочую группу данного проекта входят следующие участники:

Таблица 5.7 – Рабочая группа

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудозатраты, час
1	Марков С.А.	Магистрант, дипломник	Составление кинетической модели плазмы, реализация численного метода моделирования, выполнение вычислений	1800
2	Евдокимов К.Е.	Руководитель проекта	Верификация результатов расчетов, проверка адекватности построенной кинетической модели плазмы и реализации численного метода	1050

Ограничения проекта представлены в следующей таблице:

Таб 5.8 – Ограничения проекта	
Фактор	Ограничения/ допущения
3.1. Бюджет проекта	800 000 руб
3.1.1. Источник финансирования	ТПУ, обеспечение вычислительной техники
3.2. Сроки проекта:	

3.2.1. Дата утверждения плана управления проектом	01.09.2016
3.2.2. Дата завершения проекта	01.07.2018
3.3. Прочие ограничения и допущения*	Время вычислений, ограниченные вычислительные возможности проекта

5.7. Планирование управление техническим проектом.

Календарный план проекта представлен ниже:

Код работы (из ИСР)	Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников (ФИО ответственных исполнителей)
1	Литературный обзор на тему проекта	25	1.09.16	1.10.16	Евдокимов К.Е., Марков С.А.
2	Составление кинетической модели плазмы и магнетронной расплительной системы	25	1.10.16	1.11.16	Евдокимов К.Е., Марков С.А.
3	Анализ численных возможностей существующих расчетных конкурирующих программ	25	1.11.16	1.12.16	Евдокимов К.Е., Марков С.А.
4	Анализ методов численного решения поставленной задачи	50	1.12.16	1.02.17	Марков С.А., Евдокимов К.Е.
5	Программная реализация задачи, верификация метода с помощью решения вспомогательных задач	75	1.03.17	1.06.17	Марков С.А.
6	Оптимизация расчетного алгоритма, решение проблемы сходимости решения	50	1.09.17	1.11.17	Марков С.А., Евдокимов К.Е.
7	Выполнение расчетов, подбор параметров расчета	50	1.03.18	1.04.18	Марков С.А.
8	Визуализация, интерпритация, полученных результатов	25	1.04.18	1.05.18	Марков С.А.
И т о г о:		325			

T_{ki} рассчитывается по формуле $T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}}$,

Где $k_{\text{кал}} = \frac{365}{365-52-14} = 1.22$, $T_{\text{вых}} = 52$, $T_{\text{пр}} = 14$

Календарный план-график проведения НИОКР по теме:

Таблица 5.9 – календарный план-график, зеленый цвет соответствует дипломнику, красный - руководителю

	Вид работ	Исполнитель	T_k , кал, дн.	Продолжительность выполнения работ																
				09.16	12.16	03.17	06.17	09.17	12.17	3.18										
1	Литературный обзор	Руководитель, дипломник	30.5	■																
2	Составление модели	Руководитель, дипломник	30.5		■															
3	Анализ программ	Руководитель, дипломник	30.5			■														
4	Анализ методов	Руководитель, дипломник	61			■	■													
5	Реализация	Дипломник	91.5				■	■	■											
6	Оптимизация	Руководитель, дипломник	61							■	■									
7	Расчеты	Дипломник	30.5																	■
8	Анализ		30.5																	■

Бюджет научного исследования.

Затраты на расходные материалы включает вычислительную технику:

№	Наименование	Цена, руб
1	Процессор	20500
2	Оперативная память	7800
3	Графическая карта	5500
4	Монитор	5000
5	Материнская плата	4200
6	Блок питания	3100
Итого		46100

Накладные расходы содержат затраты на электроэнергию. Вычисления производились на протяжении всего времени проекта, оценочное потребление электроэнергии техникой $200 \text{ Вт} \cdot 325 \text{ (рабочие дни)} \cdot 24 \text{ час} = 1560 \text{ кВт ч}$. Таким образом, затраты на электроэнергию $1560 \cdot 5.8 = 9050 \text{ рублей}$.

Расчет основной заработной платы:

Исполнители	Z_6 , руб.	$k_{пр}$	k_d	k_p	Z_m , руб	$Z_{дн}$, руб.	T_p , раб. дн.	$Z_{осн}$, руб.
Руководитель	33664	0.3		1.3	56900	2358	175	412650
Инженер	9893			1.3	12860	533	325	173225
Итого								585875

Где Z_6 – основная заработная плата, $k_{пр}$ – премиальный коэффициент, k_d – коэффициент доплат и надбавок, k_p – районный коэффициент, Z_m – месячный должностной оклад,

Среднедневная заработная плата рассчитывается через следующее выражение:

$$Z_{дн} = \frac{Z_m M}{F_d}$$

M – количество месяцев без отпуска в течение года, при отпуске в 48 раб. Дней $M = 10.4$ месяца, 6-дневная неделя.

F_d – действительный годовой фонд рабочего время научно-технического персонала, $F_d = 365 - 52 - 14 - 48 = 251$ дней. 52 выходных, 14 – праздники, 48 дней отпуск.

$Z_{осн}$ - основная заработная плата одного работника:

$$Z_{осн} = Z_{дн} T_p$$

Отчисления на социальные нужды определяются следующим образом:

$$C_{внеб} = k_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{доп})$$

где $k_{\text{внеб}}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды 27.1 %.

Таким образом, общие затраты на проект:

Таблица 5.11, Общие затраты на проект

Вид расходов	Стоимость, руб
Заработная плата	585 875
Страховые отчисления	158 770
Оборудование	46 100
Накладные расходы	9050
Итого	799 795 (\approx 800 000)

Реестр рисков проекта.

Таб 5.12, реестр рисков проекта							
№	Риск	Потенциальное воздействие	Вероятность наступления (1-5)	Влияние риска (1-5)	Уровень риска*	Способы смягчения риска	Условия наступления
1	Расходимость	Неустойчивость нового алгоритма	5	5	высокий	Уменьшение точности	Недостаточная сходимость алгоритма
2	Большое время расчета	Высокие градиенты переменных	5	3	высокий	Уменьшение точности	Недостаточные вычислительные мощности
3	Нефизические результаты	Ошибка в построении модели	3	5	средний	Увеличение точности, изменение модели	Некорректная постановка задачи

Оценка сравнительной эффективности исследования.

Альтернативным методом исследования моделирования магнетронной распылительной системы является использование готовых расчетных пакетов для моделирования. В качестве альтернативного расчетного пакета выбран ANSYS-FLUENT и Mathematica, показатели ресурсоэффективности которых были приведены ранее. Финансовые затраты на использование данных расчетных пакетов увеличиваются в связи с необходимостью лицензирования данных программ в коммерческих целях. Интегральный показатель ресурсоэффективности текущего проекта 4.05, альтернативного варианта (ANSYS) – 2.85, Mathematica – 3.25 (критерии оценки были рассмотрены ранее в таблице 2). Таким образом, с точки зрения ресурсоэффективности по отношению к поставленной задаче рационально не использовать готовые расчетные пакеты в данном проекте из-за ограниченной функциональности. Общие финансовые затраты на проект составляет 800 000 рублей.

Таблица 5.13 – Показатели эффективности

	Показатель ресурсоэффективности	Финансовый показатель	Интегральный финансовый показатель	Интегральный показатель эффективности и разработки
Текущий проект	4.05	800 000	0.615	6.58
Использование ANSYS	2.85	1 300 000	1	2.85
Использование Mathematica	3.25	650 000	0.5	6.5

Цена использования Mathematica за два года составляет 4160 долларов США (250 000 рублей), лицензирование ANSYS-FLUENT порядка 75000 долларов США (4 500 000 рублей). Остальные расходы имеют аналогичные значения, как в данном проекте, однако нет надобности делать часть разработок. Анализируя план-график НИОКР, можно сделать вывод что половина времени

ушла на разработку программного обеспечения, поэтому финансовые затраты на заработную плату, амортизацию и накладные расходы оценочно уменьшены вдвое для проектов с использованием готового программного обеспечения (порядка 400 000). Кроме того следует отметить, что лицензирование ANSYS осуществляется на долгий срок, оценим время поддержки программного обеспечения в 10 лет, тогда расходы на проект с ANSYS 0.2 * 4 500 000 + 400 000 = 1 300 000 рублей.

