

# Numerische Simulation auf Hochleistungsrechnern

## PERSPEKTIVEN FÜR DIE VERFAHRENSTECHNIK

Von Gunther Brenner

In vielen Bereichen der Technik, der Naturwissenschaften und der Wirtschaft werden in zunehmendem Maße Simulationsverfahren eingesetzt, um Prozesse oder Ereignisse gezielter vorhersagen, beeinflussen oder optimieren zu können. Klassische Beispiele aus dem Ingenieurwesen sind die Berechnung von Strömungen um Flugzeuge, mit dem Ziel, aufwendige Windkanalversuche zu verringern, oder Crash- und Fahrdynamiksimulationen als virtuelle Alternative zum realen Elchtest. Das Anwendungsspektrum ist aber weitaus vielfältiger. Der folgende Beitrag gibt einen Überblick über die Möglichkeiten und Arbeitsgebiete der am Institut für Technische Mechanik (ITM) der TU Clausthal eingerichteten Arbeitsgruppe für „Numerische Simulation“ auf dem Gebiet der Kontinuumsmechanik und speziell der Strömungsmechanik.

Die Simulation der eingangs erwähnten Vorgänge aus dem Gebiet der Strömungsmechanik (CFD) und Strukturmechanik (CSM) basiert auf der kontinuumsmechanischen Beschreibung der Bewegung oder Deformation eines Mediums, die sich letztlich durch partielle Differentialgleichungen ausdrücken und lösen lässt. Insbesondere im Bereich der Strömungsmechanik besteht seit jeher ein sehr großer Bedarf an leistungsfähigen Computern und effizienten Algorithmen, um Aufgaben im Bereich der angewandten Forschung oder industriellen Praxis mit ausreichender Genauigkeit und Geschwindigkeit lösen zu können. Durch die rapide Steigerung der Leis-

tungsfähigkeit moderner Rechenanlagen ergeben sich heutzutage Möglichkeiten, die noch vor wenigen Jahren als utopisch angesehen wurden. Es genügt ein Blick auf die zeitliche Entwicklung der Leistung moderner Rechner, wie sie in **Bild 1** skizziert ist, um zu erkennen, dass dieser Trend eine lange Geschichte aufweist. So stellt man fest, dass die Leistungsfähigkeit der so genannten Höchstleistungsrechner, also der weltweit größten und teuersten Rechenanlagen, seit dem Beginn des digitalen Zeitalters konstant um etwa eine Größenordnung in fünf Jahren zunimmt. Diese Steigerung umfasst sowohl die Rechengeschwindigkeit als auch die Größe des Arbeitsspeichers, die inzwischen in TERA-Flops (Billionen Gleitkommaoperationen pro Sekunde) bzw. TERA-Bytes angegeben werden. Möglich geworden sind diese Entwicklungen besonders durch Parallelverarbeitung der Daten neben der reinen Beschleunigung von Taktzyklen. Die Leistungssteigerungen im Bereich der Supercomputer werden auch im „low-end“-Bereich der Arbeitsplatzrechner beobachtet, die heute etwa die Leistung eines „high-end“-Computers vor 15 Jahren erbringen. Somit wird deutlich, dass sich heute auf einem vergleichsweise billigen PC Berechnungen anstellen lassen, für die noch vor wenigen Jahren millionenschwere Investitionen verursachten. Aber auch im Bereich der Software wurden beachtliche Erfolge erzielt. Um das Potential, das darin verborgen ist, zu verdeutlichen, ist in **Bild 2** der Vergleich der Leistungssteigerung durch algorithmische Entwicklungen in den letzten 20 Jahren am Beispiel der Gleichungslöser dargestellt. Diese ist von

vergleichbaren Ausmaßen wie die oben erwähnte Leistungssteigerung der Rechnerhardware. Beiträge zu dieser Entwicklung stammen insbesondere aus dem Bereich der numerischen Mathematik und Informatik. Somit wird deutlich, dass heute hervorragende Bedingungen gegeben sind, um anspruchsvolle Ingenieuraufgaben aus dem Bereich der Strömungsmechanik und angrenzenden Gebieten zu lösen. Im Folgenden werden hierzu einige Beispiele aus dem Gebiet der chemischen bzw. thermischen Verfahrenstechnik vorgestellt.

