

PIC 플라즈마 시뮬레이션에서의 유한요소법 적용에 관한 연구

민웅기*, 김형석**, 이석현***, 한송엽*
 서울대학교*, 순천향대학교**, 인하대학교***

A Study on FEM Application in PIC Plasma Simulation

Woong-kee Min*, Hyeong-seok Kim**, Seok-hyun Lee***, Song-Yop Hahn*

School of Electrical Engineering, Seoul National University.

Department of Electrical Engineering, Suncheonhyang University.

Department of Electrical Engineering, Inha University.

ABSTRACT

In the PIC simulation of plasma, the fields are commonly calculated on uniform spatial grids using FDM. But, FDM has a difficulty in modeling a complex shaped model. FEM has a good flexibility in treating a complex shape, so that we calculated the field by using FEM not FDM. In this paper, the plasma between plane-to-plane electrodes was simulated using FEM and FDM. Comparing the results of those two methods told us that FEM is also valid as a calculating method in PIC plasma simulation. In order to verify the use of FEM, the discharge of rod-to-plane was simulated. There was not a little distortion of the electric field between the electrodes due to the distribution of space charges.

1. 서 론

플라즈마를 시뮬레이션하는 방법에는 크게 입자모형화, 유체모형화, 그리고 두 가지 방법을 혼용하는 것이 있다.

입자모형화에서는 수만개의 전자나 이온을 하나의 입자로 대표해서 전장을 해석하고, 각각의 운동방정식을 풀어나간다. 이 방법은 실험식에는 그다지 의존하지 않으나 빠른 계산 속도와 많은 메모리가 필수적이다. 반면에, 유체모형화는 플라즈마의 운동을 유체의 흐름으로 보고 해석하는 방법으로 실험 데이터에 많이 의존한다. 또, 이 두 가지 방법의 약점을 보완하기 위해, 빠른 운동을 하는 전자는 유체모형화를, 비교적 느린 이온은 입자모형화를 하여 시뮬레이션하는 방법도 시도되고 있다.

근래에는 크게 향상된 계산속도와 기억장치에 힘입어 입자모형화가 많은 관심을 끌고 있다. 입자모형화의 대표적인 방법에는 공간을 여러 요소로 나누고 하전입자의 전하를 각각의 격자점에 할당하여 전장을 계산하는 PIC(Particle In Cell)가 있다. 지금까지의 PIC에서는 전하를 가중하는 방법과 전하가 속한 요소를 찾아내는 방법의 편의성 때문에 등간격 요소를 이용한 유한차분법으로 전장을 계산하여 왔다.[1] 그러나 이러한 유한차분법은 등간격 요소를 분할하기 곤란한

모델에는 적용하기가 어렵다.

본 연구에서는 이러한 제약을 해소하기 위해서, 전제를 구하는 방법으로 복잡한 형상을 다루는데 유리한 유한요소법을 사용하였다. 그리고, 그 타당성을 검증하기 위해 평판 대평판 사이에 존재하는 플라즈마를 두 방법으로 시뮬레이션하여, 시간에 따른 입자수의 변화와 관심있는 몇 점에서의 전압의 변화를 비교하였다. 아울러 몬테카를로충돌(MCC)과 이차전자방출을 추가하여, 등간격 요소를 사용하기 곤란한 침대 평판 사이에서의 방전현상을 시뮬레이션하고 그 결과를 검토하였다.

2. 본론

2.1 유한요소정식화

맥스웰 방정식에서 시간에 따른 자장의 변화를 무시하면, 지배방정식은 다음과 같다.

$$\nabla \cdot (-\epsilon \nabla \phi) = \rho \quad (1)$$

균일하고 등방성인 매질을 가정하고, 갤리진법을 사용하면 다음과 같다.

$$\int_R N_i [-\epsilon \nabla^2 \phi - \rho] dR = 0 \quad (2)$$

이를 공간에 대해 이산화하고, 각 요소에서 형상함수를 고려하면 다음과 같이 정리된다.

$$\sum_j \int_{K_j} [\epsilon \phi (\nabla N_i \cdot \nabla N_j) - \rho] dR = 0 \quad (3)$$

(3)식을 모든 요소에 대하여 계산한 후 조립하면 다음과 같은 선형연립방정식을 구할 수 있다. [2]

$$K\phi = F \quad (4)$$

위의 행렬 방정식을 풀어 각 점에서의 전위를 구하고 이를 미분하여 전장을 구한다. 계산된 전장으로 입자가 받는 힘을 계산하고 운동방정식을 풀어 새로운 위치와 속도를 구한다. 그리고 각 요소의 새로운 전하밀도를 구해 다시 위 과정을 반복한다. 여기서, K 는 요소 상호 간의 기하학적인 관계에 따라 정해진다. 본 시뮬레이션에서는 계산과정 중 해석모델을 새로이 이산화하거나 형상에 변화를 주지 않으므로