Интегральный финансовый показатель – это отношение стоимости проекта к максимальной стоимости (из вариантов реализации проекта). Интегральный показатель эффективности разработки – отношение показателя ресурсэффективности к интегральному финансовому показателю.

Таким образом, анализ текущего проекта показывает, что по интегральному показателю эффективности разработки данный проект близок к проекту с использованием расчетного пакета Mathematica. Данный проект способен конкурировать с другим разработанным программным обеспечением.

6. Социальная ответственность

В современных условиях одним из основных направлений коренного улучшения всей профилактической работы по снижению производственного травматизма и профессиональной заболеваемости является повсеместное внедрение комплексной системы управления охраной труда.

Охрана труда – это система законодательных, социально-экономических, организационных, технологических, гигиенических и лечебно-профилактических мероприятий и средств, обеспечивающих безопасность, сохранение здоровья и работоспособности человека в процессе труда.

Правила по охране труда и техники безопасности вводятся в целях предупреждения несчастных случаев, обеспечения безопасных условий труда работающих и являются обязательными для исполнения рабочими, руководящими, инженерно-техническими работниками.

Опасным производственным фактором называется такой производственный фактор, воздействие которого в определенных условиях приводят к травме или другому внезапному, резкому ухудшению здоровья.

Вредным производственным фактором называется такой производственный фактор, воздействие которого на работающего в определенных условиях приводит к заболеванию или снижению трудоспособности.

6.1 Анализ опасных и вредных факторов

Производственные условия на рабочем месте характеризуются наличием опасных и вредных факторов, которые классифицируются по группам элементов: физические, химические, биологические, психофизиологические. В таблице 5.1 приведены основные элементы производственного процесса, формирующие опасные и вредные факторы.

Таблица 6.1 – Основные элементы производственного процесса, формирующие опасные и вредные факторы

Наименование видов работ и параметров производственного процесса	ФАКТОРЫ ГОСТ 12.0.003-74 ССБТ		Нормативные документы
	Вредные	Опасные	
Работа на ПЭВМ	—	Электрический ток	ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность
	Воздействие излучения		СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Санитарно-эпидемиологические правила и нормативы. «Гигиенические требования к ПЭВМ и организация работы»
	—	Пожарная безопасность	Пожаро- и взрывобезопасность промышленных объектов. ГОСТ Р12.1.004-85 ССБТ Пожарная безопасность

	—	Пожарная безопасность	Пожаро- и взрывобезопасность промышленных объектов. ГОСТ Р12.1.004-91 ССБТ Пожарная безопасность
--	---	--------------------------	--

При работе на ПЭВМ на студента воздействуют следующие факторы:

- физические: температура и влажность воздуха; шум; статическое электричество; электромагнитное поле; освещённость.
- психофизиологические.

Психофизиологические опасные и вредные производственные факторы, делятся на: физические перегрузки (статические, динамические) и нервно-психические перегрузки.

6.2 Обоснование и разработка мероприятий по снижению уровней опасного воздействия и устранению их влияния при работе на ПЭВМ

6.2.1 Организационные мероприятия

Весь персонал обязан знать и строго соблюдать правила техники безопасности. Обучение персонала технике безопасности и производственной санитарии состоит из вводного инструктажа и инструктажа непосредственно на рабочем месте ответственным лицом.

Проверка знаний правил техники безопасности проводится квалификационной комиссией или лицом ответственным за рабочее место после обучения на рабочем месте. После чего сотруднику присваивается соответствующая его знаниям и опыту работы квалификационная группа по технике безопасности и выдается удостоверение специального образца.

Лица, допущенные к работе, не должны иметь медицинских

противопоказаний. Состояние здоровья устанавливается медицинским освидетельствованием перед устройством на работу.

6.2.2 Организация рабочего места оператора ЭВМ

Рациональная планировка рабочего места предусматривает четкий порядок и постоянство размещения предметов, средств труда и документации. То, что требуется для выполнения работ чаще должно располагаться в зоне легкой досягаемости рабочего пространства, в качестве примера рисунок 1 иллюстрирует зоны досягаемости рук в горизонтальной плоскости.

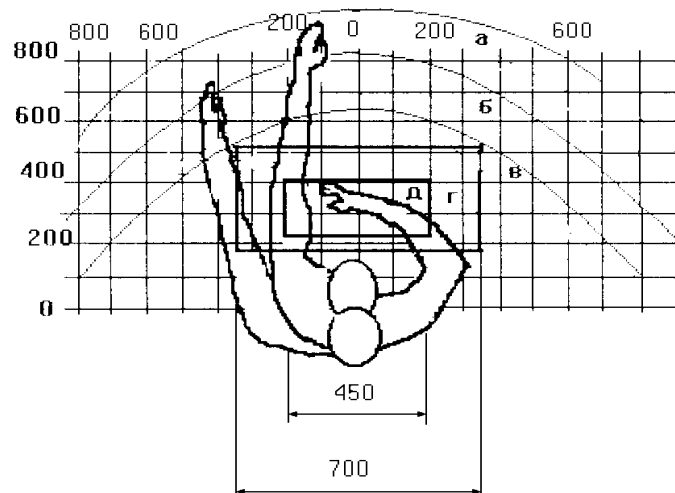


Рисунок 6.1 – Зоны досягаемости рук в горизонтальной плоскости

а – зона максимальной досягаемости рук;

б – зона досягаемости пальцев при вытянутой руке;

в – зона легкой досягаемости ладони;

г – оптимальное пространство для грубой ручной работы;

д – оптимальное пространство для тонкой ручной работы

При проектировании письменного стола должны быть учтены следующие требования.

Высота рабочей поверхности стола рекомендуется в пределах 680–800 мм. Высота рабочей поверхности, на которую устанавливается

клавиатура, должна быть 650 мм. Рабочий стол должен быть шириной не менее 700 мм и длиной не менее 1400 мм. Должно иметься пространство для ног высотой не менее 600 мм, шириной — не менее 500 мм, глубиной на уровне колен — не менее 450 мм и на уровне вытянутых ног — не менее 650 мм.

Рабочее кресло должно быть подъёмно-поворотным и регулируемым по высоте и углам наклона сиденья и спинки, а так же расстоянию спинки до переднего края сиденья. Рекомендуется высота сиденья над уровнем пола 420–550 мм. Конструкция рабочего кресла должна обеспечивать: ширину и глубину поверхности сиденья не менее 400 мм; поверхность сиденья с заглаблённым передним краем.

Монитор должен быть расположен на уровне глаз оператора на расстоянии 500–600 мм. Согласно нормам угол наблюдения в горизонтальной плоскости должен быть не более 45° к нормали экрана. Лучше если угол обзора будет составлять 30°. Кроме того должна быть возможность выбирать уровень контрастности и яркости изображения на экране.

Должна предусматриваться возможность регулирования экрана.

Клавиатуру следует располагать на поверхности стола на расстоянии 100–300 мм от края.

6.2.3 Условия безопасной работы

Основные параметры, характеризующие условия труда это микроклимат, шум, вибрация, электромагнитное поле, излучение, освещённость.

Воздух рабочей зоны (микроклимат) производственных помещений определяют следующие параметры: температура, относительная влажность, скорость движения воздуха. Оптимальные и допустимые значения характеристик микроклимата устанавливаются в соответствии с [15] и приведены в таблице 2.

Таблица 6.2 – Оптимальные и допустимые параметры микроклимата

Период года	Температура, °С	Относительная влажность, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный и переходный	23–25	40–60	0,1
Тёплый	23–25	40	0,1

К мероприятиям по оздоровлению воздушной среды в производственном помещении относятся: правильная организация вентиляции и кондиционирования воздуха, отопление помещений. Вентиляция может осуществляться естественным и механическим путём. В помещении должны подаваться следующие объёмы наружного воздуха: при объёме помещения до 20 м³ на человека — не менее 30 м³ в час на человека; при объёме помещения более 40 м³ на человека и отсутствии выделения вредных веществ допускается естественная вентиляция.