### Anwendungen in der Verfahrenstechnik

Als Beispiel wird die chemische Gasphasenabscheidung, engl. Chemical Vapour Deposition (CVD), betrachtet, eine häufig eingesetzte Technik zur Herstellung von dünnen kristallinen Schichten auf Festkörpersubstraten und somit ein wichtiger Schritt der Herstellung von Halbleitermaterialien. Das ITM ist hier im Rahmen des DFG- Schwerpunktprogramms SPP 1119 „Anorganische Materialien durch Gasphasensynthese“ mit der Simulation und Modellierung dieser Prozesse betraut. Derzeit werden erhebliche Anstrengungen unternommen, um bestehende ►

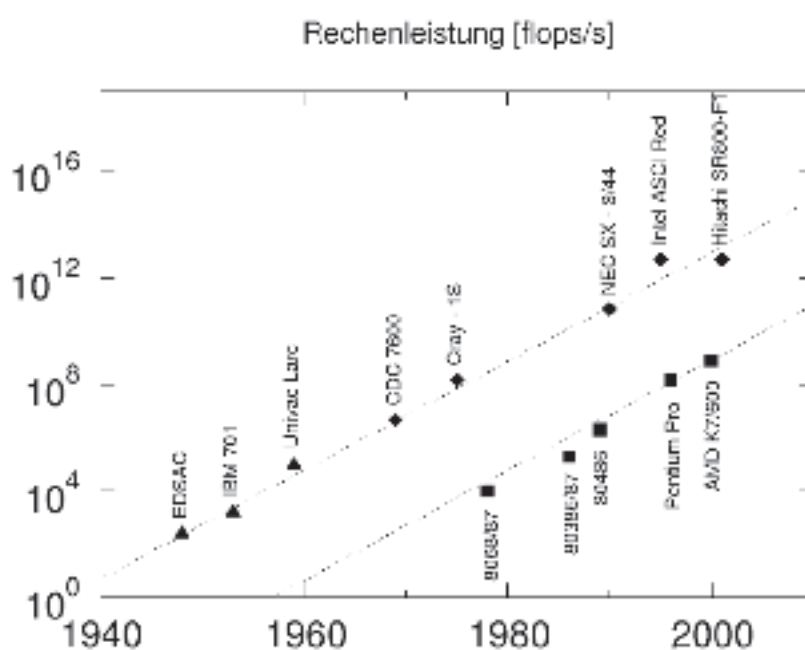
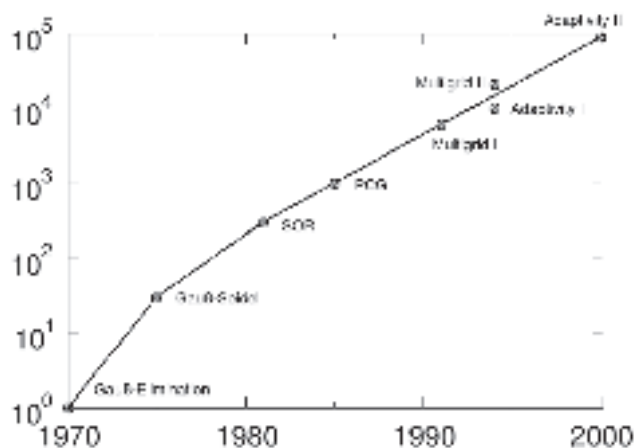


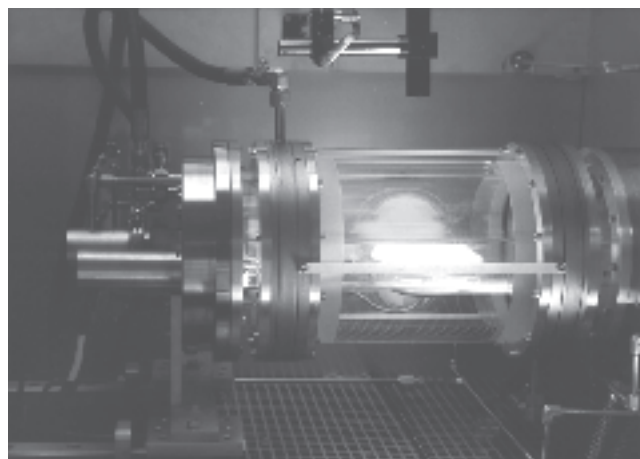
Bild 1: Leistungssteigerung durch Computer