K 는 변하지 않으며 새로 계산된 전하밀도에 의해 구동함 F 만 바뀐다. 이러한 경우에 LU분해법을 사용하면 계산능률을 향상시킬 수 있다. 즉, 초기에 K 를 LU분해 놓고, 매번 구동함만 새로 만들어 후퇴대입과 전진소거 과정만 반복하면 된다.[3]

2.2 입자의 위치 검색방법

등간격 요소를 사용하는 유한차분법에서는 입자의 위치를 요소 사이의 간격으로 나눠주기만 하면 입자가 속한 요소를 쉽게 찾을 수 있다. 반면에, 유한요소법을 사용하는 경우에는 입자가 불규칙한 크기의 요소 사이를 운동하기 때문에 검색에 많은 시간이 요구된다. 이를 개선하기 위해, 본 시뮬레이션에서는 메모리에 저장된 전하의 이전 위치와 새로운 위치에 대한 정보를 이용해 과거에 속해 있던 요소와 그 주변부터 검색하였다.(그림 1) 그리고, 두 위치를 이용하여 검색방향을 결정하였다.

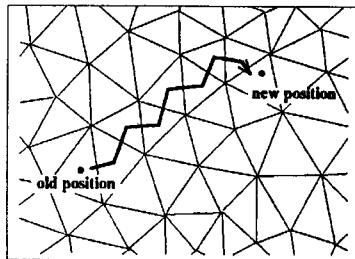


그림 1. 입자의 검색 방법

2.3 몬테-카를로 충돌(MCC)

i 번째 입자가 r_i , 동안 충돌을 일으킬 확률은 다음과 같이 주어진다.

$$P_{\text{collision}, i} = 1 - \exp[-n_{\text{gas}} \sigma_{\text{total}}(\epsilon_i) v_i r_i] \quad (5)$$

여기서, n_{gas} 는 중성가스의 밀도, σ_{total} 은 고려된 충돌의 충돌단면적의 총합, 그리고 ϵ_i 는 입자의 운동에너지를 전자에너지의 단위로 나타낸 것이다. 일반적으로, 충돌을 계산하는 시간간격 τ_f 는 전장을 계산하는 시간 간격과 다른 값을 사용한다. τ_f 을 다음과 같다.

$$\tau_f = -\frac{1}{\Gamma_{\text{tot}}} \ln(1-r) \quad (6)$$

여기서, r 는 0과 1사이의 난수이며, Γ_{tot} 는 총충돌률(total scattering rate)이다. 각각의 충돌률은 다음과 같다.

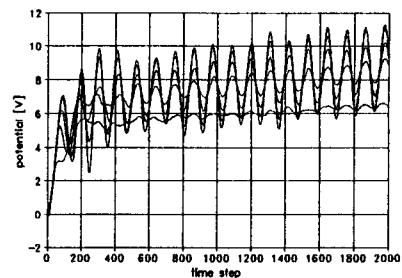
$$v_i(\epsilon) = n_{\text{gas}} \sqrt{\frac{2q_i}{m_i}} \epsilon^{\frac{1}{2}} \sigma_i(\epsilon) \quad (7)$$

0과 1에서 임의의 수를 갖는 난수와 (5)에서 구한 확률을 비교하여 확률이 난수보다 크면 충돌을 일으키는 것으로 판단하고, 어느 충돌이 일어나는지를 결정한다.[4]

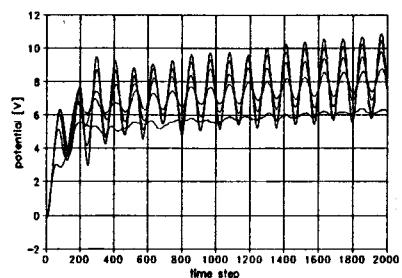
2.3 유한차분법 결과와의 비교

간격이 1cm인 무한 평판 전극 사이에 존재하는 아르곤 플라즈마를 유한차분법과 유한요소법을 사용하여 시뮬레이션하였다. 두 방법 모두 양 전극에 0볼트를 인가했으며, 모델의 대칭성을 고려해 전체의 1/4만 해석하였다. 격자점의 수는 가로변과 세로변 모두 60개씩 3600개이고, 전장과 운동방정식을 푸는 시간 간격은 3.0×10^{-11} 초이다. 초기에 주입해 주는 입자의 수는 전자와 이온 각 40000개 씩이며, 공간적으로는 균일하게, 속도는 맥스웰 분포를 갖도록 하였다. 플라즈마의 고유주파수를 수치적인 계산 결과와 비교하기 위해 충돌과 이차전자방출은 고려하지 않았으며, 초기 플라즈마 밀도는 10^9 cm^{-3} 이다. 그림2와 그림3은 두 방법으로 해석해 관심 있는 몇 개의 점에서의 전압 변화와 입자의 개수 변화를 그린 것이다. 그림2에서 전위가 진동하는 주파수는 초기 밀도에서의 플라즈마 고유진동수 ($T_p = 3.53 \times 10^{-9} (\text{sec})$)와 거의 일치함을 알 수 있다.