Система отопления должна обеспечивать достаточное, постоянное и равномерное нагревание воздуха. Параметры микроклимата в используемой лаборатории регулируются системой центрального отопления, и имеют следующие значения: влажность — 40%, скорость движения воздуха — 0,1 м/с, температура летом — 20–25 °С, зимой — 13–15 °С. В лаборатории осуществляется вынужденная вентиляция. Воздух поступает и удаляется через щели, окна, двери. Основной недостаток такой вентиляции в том, что приточный воздух поступает в помещение без предварительной очистки и нагревания.

Шум и вибрация ухудшают условия труда, оказывают вредное воздействие на организм человека, а именно, на органы слуха и на весь организм через центральную нервную систему. В результате этого ослабляется внимание, ухудшается память, снижается реакция, увеличивается

число ошибок при работе. Шум может создаваться работающим оборудованием, установками кондиционирования воздуха, осветительными приборами дневного света, а также проникать извне. При выполнении работы на ПЭВМ уровень шума на рабочем месте не должен превышать 50 дБ.

Экран и системные блоки ПЭВМ производят электромагнитное излучение. Основная его часть происходит от системного блока и видеокабеля. Согласно, напряженность электромагнитного поля на расстоянии 50 см вокруг экрана по электрической составляющей должна быть не более:

- в диапазоне частот от 5Гц до 2кГц — 25В/м;
- в диапазоне частот от 2 до 400 кГц — 2,5В/м.

Плотность магнитного потока должна быть не более:

- в диапазоне частот от 5Гц до 2кГц — 250нТл;
- в диапазоне частот от 2 до 400 кГц — 25нТл;

Существуют следующие способы защиты от ЭМП:

- увеличение расстояния от источника (экран должен находиться на расстоянии не менее 50 см от пользователя);
- применение приэкранных фильтров, специальных экранов и других средств индивидуальной защиты.

При работе с компьютером источником ионизирующего излучения является дисплей. Под влиянием ионизирующего излучения в организме может происходить нарушение нормальной свертываемости крови, увеличение хрупкости кровеносных сосудов, снижение иммунитета и др. Доза облучения при расстоянии до дисплея 20 см составляет 50 мкбэр/час. По нормам конструкция ЭВМ должна обеспечивать мощность экспозиционной дозы рентгеновского излучения в любой точке на расстоянии 0,05 м от экрана не более 100 мкР/час.

Утомляемость органов зрения может быть связана как с недостаточной освещенностью, так и с чрезмерной освещенностью, а также с неправильным направлением света.

5.3 Электробезопасность

В зависимости от условий в помещении опасность поражения человека электрическим током увеличивается или уменьшается. Не следует работать с ЭВМ в условиях повышенной влажности (относительная влажность воздуха длительно превышает 75 %), высокой температуры (более 35 °С), наличии токопроводящей пыли, токопроводящих полов и возможности одновременного прикосновения к имеющим соединение с землей металлическим элементам и металлическим корпусом электрооборудования. Существует опасность поражения электрическим током в следующих случаях:

- при непосредственном прикосновении к токоведущим частям во время ремонта;
- при прикосновении к нетоковедущим частям, оказавшимся под напряжением (в случае нарушения изоляции токоведущих частей);
- при прикосновении с полом, стенами, оказавшимися под напряжением;
- при коротком замыкании в высоковольтных блоках: блоке питания и блоке дисплейной развёртки.

Действие электрического тока на живую ткань носит разносторонний и своеобразный характер. Проходя через организм человека, электроток производит термическое, электролитическое, механическое, биологическое, световое воздействие.

Световое действие приводит к поражению слизистых оболочек глаз. Термическое воздействие тока характеризуется нагревом кожи и тканей до высокой температуры вплоть до ожогов.

Электролитическое воздействие заключается в разложении органической жидкости, в том числе крови, и нарушении ее физико-химического состава.

Механическое действие тока приводит к расслоению, разрыву тканей организма в результате электродинамического эффекта, а также мгновенного взрывоподобного образования пара из тканевой жидкости и крови. Механическое действие связано с сильным сокращением мышц вплоть до их разрыва.

Биологическое действие проявляется в раздражении и возбуждении живых тканей и сопровождается судорожными сокращениями мышц.

Мероприятия по обеспечению электробезопасности электроустановок:

– отключение напряжения с токоведущих частей, на которых или вблизи которых будет проводиться работа, и принятие мер по обеспечению невозможности подачи напряжения к месту работы;

– недоступность токоведущих частей аппаратуры (заклучение в корпуса электропоражающих элементов, заклучение в корпус токоведущих частей).

Основные выводы

1. Разработанное программное обеспечение для моделирования задач физики плазмы прошло верификацию с помощью решения вспомогательных задач.

2. Недостатком исследуемой модели плазмы является двухмерная постановка задачи. Имеются проблемы сходимости решения у оси, в частности, проблемы при расчете температуры. Также необходимо внести в модель рекомбинацию электронов и ионов, поскольку замечены области с низкой температурой.

3. В отличие от модуля моделирования плазмы COMSOL, где в качестве проблемы выступает высокая численная вязкость в области магнитного поля, разработанная программа имеет другой тип численной погрешности, которая аналогична погрешности в явных конечно-разностных схемах, наблюдаются колебания значений на уровне сетки.

4. Результаты расчета непротиворечивы, т.е. концентрации и скорости, конфигурация электрического поля, температура и поток энергии согласованы между собой, однако, наблюдаются отклонения от экспериментальных данных, в частности, температура электронов завышена. Использование открытых граничных условий приводит к более согласованным с экспериментом результатам. Однако, вопрос о постановке граничных условий требует отдельного изучения с детальным анализом процессов, происходящих на поверхности.

Благодарности

Автор выражает благодарности научному руководителю доктору физико-математических наук Евдокимову Кириллу Евгеньевичу, сотрудниками научно-образовательного центра Б.П. Вейнберга, Блейхер Галине Алексеевне, Юрьевой Алене Викторовне и Кривобокову Валерию Павловичу за проведение научных семинаров и участие в обсуждении данной работы.

Список литературы

1. Ronald W. Lewis, Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow / Ronald W. Lewis, Perumal Nithiarasu, Kankanhally N. Seetharamu. – Изд-во WILEY, 2004 – 356 с. - ISBN: 978-0-470-02081-4.
2. Two-dimensional fluid approach to the dc magnetron discharge / C. Costin [и др.] // Plasma Sources Science and Technology – 2005. – №14. – С. 168 – 176.
3. Жданов, В.М. Процессы переноса в многокомпонентной плазме / В. М. Жданов . – М. : Физматлит, 2009 . – 280 с. – (Фундаментальная и прикладная физика) . – ISBN 978-5-922110-52-5.
4. Сабоннадьер, Ж.К. Метод конечных элементов и САПР / Ж.К. Сабоннадьер, Ж-Л Кулон – М.: Мир, 1989. – 152 с. – ISBN: 5-03-000488-2.
5. Галлагер Р. Метод конечных элементов. Основы. Пер. с англ. – М.: Мир, 1984. – 428 с.
6. ANSYS FLUENT 12.0 Theory Guide [Электронный ресурс]. ANSYS, Inc. – 2009. – Режим доступа: http://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/th/main_pre.htm, свободный. – Яз. англ.
7. Бэдсел Ч. Физика плазмы и численное моделирование / Бэдсел Ч. , Ленгтон А. Пер. с англ. – М.: Энергоатомиздат, 1989. – 452 с. – ISBN 5-283-02432-6.
8. George W. Collins. Fundamental Numerical Methods and Data Analysis. – 2003. – 267 с.