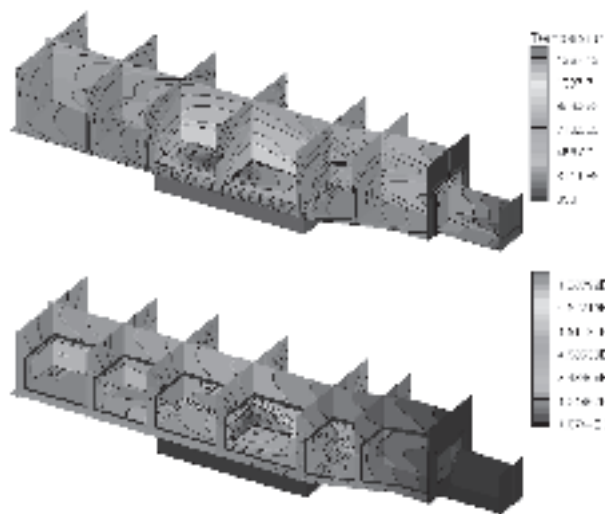
**Bild 2: Leistungssteigerung durch Algorithmen**

CVD-Prozesse zu optimieren oder um Varianten zu erproben, beispielsweise um neue metallorganische Verbindungen abzulagern oder um alternative Precursoren zu verwenden. Dabei wird weitgehend auf „trial and error“-Methoden vertraut, d.h. es werden bestehende Anlagen an sich verändernde Anforderungen angepasst und modifiziert. Der Einsatz von numerischen Simulationen kann in diesem Zusammenhang erheblich zur Optimierung und Verbesserung dieser Prozesse beitragen. Hierzu wird in dem vorliegenden Projekt die Modellierung der Transportvorgänge und der Reaktionen in der Reaktionskammer betrachtet, mit dem Ziel, Wachstumsraten als Funktion von Betriebsparametern der Anlage bestimmen zu können. Die Grundlagen für eine Modellierung der Vorgänge in einer CVD-Anlage sind durch die Erhaltungsgleichungen zur Beschreibung des konvektiven und diffusiven Transports von Masse, Impuls und Energie – die *NAVIER-STOKES*schen Gleichungen – gegeben. Hinzu kommen Modelle zur Beschreibung der Wärmestrahlung, der Thermodiffusion und der chemischen Reaktionen. In diesen Modellen werden eine Vielzahl von zumeist empirischen Parametern benötigt, z.B. zur Beschreibung von chemischen Reaktionsraten oder der Transportkoeffizienten. Das so gewonnene mathematische Modell besteht aus partiellen Differentialgleichungen, die für vorgegebene Randbedingungen approximativ gelöst werden können. Der Einsatz der numerischen Simulation als zuverlässiges Designtool setzt dabei ein sorgfältiges Abwägen aller empirischen Parameter voraus. Darüber hinaus ermöglicht die numerische Reaktorsimulation die Analyse von Sensitivitäten der einzelnen Modellparameter hinsichtlich der Vorhersage der aus ingenieurmäßiger Sicht wichtigen Produktdaten. Aus strömungsmechanischer Sicht wird die Funktion des MOVPE-Reaktors (**Metal Organic Vapour Phase Epitaxy**) durch eine laminare Strömung bei kleinen Reynoldszahlen in Kombination mit einem ausgeprägten Transport von Energie durch Strahlung und Konduktion dominiert. Aufgrund der starken Temperaturschichtungen im Reaktor wird neben der *FICK*schen Diffusion die Thermodiffusion einen erheblichen Beitrag zum Massentransport leisten. Hinzu kommt, dass natürliche Konvektion eine Rolle spielen kann. Das Fluid kann als schwach kompressibles, ideales Gas betrachtet werden. Es kann üblicherweise davon ausgegangen werden, dass die im MOVPE-Prozess vorrangig vorhandenen Gase optisch transparent sind und somit nicht am Wärmetransport durch Strahlung direkt partizipieren. Auf eine ausführliche Darstellung der Modellgleichungen wird an dieser Stelle verzichtet und auf Literaturstellen verwiesen (z.B. *MESIC, BRENNER* 2004).