아래 그림들을 보면, PIC 플라즈마 시뮬레이션에서 전장과 해석하는 방법으로서 유한요소법이 타당함을 알 수 있다.

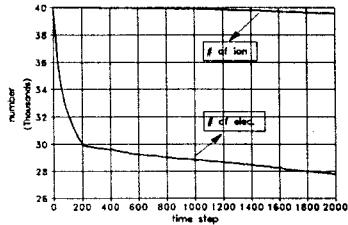


(a) 유한차분법

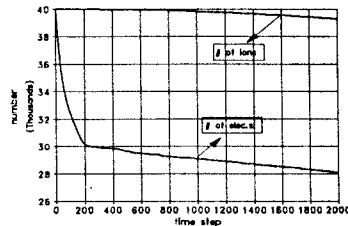


(b) 유한요소법

그림2. 몇 점에서의 전압 변화



(가) 유한차분법



(나) 유한요소법

그림3 입자수의 변화

2.4 유한요소법 적용 예

위에서 그 유용성을 검증한 유한요소법을 사용하여, 등간격 요소로 분할하기 어려운 침대 평판 모델에 적용하여 보았다. 해석모델의 크기의 전체 크기는 $2\text{cm} \times 1\text{cm}$ 이고 대칭성을 고려해 1/2만 해석하였다. 초기에 맥스웰 속도 분포를 갖는 전자를 1000개 주입했으며, 아르곤 이온은 하나도 주입하지 않았다. 침에는 -300 볼트, 아래 평판에는 0 볼트를 인가했다. 고려된 충돌의 종류는 전자의 경우에는 탄성충돌, 여기 충돌, 이온화충돌이며, 이온의 경우에는 탄성충돌, 전하교환 충돌이다.[5] 그리고, 이차전자방출 계수는 0.25이며 전장을 구하는 시간간격은 $5.0 \times 10^{-11}\text{sec}$ 이다.

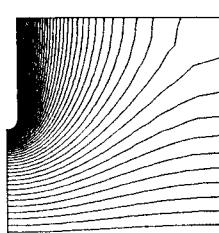


그림 4. 공간전하가 없을 때의 등전위선

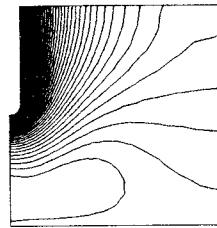


그림 5. $0.2\mu\text{sec}$ 후의 등전위선

그림4는 공간전하를 무시했을 때의 등전위선이며, 그림5는 공간전하를 고려하여 해석하고 $0.2\mu\text{sec}$ 후의 등전위선을 그린 것이다. 두 그림을 비교하여 보면 공간 전하에 의한 전계의 왜곡이 상당함을 알 수 있다.

3. 결론

기존의 PIC 플라즈마 시뮬레이션에서 전장을 해석하는 방법으로 등간격 요소를 이용한 유한차분법을 이용해왔다. 본 논문에서는 이러한 유한차분법이 복잡한 형상에 대해 그 용용이 어려움에 차안, 해석 모델의 모양에 별로 구애받지 않는 유한요소법을 사용하였다. 아울러 불규칙한 요소 사이에서 운동하는 입자의 위치를 쉽게 찾는 방법을 고안하여, 유한요소법을 사용함으로써 늘어나는 계산시간을 줄였다. 두 방법에 의해 시뮬레이션 된 결과를 검토하고 유한차분법과 유한요소법 사이에 차이가 없음을 보였다. 그리고, 등간격 요소를 사용한 유한차분법으로는 해석하기 힘든 침대 평판 전극 사이에서의 방전현상을 시뮬레이션하였다. 그 결과 공간 전하에 의한 전계의 왜곡이 상당하다는 것을 알 수 있었다.

앞으로 고차의 형상함수를 사용하여 전장을 해석한다면 전하의 가중 문제도 쉽게 해석할 수 있을 것이며, 적은 요소 수를 사용하여도 전장을 정확하게 구할 수 있을 것이다.

참고문헌

- [1] C. K. Birdsall and A. B. Langdon, *Plasma Physics Via Computer Simulation*, New York: McGraw-Hill, 1985
- [2] Jianming Jin, *The Finite Element Method in Electromagnetics*, John Wiley & Sons, Inc., 1993.
- [3] Richard L. Burden, J. Douglas Faires, *Numerical Analysis*, Thomson Information/Publishing Group, 1989
- [4] R. W. Hockney and J. W. Eastwood, *Computer Simulation Using Particles*, New York: McGraw-Hill, 1981
- [5] Henry W. Trombley, Fred L. Terry and Michael E. Elta, "A Self-Consistent Particle Model For the Simulation of RF Glow Discharges", *IEEE Trans. Plasma Sci.*, vol. 19, no. 2, pp. 158-162, 1991.