9. Ioannis K. Numerical Methods For Equations and its Applications / Ioannis K., Argyros. Yeol Je Cho., Said Hilout. – CRC Press, 2012. – 465 с. – ISBN 978-1-4665-1711-0.
10. А.С. Антонов Параллельное программирование с использованием технологии OpenMP: Учебное пособие – М.: Издательство МГУ, 2009. – 77 с. ISBN 978-5-211-05702-9.
11. Michael A. Liberman, Alan J. Lichtenberg Principles of plasma discharges and materials processing : WILEY-INTERSCIENCE, Second Edition. – 757 с. ISBN 0-471-72001-1.
12. Красников Г.Е., Нагорнов О.В., Старостин Н.В. Моделирование физических процессов с использованием пакета Comsol Multiphysics: Учебное пособие. М.: НИЯУ МИФИ, 2012. 184 с. ISBN 978-5-7262-1688-1.
13. Szabo James Joseph Jr. Fully Kinetic Numerical Modeling of a Plasma Thruster : Ph. D. thesis / James Joseph Jr. Szabo ; Massachusetts Institute of Technology. — 2001.
14. Перепёлкина А.Ю., Левченко В.Д. Реализация метода макрочастиц физики плазмы на графических ускорителях // Научный сервис в се ти Интернет: многообразие суперкомпьютерных миров: Труды Между народной суперкомпьютерной конференции. — Москва : Издательство МГУ, 2014. — 22-27 сентября, г. Новороссийск. — С. 325–327.
15. Сигов Ю. С. Вычислительный эксперимент: мост между прошлым и будущим физики плазмы. Избранные труды/ Сост. Г.И. Змиевская, В.Д. Левченко. — Москва : Физматлит, 2001.

16. Бате Н., Вилсон Е. Численные методы анализа и метод конечных элементов. – М.: Стройиздат, 1982. – 448 с.
17. Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов. – М.: Мир, 1979. – 392 с.
18. Ландау Л. Д., М. Лифшиц Е. Теоретическая физика (в 10 томах). — ФИЗМАТЛИТ, 2003. — Т. 2.
19. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. — Лаборатория Базовых Знаний, 2002.
20. Голант В.Е., Жилинский А.П., Сахаров И.Е. Основы физики плазмы. М.: Атомиздат, 1977.
21. Козлов Н.П. Основы физики плазмы. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1997.
22. Ортега, Дж. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем / Дж. Ортега. – М.: Мир, 1991.
23. Писсанецки, С. Технология разреженных матриц / С. Писсанецки. – М.: Мир, 1988.
24. Эльсгольц Л.Э. Дифференциальные уравнения. М.: Изд. ЛКИ, 2008. -320 с.
25. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов А.Н., Крайко Г.П., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.:Наука, 1976.- 400 с.

Приложение №1

Раздел №4
Результаты расчета

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ61	Марков С.А.		

Консультант школы отделения (НОЦ) _____:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Инженер	Сиделёв Дмитрий Владимирович			

Консультант – лингвист отделения (НОЦ) школы _____:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Кабрышева Оксана Павловна			

Chapter 4. Results.

Typical simulation results for the whole volume of the discharge are presented for argon at a pressure $p = 0.1$ Pa, neutral temperature $T_{Ar} = 300$ K and a polarization of the cathode of -320 V. The plasma potential, charged particle densities and velocities are shown as representative results. An analysis of the kinetics of the plasma within the framework of the model is presented. Due to the cylindrical symmetry of the system only a bi-dimensional picture is plotted.

4.1. Verification.

Examining the results in figures 4.1 – 4.4, the validity of the computational algorithm can be verified.

The program verification includes a solution of a heat equation at different boundary conditions, a solution of Burgers' equation, and a solution of an aerodynamics equation system.

The accompanying figure 4.1 compares the ANSYS computational results and the results of the developed software

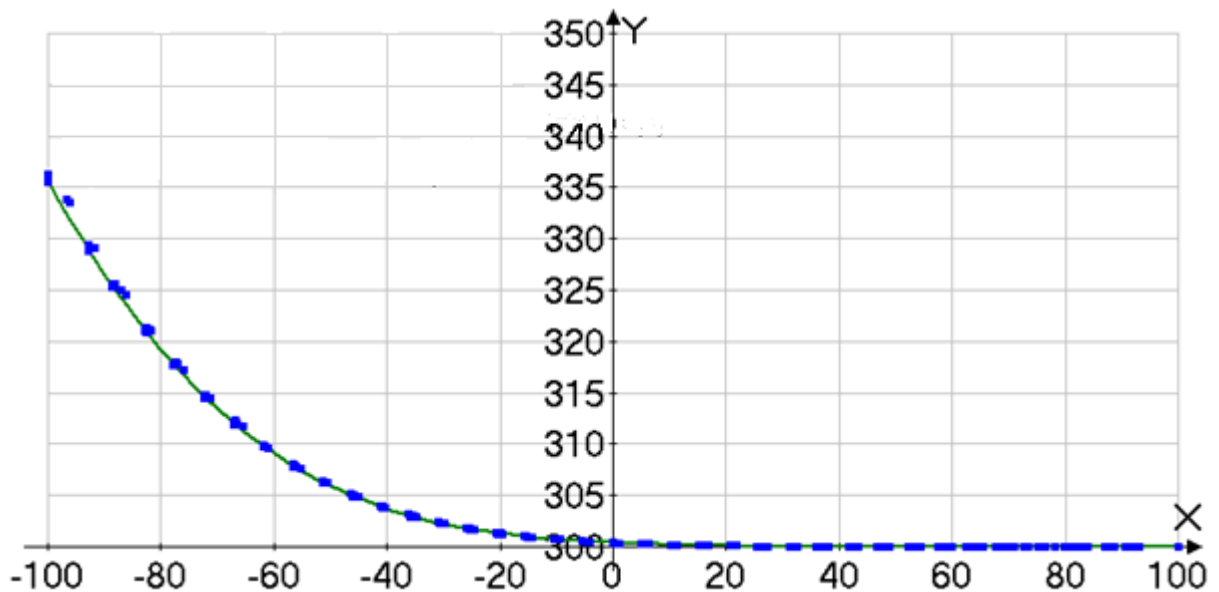


Figure 4.1 the solution of the heat equation (Neumann boundary condition), the green line correspond to ANSYS-FLUENT solver

Figure 4.2. shows the solution at a 3rd type boundary conditions:

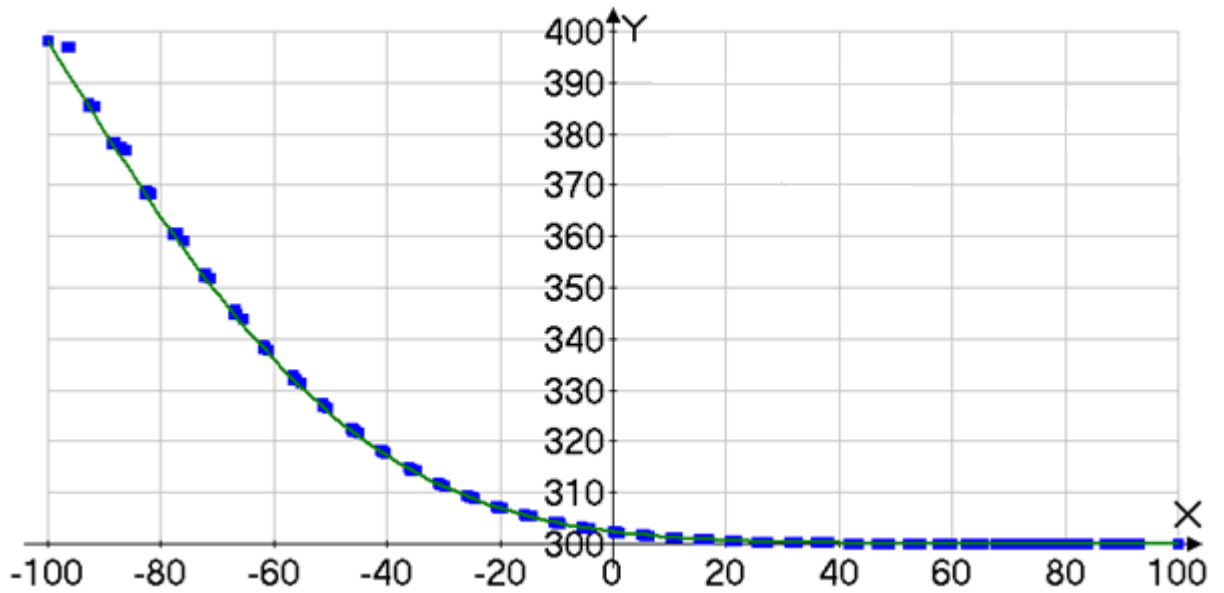


Figure 4.2. The solution of the heat equation (the 3rd type boundary conditions), the green line corresponds to ANSYS-FLUENT solver.