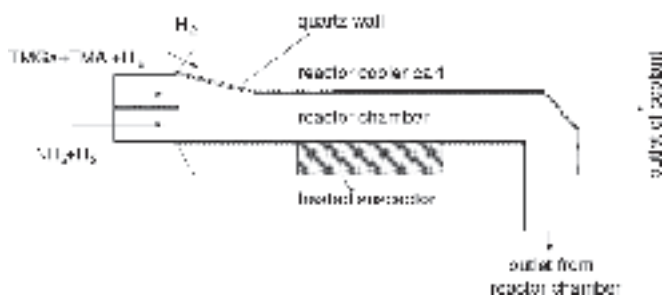
Die **Bild 3** zeigt einen industriellen Reaktor der Firma Aixtron im Betrieb, **Bild 4** eine schematische Darstellung des Funktionsprinzips. Exemplarisch sind in **Bild 5** die Temperaturverteilung und die Spezieskonzentration dargestellt. **Bild 6** zeigt schließlich die berechnete Wachstumsrate auf dem Suszeptor im Vergleich zu experimentellen Ergebnissen.



**Bild 3: Industrieller CVD-Reaktor im Betrieb**

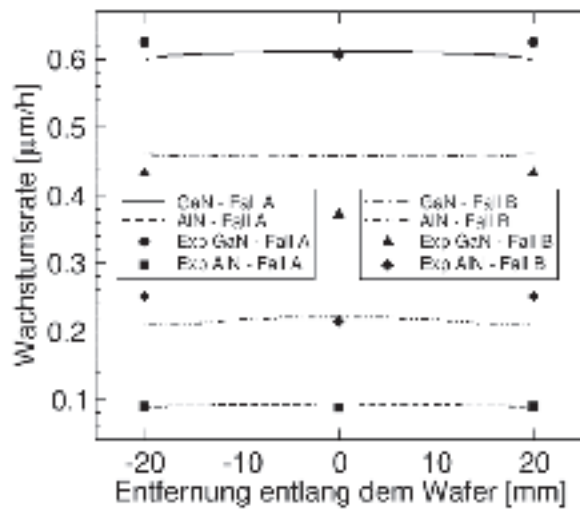


**Bild 5: Temperatur- und Ga-Verteilung im AIX200RF-Reaktor**



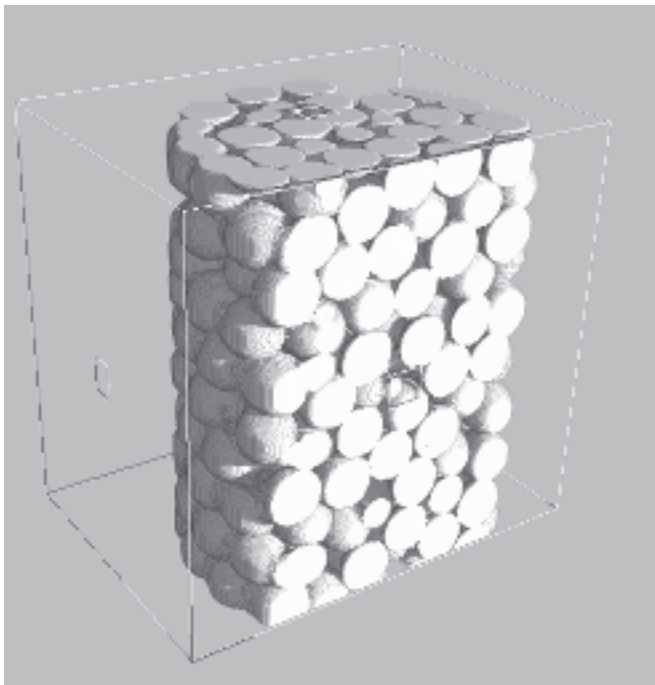
**Bild 4: Aufbau und Funktionsprinzip des AIX200RF-Reaktors**

Die vorgestellten Berechnungen wurden auf Linux-Cluster der AG für Numerische Analysis und Scientific Computing der TUC durchgeführt. Es handelt sich dabei um ein System aus 32 Parallelprozessoren mit insgesamt 64 GByte Speicher.



