

SYPG 1: Plasma-Technologie-Grid - Perspektiven der Plasmasimulation in der Grid-Infrastruktur

Zeit: Donnerstag 14:00–16:00

Raum: HS C

Hauptvortrag SYPG 1.1 Do 14:00 HS C
Plasma-Technologie-Grid: Serviceplattform für Wissenschaft und Industrie — •THOMAS HARDER¹, ANDREAS SPILLE-KOHOFF², FLORIAN SIGENEGER¹, ANDREAS PFLUG³ und RALF-PETER BRINKMANN⁴ — ¹INP Greifswald, Greifswald — ²CFX Berlin Software GmbH, Berlin — ³Fraunhofer-Institut für Schicht- und Oberflächentechnik IST, Braunschweig — ⁴Ruhr-Universität Bochum, Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik, Bochum

Innerhalb des BMBF geförderten Projektes “Plasma-Technologie-Grid“ (PT-Grid, www.pt-grid.de) wird eine bundesweite Rechnerinfrastruktur für verteiltes Rechnen aufgebaut. Basis der Infrastruktur sind Rechner des D-Grid-Verbundes (www.d-grid.de, www.d-grid-ggmbh.de), die durch kommerziell einsetzbare Ressourcen ergänzt werden. Das Projektziel ist der Aufbau einer Infrastruktur, die für eine nachhaltige kommerzielle und nicht-kommerzielle Nutzung geeignet ist. Das PT-Grid steht nach Projektende allen Instituten und Unternehmen offen, die Simulationsdienstleistungen oder wissenschaftliche Software erstellen, anbieten oder nutzen. Wir stellen Ihnen das D-Grid Umfeld und das PT-Grid Projekt vor und bieten Ihnen die Gelegenheit, mit uns die Vorteile des Systems für Ihre Anwendungen zu erörtern.

Hauptvortrag SYPG 1.2 Do 14:20 HS C
Simulation von Schweißprozessen mit kommerziellen CFD-Lösern in Grid-Umgebungen — •ANDREAS SPILLE-KOHOFF — CFX Berlin Software GmbH, Berlin

Die numerische Simulation des Schweißlichtbogens, also der Strömung und der Verteilung von Temperatur, elektrischem Strom und Gaskonzentrationen unter Berücksichtigung von Strahlung, Lorentzkraft, Entmischung und Fallgebietsvorgängen hat in den letzten Jahren stark zugenommen. Dabei stand bisher die physikalische Komplexität im Vordergrund, während die Geometrie häufig stark vereinfacht wurde. Hierzu wurde die Simulation auf den direkten Lichtbogenbereich mit nur minimaler Umgebung beschränkt und zudem wurde Rotations-symmetrie angenommen, so dass ein zweidimensionales Rechengitter ausreichte. Mit diesen Vereinfachungen kann z.B. ein Wolfram-Inertgas-Schweißprozess auf einem wassergekühlten Kupferblock (als Blindnaht) mit wenigen Stunden Simulationszeit sehr gut abgebildet werden.

Die Realität ist aber komplexer: Der Schweißbrenner steht meist schräg zum Werkstück, das Werkstück besteht aus getrennten Blechen mit Spalt und z.B. beim Überlapp- oder beim T-Stoß ohne Symmetrie, die Schutzgasführung im Brenner ist komplex mit Bohrungen und ggf. Drallerzeugern, bei Tandem- oder Hybridanlagen arbeiten mehrere Schweißsysteme gleichzeitig. Diese geometrische Komplexität führt zu einem vielfach höheren Aufwand an Simulationszeit und Arbeitsspeicher. Weitere Wünsche wie Parametervariationen (“Design of Experiments”), robustes Design (“Six Sigma”) oder automatisierte Optimierung (z.B. der Geometrie) vervielfachen diesen Aufwand noch mal.

Nur durch massive Parallelisierung kann die Bearbeitungszeit in praktikablen Größen gehalten werden. Neben zumeist beschränkten lokalen Ressourcen ist hier die Nutzung von verteilten Rechnernetzen (“Grid-Computing”) für rechenintensive Anwendungen analog zum Cloud-Computing für serviceorientierte Anwendungen eine mögliche Lösung.

Der Vortrag behandelt die Anforderungen, die insbesondere kommerzielle Nutzer an Grid-Lösungen bezüglich Bedienbarkeit, Sicherheit, Zuverlässigkeit, Übertragbarkeit und Nachhaltigkeit stellen, und die Lösungskonzepte, die im Rahmen des PT-Grid-Forschungsprojekts erarbeitet werden. Im Mittelpunkt steht die Nutzung virtueller Maschinen, die eine wohldefinierte und sichere Ausführungsumgebung bieten.