Burgers' equation allows to verify a time term, a connectivity term and Laplace operator. Figure 4.3. shows the solution of Burgers' equation (4.1). The checking calculation is done using Mathematica (software).

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{1}{Re} \Delta \Phi = 0 \quad (4.1)$$

Where Δ is Laplace operator, Re the Reynolds number.

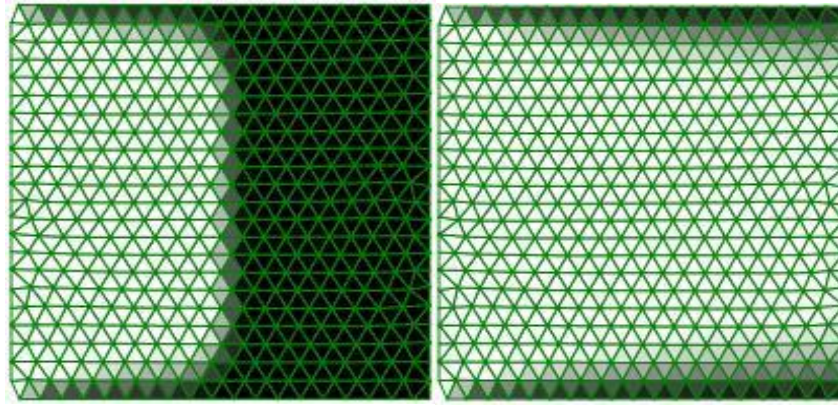


Figure 4.3. The solution of Burgers' equation at a different moments in time, the boundary conditions: $\Phi = 1$ (left bound), $\frac{\partial \Phi}{\partial n} = 0$ (right bound), $\Phi = 0$ (bottom, top).

Figure 4.4. shows the solution of the aerodynamics equation system without Lorentz force. The initial electron concentration is uniform (10^{13} m^{-3}). A flux of particles is proportional to the concentration of electrons. The theoretical solution corresponds to a square cosine distribution.

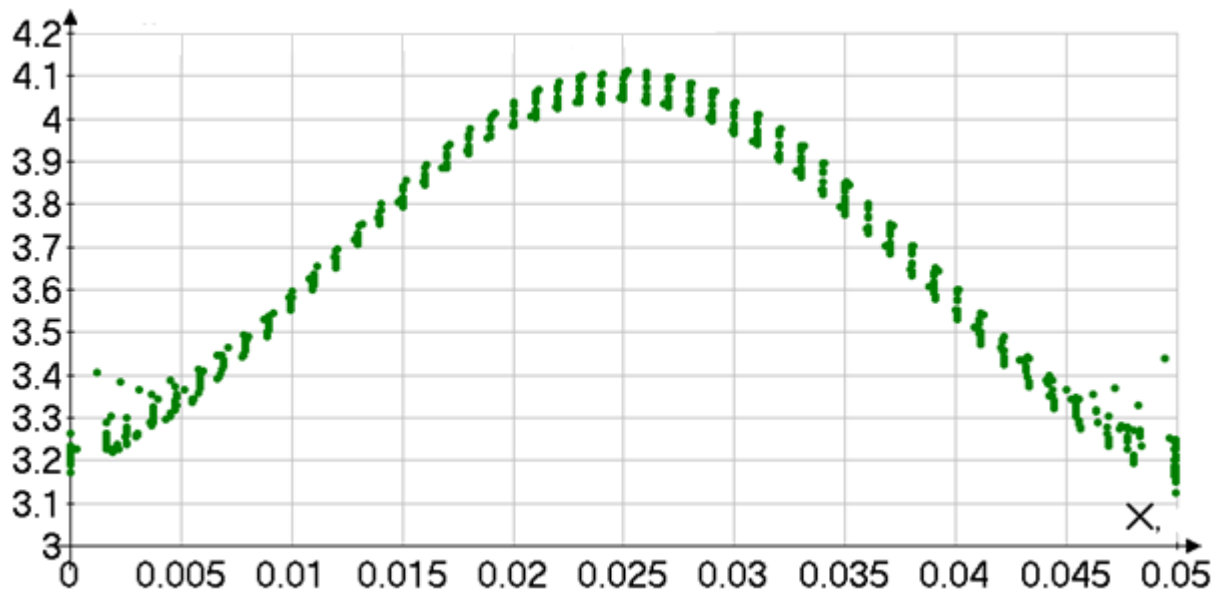


Figure 4.4. the solution of the aerodynamics equation system

A regression analysis confirms that the concentration has a square cosine distribution. Therefore, the verification allows to conclude that the developed program can be used for modeling of the magnetron sputtering system.

4.2. Magnetic field.

A magnetic field can be assumed as a constant owing to a low value of charge current in the magnetron system. The magnet system of the magnetron is represented as contours current. Table 4.1. shows the parameters of contours.

Table 4.1 – parameters of contours

№	I, A	R, m
1	-54041.8	0.008718
2	54041.8	0.011718
3	-40337.9	0.022174
4	40337.9	0.025174
5	16393.2	0.082567
6	-16393.2	0.085567

Where I is current, R the radius.

The axial component of the magnetic field is shown in figure 4.5.

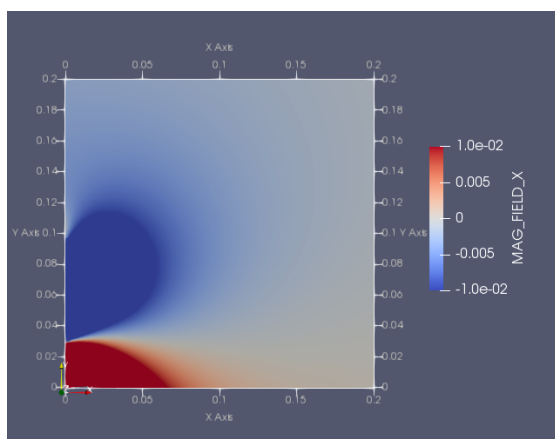


Figure 4.5. The axial component of the magnetic field. The maximum value of induction is equal to 0.35 T.

The radial component of the magnetic field is shown in figure 4.6. Therefore, we can see that the magnetic field is located in an area near the cathode. It allows to increase the plasma concentration.

ANSYS – Maxwell software can be used for a calculation of the magnetic field but values of a magnet parameters are unknown. The values of parameters is obtained by a least square method and Biot-Savart law (4.2 and 4.3).