**Bild 6:** Vergleich zwischen experimentell und numerisch ermittelten Wachstumsraten für GaN und AlN

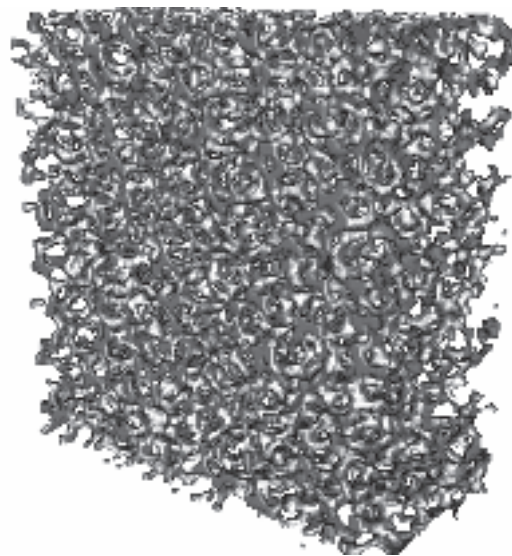
Der hohe Rechen- und Speicheraufwand resultiert bei den vorliegenden Anwendungen aus der Komplexität des Reaktionsmechanismus und der Tatsache, dass für eine zuverlässige Vorhersage der Wachstumsraten eine extrem gute räumliche Auflösung der Berechnungsgitter erforderlich ist. Das numerische Verfahren basiert auf einer Finite-Volumen-Diskretisierung der Transportgleichungen. Das Verfahren ist optimiert für Parallelrechner mit verteiltem oder gemeinsamem Speicher sowie Skalar- oder Vektor-Prozessoren. Durch den parallelen Mehrgitteralgorithmus steht ein effizienter Gleichungslöser zur Verfügung.



**Bild 7a:** Mit CT gerasterte Geometrie eines Kugelhafenreaktors

## Neue numerische Verfahren

Neben diesen klassischen Simulationsverfahren werden am Institut für Technische Mechanik neue Methoden entwickelt und genutzt, die für spezielle Anwendungen in der Verfahrenstechnik von Vorteil sind. Es handelt sich hierbei um die auf dem Prinzip der zellulären Automaten basierenden Lattice-BOLTZMANN-Methoden (LBM), die eine interessante Alternative zu den klassischen Diskretisierungsmethoden im CFD-Bereich (finite Volumen/Elemente) darstellen. Während in den klassischen CFD-Verfahren die NAVIER-STOKESSchen Gleichungen die Basis für eine Diskretisierung darstellen, wird in den LB-Methoden eine Approximation der geschwindigkeitsdiskreten BOLTZMANN-Gleichung vorgenommen. Der resultierende Algorithmus kann sehr effizient auf digitalen Rechnern implementiert werden. Interessant wird der Ansatz insbesondere auch durch die einfache Realisierung der Randbedingungen. Eine ausführliche Darstellung der algorithmischen Details kann der Literatur (z.B. BRENNER 2002) entnommen werden. Es lassen sich auf diesem Wege leicht Lösungen auf Rechengittern mit mehreren Millionen Elementen herstellen. Ein mögliches Einsatzgebiet ist daher z.B. die direkte Simulation von laminaren oder turbulenten Strömungen in komplexen Geometrien, z.B. Kugelhafenreaktoren, oder von porösen Medien als Trägern für Katalysatoren. Um nun eine Berechnung der Strömung und anderer Transportvorgänge in einem derart komplexen Medium realisieren zu können, muss zunächst die exakte Geometrie bestimmt werden. Hier kann man sich der  $\mu$ -Computertomographie als Bildgebungsverfahren bedienen. Auf diesem Wege lassen sich reale Proben des zu untersuchenden Mediums „einscannen“, wobei ein dreidimensionales Bitmap der Struktur mit einer hohen Auflösung generiert wird. In **Bild 7** ist als Beispiel die innere Struktur eines Keramikschams und einer Kugelschüttung dargestellt. Dieses Bitmap dient zugleich zur Definition von Randbedingungen für die Strömungssimulation mit dem Lattice-BOLTZMANN-Verfahren. Die Strömung in der Struktur ist in **Bild 8** anhand von Strombändern angedeutet. Wie im vorangegangenen Beispiel lassen sich auf diesem Wege auch chemische Reaktionen und der Energietransport berücksichtigen, so dass ein effizientes Werkzeug zur Simulation von Strömungen und Reaktionen in hochkomplexen Geometrien zur Verfügung steht. **Bild 9** gibt exemplarisch die Geschwindigkeits- und Konzentrationsverteilung in verschiedenen Schnittebenen durch den Kugelhafenreaktor wieder. Die Berechnungen wurden auf einem Vektor-Parallelrechner durchgeführt. Durch die hohe Effizienz des Verfahrens und die gute Parallelisierung können schnell parametrische Untersuchungen durchgeführt werden.