Hauptvortrag SYPG 1.3 Do 14:40 HS C
Anwendung von MHD-Modellen thermischer Plasmen im Plasma-Technologie-Grid — •FLORIAN SIGENEGER, MARGARITA BAEVA, MARKUS BECKER, ANDREAS WEGNER und THOMAS HARDER — INP Greifswald e.V., Felix-Hausdorff-Str. 2, 17489 Greifswald

Die Modellierung thermischer Plasmen gewinnt zunehmend an Bedeutung für die Optimierung plasmatechnischer Anlagen. Derartige Modelle beinhalten in der Regel die selbstkonsistente Lösung der magnetohydrodynamischen Gleichungen, also der Erhaltungsgleichungen von

Teilchen, Impuls und Enthalpie sowie der Maxwell-Gleichungen zur Bestimmung der elektrischen und magnetischen Felder. Die erfolgreiche Durchführung derartiger Rechnungen erfordert selbst bei Verwendung kommerzieller Codes langjährige Erfahrungen.

Das Teilprojekt 2 des Projektes “Plasma-Technologie-Grid“ hat sich daher zum Ziel gesetzt, MHD-Modelle thermischer Plasmen für die Nutzung im Grid so aufzubereiten, dass sie auch ohne tiefgehende Fachkenntnis benutzt werden können. Als Beispiel werden ein Modell zur Beschreibung eines induktiv gekoppelten Plasmabrenners sowie ein Modell eines frei brennenden Lichtbogens vorgestellt. Ein Portal organisiert die Eingabe von Parametern, die Verwaltung von Jobs und Parameter-Variationen sowie die Darstellung und Zusammenfassung der Ergebnisse. Im Vortrag werden die Implementierung der Modelle mit Hilfe kommerzieller Software und eigener Routinen dargestellt, exemplarische Ergebnisse gezeigt, sowie die Steuerung durch das Portal erläutert.

Hauptvortrag SYPG 1.4 Do 15:00 HS C
Parallel Particle-in-Cell Monte-Carlo simulation of rarefied gas flow dynamics and gas discharges — •ANDREAS PFLUG¹, CHRISTOPH SCHWANKE¹, MICHAEL SIEMERS¹, BERND SZYSZKA¹, and JAN NIEMANN² — ¹Fraunhofer Institute for Surface-Engineering and Thin Films IST, Braunschweig, Germany — ²GNS Systems GmbH, Braunschweig, Germany

Low pressure gas discharges are relevant for thin film coating technologies such as magnetron sputtering or plasma enhanced chemical vapour deposition (PECVD). Due to the increasing demand on throughput and precision, the development of improved deposition sources by pure empirical methods becomes more and more elaborate.

In order to increase the efficiency in development new coating technologies, we have developed a parallel Particle-in-Cell Monte-Carlo (PIC-MC) simulation environment suited for description of rarefied gas dynamics and low-pressure gas discharges.

In the course of a BMBF funded project “PT-GRID”, the parallelization and scaling behaviour of this software has been considerably improved, furthermore the software has been prepared for Grid computing.

In the present work we show parallel computations of rarefied gas dynamics and magnetron sputter discharges in Ar/O₂ gas mixtures in comparison with experimental data. The scaling behaviour of different field solver and parallelization concepts tested during development of the PIC-MC simulation environment are shown in comparative benchmarks.

Hauptvortrag SYPG 1.5 Do 15:20 HS C
Gridfähige Anbindung eines Randschichtmodells — •RALF PETER BRINKMANN¹, MOHAMMED SHIHAB¹, ALEXANDER WOLLNY¹, TORBEN HEMKE¹, SHABNAM NAGGARY^{1,2}, WOLFGANG OTTOW² und MICHAEL KLICK³ — ¹Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik, Ruhr-Universität Bochum — ²ESI GmbH — ³Plasmetrex GmbH

Die physikalischen und technologischen Eigenschaften eines HF-Plasmas werden in hohem Maße von der Plasmarandschicht bestimmt. Sie kontrolliert die Einkopplung der elektrischen Energie und bewirkt das Auftreffen energiereicher Teilchen (Ionen und Neutrale) auf die entsprechende Oberfläche. Zur Simulation der Randschicht muss zum einen die innere Dynamik berücksichtigt werden, zum anderen aber auch ihr jeweiliger Betriebszustand, der durch das Plasma als Ganzes bestimmt wird. In dem Teilprojekt 4 des BMBF-Projektes PT-Grid wird das Ziel verfolgt, ein selbstkonsistentes kinetisches Randschichtmodell gridfähig zu machen und an drei unterschiedliche Methoden zur Bestimmung des Betriebszustand des Plasmas anzukoppeln, nämlich an ein globales Modell, an einen kommerziellen Simulationscode (CFD-ACE+, ESI GmbH), sowie an ein Plasmametrologie-system (Hercules[®], Plasmetrex GmbH). Die drei alternativen Methoden erlauben es, grundlegende wissenschaftliche Aussagen zu treffen (Globales Modell), einen Plasmaprozess industrierelevant zu simulieren (CFD-ACE+) oder die durch eine prozessbegleitende Messung gewonnenen Daten (Hercules[®]) zu verwerten. Durch die im PT-Grid angestrebte Portallösung wird somit eine problemangepasste Berechnung der Energieverteilung von Ionen und Neutralen zur Verfügung gestellt.