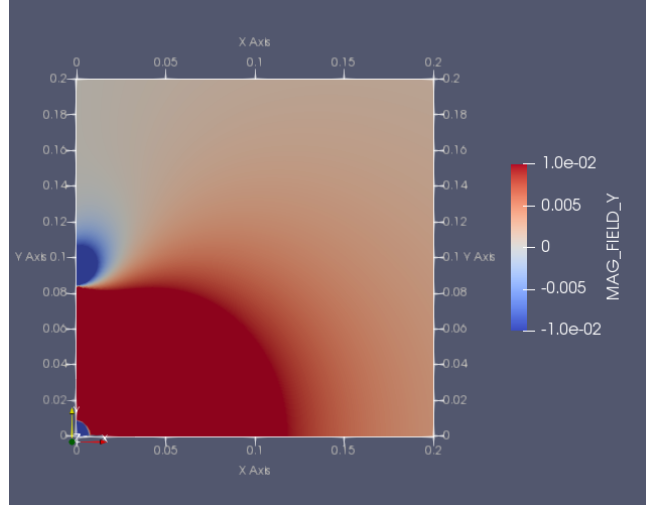


Figure 4.6. The radial component of the magnetic field. The maximum value of induction is equal to 0.24 T.

$$B_z(r, z) = \frac{\varepsilon_0}{4\pi} \sum_i \int_0^{2\pi} I_i \frac{R_i(R_i - r)}{((z_0 - z)^2 + r^2 + R_i^2 + 2R_i r \cdot \cos(\varphi))^{3/2}} d\varphi \quad (4.2)$$

$$B_r(r, z) = \frac{\varepsilon_0}{4\pi} \sum_i \int_0^{2\pi} I_i \frac{R_i(z - z_0)}{((z_0 - z)^2 + r^2 + R_i^2 + 2R_i r \cdot \cos(\varphi))^{3/2}} d\varphi \quad (4.3)$$

Where B_z is the axial component of the magnetic field, B_r the radial component, I_i the current of the contours, φ the angle. The integrals (4.2) and (4.3) are calculated by a trapezoidal method.

4.3. Concentration.

The initial concentration distribution is uniform. A low value of the initial plasma concentration leads to a plasma damping. The time step is equal to 10^{-9} sec. The concentration distributions are shown at the different moment in time (1 μ s and 20 μ s). Kinetics of electron concentration is unsteady because a mobility of electrons

is greater than a mobility of argon ions. It leads to an imbalance of charge in the magnetron.

The magnetic field holds the plasma near the cathode. Figure 4.7. shows the concentration of electrons at $1 \mu\text{s}$.

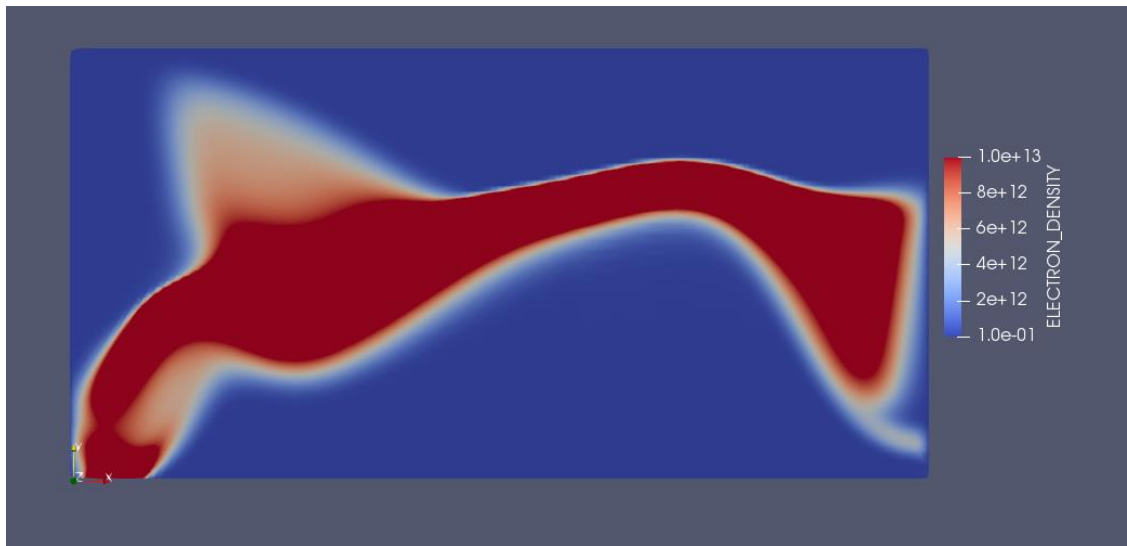


Figure 4.7. The concentration of electrons at $1 \mu\text{s}$. The left bound is the cathode. The bottom bound is the axis.

The electron concentration oscillates between the axis and the anode. The oscillations decrease over time. The maximum of an electrical potential is observed at $3.5 \mu\text{s}$. An electrical potential distribution can be used as a measure of a charge imbalance in the magnetron. A charge imbalance leads to the plasma oscillation.

Figure 4.8 shows the concentration of ions at $1 \mu\text{s}$.



Figure 4.8. The concentration of argon ions at 1 μ s. The left bound is the cathode. The bottom bound is the axis.

Figure 4.9 shows the concentrations of electrons at 20 μ s. Electrons are located near the cathode. We can see the oscillation of concentration, and a motion from the cathode to the axis and vice versa. The period of fluctuations is equal to 300 ns.

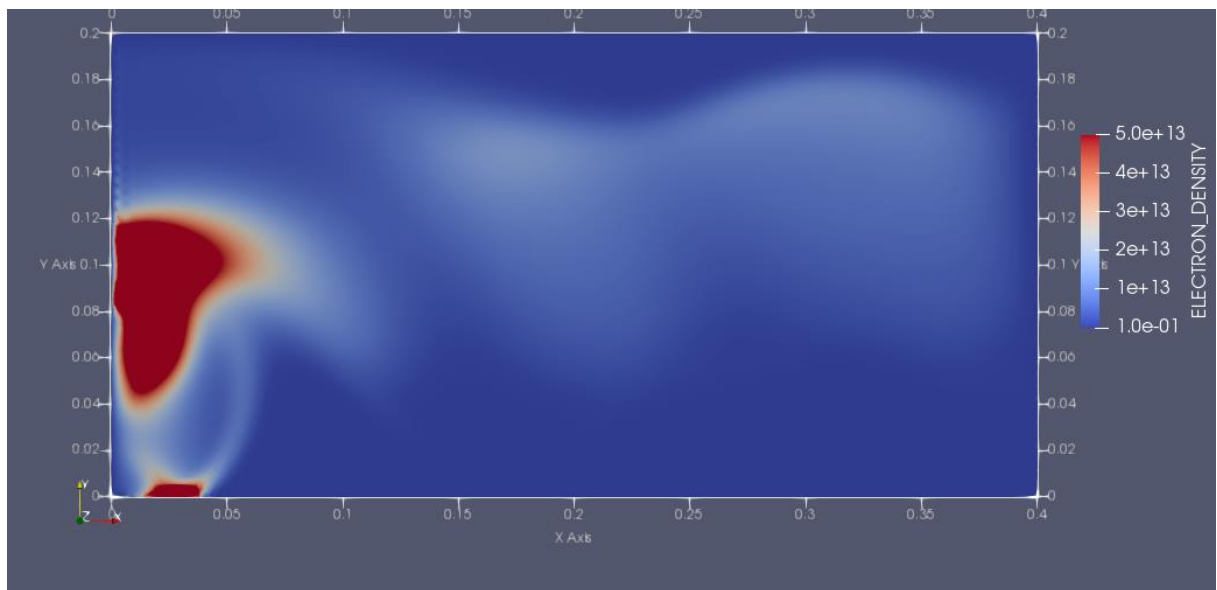


Figure 4.9. The concentration of electrons at 20 μ s. The left bound is cathode. The bottom bound is the axis.

The concentration of electrons increases, the maximal value is equal to $5 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-3}$ (the initial value is equal to 10^{13} m^{-3}).

Figure 4.10 shows the concentration of ions at 20 μ s. We can see a rise of plasma near the cathode.