**Bild 7b:** Mit CT gerasterte Geometrie eines porösen Mediums

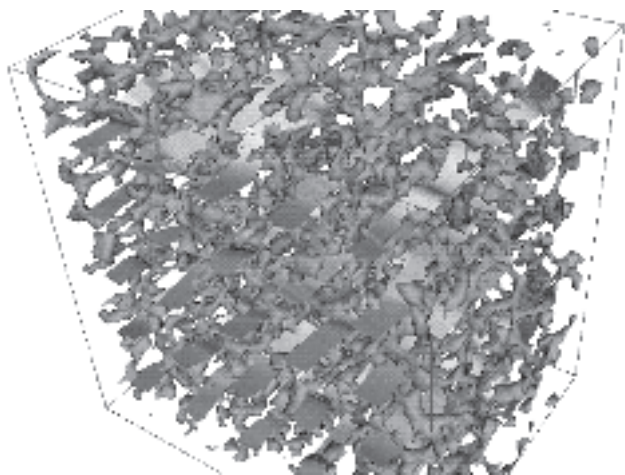


Bild 8: Geschwindigkeitsverteilung im porösen Medium

### Fazit

Mit der zunehmenden Verfügbarkeit von kostengünstigen Digitalrechnern aber auch durch die Möglichkeit des Zugriffs auf eine Reihe von Höchstleistungsrechnern steht derzeit ein breites Spektrum von Computern zur Verfügung, die für numerisch intensive Simulationsaufgaben genutzt werden können. Zusammen mit effizienten Lösungsalgorithmen und in Kombination mit weiteren Techniken (z.B. der Computer-Tomographie) lassen sich so aktuelle Aufgaben aus dem Bereich der chemischen und thermischen Verfahrenstechnik lösen. Zum Einsatz kommen dabei sowohl klassische Simulationsverfahren als auch neuere Ansätze wie die Lattice-BOLTZMANN-Methode. In diesem Zusammenhang wird die Ausbildung von Studenten und Doktoranden in Umgang und Entwicklung der erwähnten Simulationsverfahren als besonders wichtig angesehen. Ein breites Angebot an Vorlesungen und Praktika wird derzeit am ITM, z.T. in Kooperation mit anderen Instituten, angeboten.

Prof. Dr.-Ing. Gunther Brenner  
Institut für Technische Mechanik  
Adolph-Roemer-Straße 2A  
38678 Clausthal-Zellerfeld  
Tel.: 05323/72-2515  
Fax: 05323/72-2203

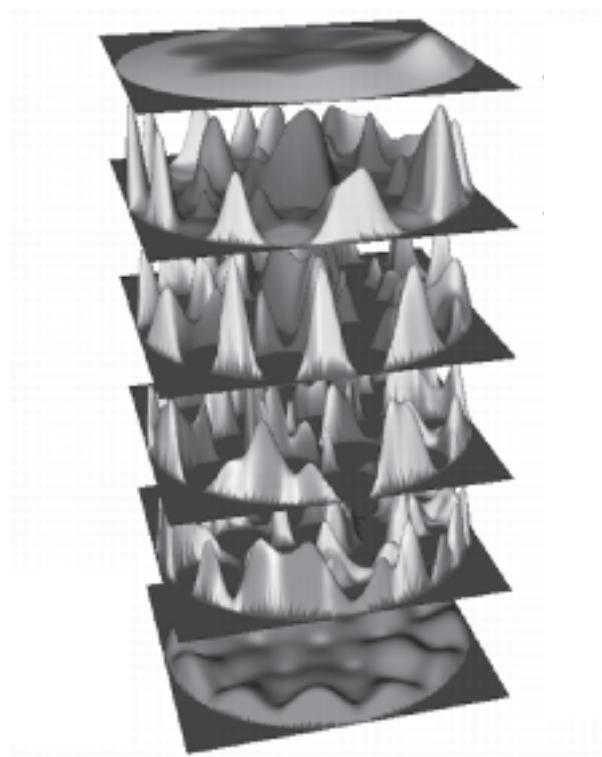


Bild 9: Geschwindigkeits- und Konzentrationsverteilung im Kugelhafenreaktor



**SunChemical**  
Osterode Druckfarben GmbH

Druckfarben für unsere  
bunte Welt!