Hauptvortrag

SYPG 1.6 Do 15:40 HS C

PT-Grid - Science Services Network für die Wissenschaft und den Technologietransfer — •THOMAS HARDER — INP Greifswald e.V., Felix-Hausdorff-Str. 2, 17489 Greifswald

Ausgehend von den Erfahrungen und Ergebnissen des "PT-Grid"-Projektes, das im wesentlichen den Fokus auf der Erstellung industriell anwendbarer Plasmamodelle innerhalb der D-Grid-Infrastruktur hat, erscheint die Erweiterung des Konzeptes zum Aufbau einer Plattform zur Verbesserung wissenschaftlicher Zusammenarbeit sinnvoll. Wie kann man sich das vorstellen? Wissenschaftliche Ergebnisse, in diesem Konzept physikalische Theorien, Meßergebnisse und Modellrechnungen, werden in der Regel publiziert. Vor einer Publikation werden die Ergebnisse geprüft. Die Ergebnisse liegen als Print-Version vor. Für die Printversion wird ein eindeutiger Digital Object Identifier (DOI) vergeben. So ist das Dokument immer eindeutig definiert. Neue Ansätze gehen nun in die Richtung, auch für Programme und Datensätze DOIs zu vergeben. So sind auch DOIs für Boltzmann Solver oder gemessene Querschnitte denkbar. In einer zertifizierten Infrastruktur würde die Prüfung der Daten und Software und die Vergabe von DOIs von einer Gesellschaft organisiert, nennen wir sie "Science-Cert". Neben der wissenschaftlichen Prüfung der Veröffentlichung erfolgt nun parallel auch eine Prüfung des Programms und der Daten. Diese können dann in einer standardisierten Umgebung, nennen wir sie "Science Services Network (SSN)" installiert werden und allen Interessierten zur Verfügung stehen. Das SSN könnte auf der Basis der PT-Grid-Infrastruktur aufgebaut werden. Programme werden über programmspezifische Portlets (Steuerungsoberflächen) als Webapplikation

zur Verfügung gestellt. Die Webapplikationen sind auf instituts- oder universitätseigenen oder anderen Grid-Servern installiert und rechnen entweder auf diesen oder auf anderen Rechnern im Grid, je nach Umfang der Rechnungen und Wunsch des Copyright-Inhabers. Je nach Qualität und Einsatzzweck der Webapplikation wird der Industrie eine Zugriffsmöglichkeit gegeben - dies ermöglicht ggf. Einnahmen im Rahmen des Technologietransfers. Stehen die Programme als Webapplikation mit definierten Datenschnittstellen zur Verfügung, ermöglicht dies anderen Arbeitsgruppen zusätzlich zum Studium der Publikation die Benutzung der Webapplikation mit den Daten des Autors, aber auch mit eigenen Daten. Da die Webapplikation im standardisierten "Science Services Network" läuft, entfällt der Installationsaufwand und durch die Grid-Infrastruktur ist im Rahmen wissenschaftlicher Arbeit ein automatisierter Zugriff auf die D-Grid-Infrastruktur möglich. Im SSN werden auch Serviceprogramme anderer Disziplinen nutzbar gemacht, so können Algorithmen aus der Mathematik zur Reduktion komplexer Reaktionskinetiken und zum "Design of Experiment" oder Programme zur quantenmechanischen Berechnung von Querschnitten zur Verfügung gestellt werden. Mit einem hinreichend geprüften Abrechnungssystem bei kommerzieller Nutzung durch die Industrie kann das SSN zu Einnahmen im Rahmen des Technologietransfers verhelfen. Die Prüfgesellschaft "ScienceCert" würde sich als Organisator verstehen, der die Prüfung der Daten und Programme organisiert und als Handwerker, der bei der Integration in das "Science Services Network" unterstützt und das SSN betreibt. Je nach Status des PT-Grid Projektes möchten wir Beispiele zeigen und Sie ermuntern, das System als Anbieter oder Nutzer zu testen.