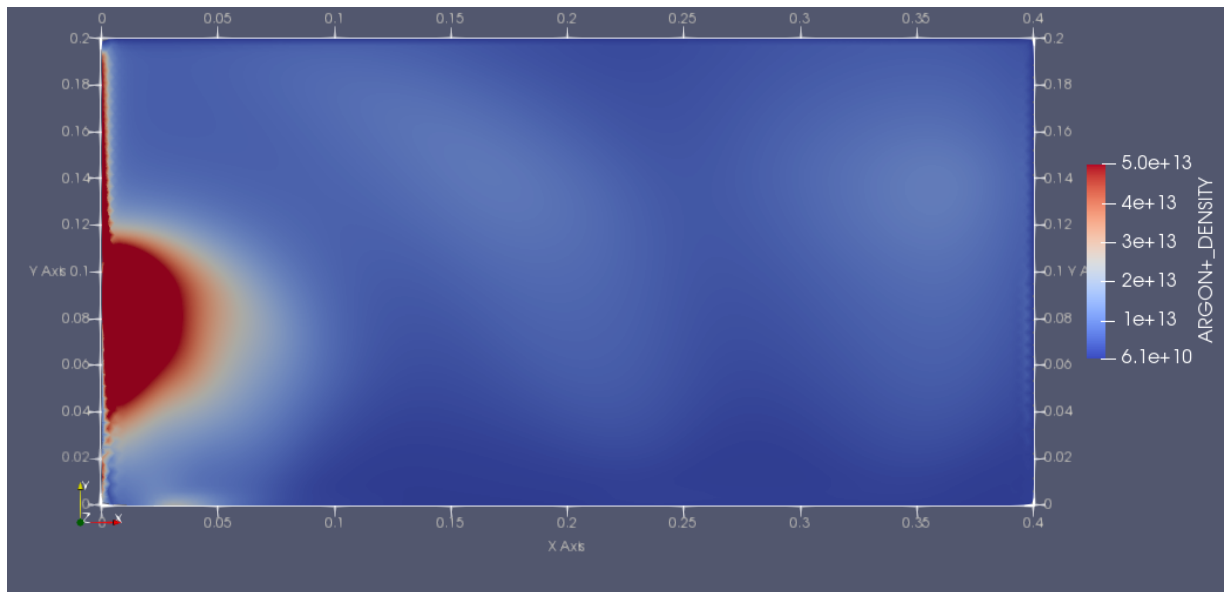


Figure 4.10 The concentration of argon ions at 20 μ s. The left bound is cathode. The bottom bound is axis

The maximal value of ions concentration is equal to $3 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-3}$.

4.4. Velocity.

An analysis of a velocity distribution is important for modeling of the magnetron system. The velocity distributions are obtained by a calculation of the moment transfer equations. We can determine a location of racetrack, and a rate of sputter deposition. The Deposition rate is proportional to an ions flux. The ions flux can be obtained by an integration.

Figure 4.11 shows the velocity distribution of electrons at 20 μ s. The vectors points to the direction of a motion. The color corresponds to the magnitude of velocity.

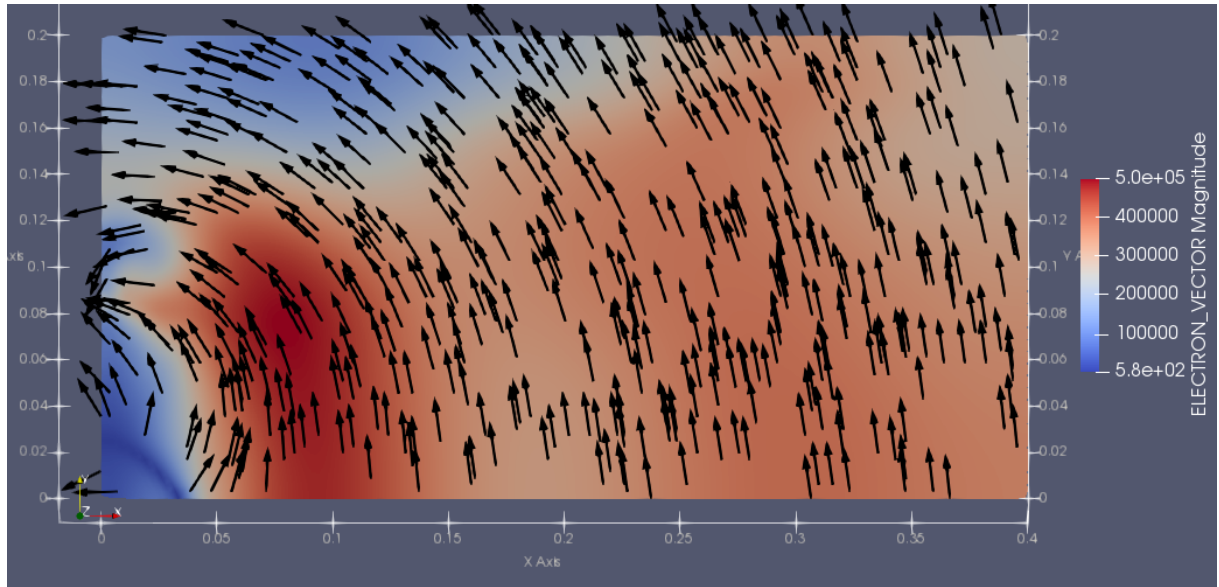


Figure 4.11. The velocity distribution of electrons at $20 \mu\text{s}$. The left bound is the cathode. The bottom bound is the axis.

The velocity distribution oscillates near the cathode. The maximum of velocity value is equal to $500\,000 \text{ m/s}$. Figure 4.12 shows the velocity distribution at $20.15 \mu\text{s}$. Minimal value of velocity magnitude is located near the cathode.

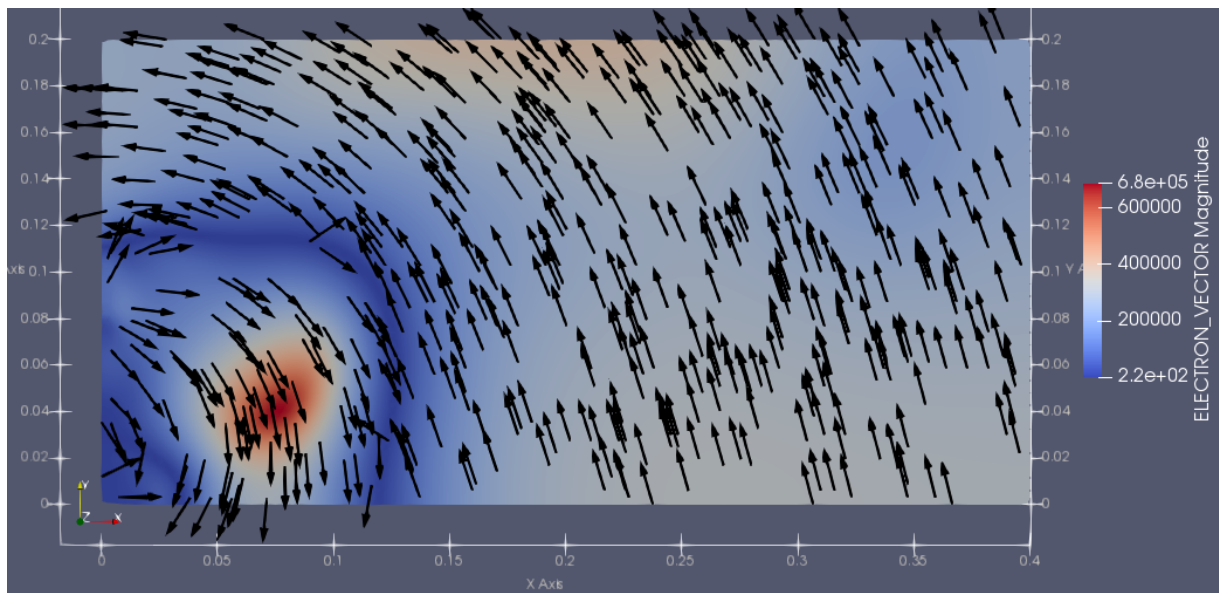


Figure 4.12 The velocity distribution of electrons at $20.15 \mu\text{s}$. The left bound is cathode. The bottom bound is the axis.

The comparison of distributions (4.11) and (4.12) shows that the velocity changes the direction every 150 ns . If the velocity is directed to the axis then the concentration of electrons increases near the axis. The electrical potential slows down and accelerates electrons due to a virtual cathode. The electrical potential can

not change the velocity at once. We can see a charge disbalance near the cathode. The disbalance leads to a restoring force. These processes can be explained by the type of boundary condition, which does not include the convective term. Therefore, the convective term is important for modeling of the magnetron sputtering system.

4.5. Electrical potential.

The electrical potential distribution is obtained by Poisson's equation. The electrical potential shows the charge disbalance in the magnetron sputtering system. The maximum of potential value is equal to 2000 V at 3.5 μs . Figure 4.13 shows the electrical potential distribution at 3.5 μs . Electrons are located into an electrical oscillator. It leads to reduction of a electrons loss in the magnetron.

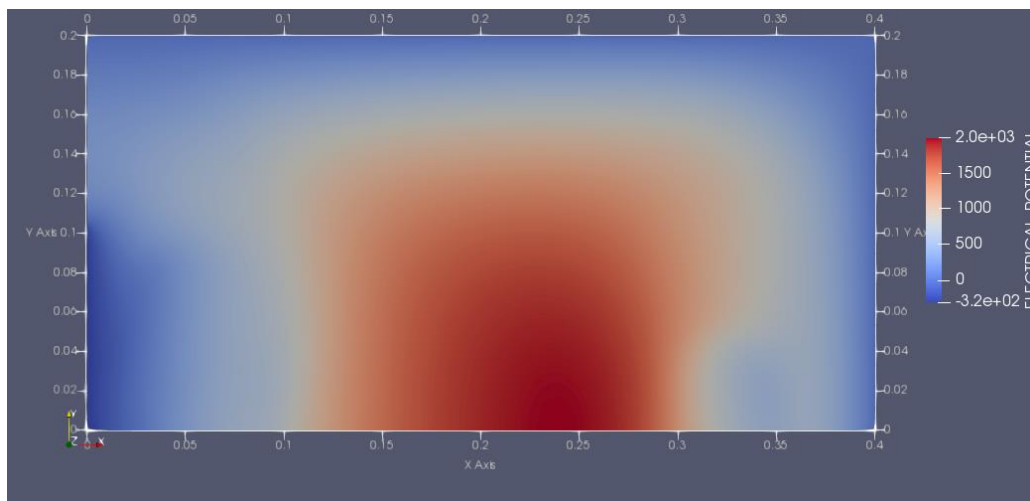


Figure 4.13 The electrical potential distribution at 3.5 μs . The left bound is cathode. The bottom bound is the axis.

Figure 4.14 shows the electrical potential distribution at 20 μs . We can see the region of charge disbalance where the potential value is less than -320 V (polarization of the cathode of -320 V). This region is called a virtual cathode.

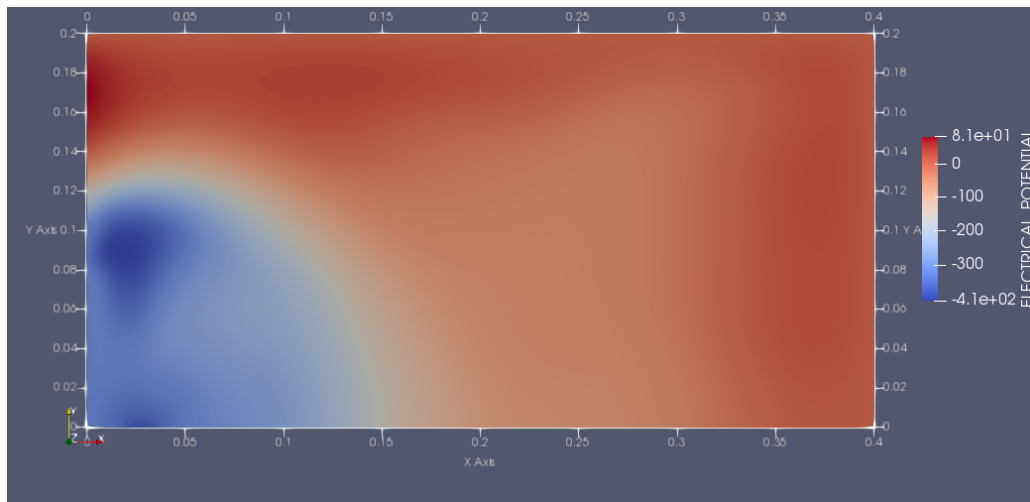


Figure 4.15 The electrical potential distribution at 20 μ s. The left bound is the cathode. The bottom bound is the axis.

The minimum of potential value is equal to -410 V.

Therefore, the electrical potential distribution allows to determine a source of the plasma fluctuations. It is important for plasma model improving.

4.6. Temperature of electrons.

The temperature distributions is obtained by the energy density equation. The temperature of electrons is important for calculation of a mobility, an energy loss and an ionization coefficient. The mobility factor is in the Lorentz force and the boundary conditions. The ionization coefficient determines a rate of plasma generation. Figure 4.16. shows the temperature distribution in the magnetron. The initial temperature is equal to 7 eV. The vectors points to the direction of the energy flux. The color correspond to the temperature value.

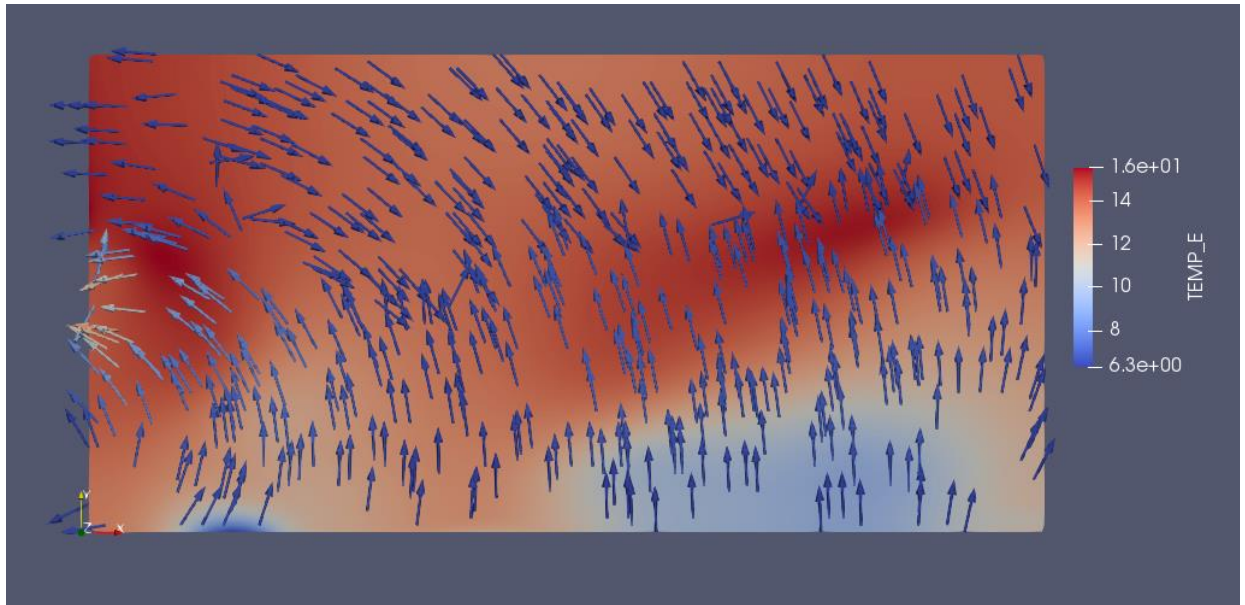


Figure 4.16. The temperature distribution at $20 \mu\text{s}$. The left bound is the cathode. The bottom bound is the axis.

The experimental value of the temperature is equal to 7-9 eV. An increase in temperature can be explained by the concentration oscillation. The temperature drops when the oscillations are insignificant. Therefore, the plasma model must be to improve because the boundary conditions does not include the convective term. It leads to a high value of temperature. We can see that the maximal value of the temperature is equal to 16 eV. According to the theoretical data, the temperature of electrons is equal to 3 eV. If the boundary conditions includes the convective term then the maximal value is 4.1 eV. It corresponds to the theoretical estimates.

Therefore, the variation of the plasma parameters (potential, electron concentration, velocity, electron temperature) corresponds to the theoretical estimates. Numerical simulations were performed considering argon as a buffer gas, with a neutral pressure 0.1 Pa, for different initial conditions and different boundary conditions.