

# Numerische Simulation technischer Plasmen: Serielle und parallele Programmier Techniken

Philipp Mertmann

Lehrstuhl für Allgemeine Elektrotechnik und Plasmatechnik

Niedertemperaturplasmen stellen ein entscheidendes Werkzeug vieler Produktionsketten der Hochtechnologie dar. Mikro- und Nanoelektronik im Bereich der Computerhardware-Herstellung, Beschichtungen bei der Solarzellen-Produktion oder Funktionsschichten zur Verbesserung von Reibungseigenschaften von Lagern sind nur ein kleiner Auszug aus einer vielfältigen Zahl von Anwendungen. Auch nach vielen Jahren der Forschung werden immer neue Errungenschaften oder Verbesserungen an bestehenden Verfahren erzielt. Dabei steht nicht das Experiment allein im Mittelpunkt, denn zusätzlich zur experimentellen Forschung hat sich die Modellierung und Simulation von Plasmen etabliert.

Innerhalb der Plasmasimulationen gibt es unterschiedliche Herangehensweisen, je nach Effekt, den das entsprechende Modell wiedergeben soll. Kinetische Simulationen können über die Geschwindigkeitsverteilung der simulierten Spezies Auskunft geben, erfordern aber aufgrund ihrer Komplexität oft ein großes Maß an Vereinfachungen. Eine spezielle Art der kinetischen Simulation ist die Particle-In-Cell (PIC) Methode. Sie stellt selbst bei relativ einfachen Voraussetzungen (Argonplasma, moderate Dichten, eindimensionale Betrachtung) enorme Anforderungen an die Rechenleistung, bzw. benötigt viele Zeitschritte bis zu einem periodischen, konvergenten Verhalten. Hochdichte Plasmen, oder eine Ortsauflösung in zwei oder sogar drei Koordinaten führen zu sehr langen Rechenzeiten, bzw. machen die Lösung des Problems durch die PIC Methode unmöglich. Fortschritte in der Geschwindigkeit der Computer-Hardware bzw. der Implementierung verbessern daher in direkter Weise die Möglichkeiten von PIC Simulationen.

Integriert man die kinetische Gleichung mit unterschiedlichen Gewichtungen (Momentenbildung) erhält man eine Fluidbeschreibung des Plasmas. Die Fluidgleichungen des Plasmas unterscheiden sich nicht von den "klassischen" Fluidgleichungen, etwa aus der Strömungsmechanik, allerdings muss durch die elektrische Ladung der Teilchen die Kräftebilanz um Coulomb- und Lorentzkraft erweitert werden. Für bestimmte Probleme kann diese Art der Gleichungen deutlich schneller zu den gesuchten Ergebnissen führen, zum Beispiel dann, wenn schon mit nur wenigen Momenten die Physik hinreichend gut beschrieben wird.

Eine weitere Simulationsmethode sind reine Monte-Carlo Simulationen, wie sie auch in anderen Bereichen der Wissenschaft Anwendung finden. Dabei wird ein physikalischer Zusammenhang durch Wahrscheinlichkeiten einzelner Ereignisse dargestellt. Durch das vielfache Nachvollziehen von Trajektorien oder häufige Wiederholen von Ereignisketten kann die relative Häufigkeit der Ergebnisse statistisch ausgewertet werden.

Ein aktueller Ansatz zur Lösung numerischer Problemstellungen ist das Rechnen auf Grafikkarten ("GPU - Computing", GPU = Graphics Processing Unit). Grafikprozessoren dienen dabei als preiswerte Parallelrechner, die außer in der herkömmlichen Weise in klassischen Rechnern (Personal Computer) auch in Servern zu großen Rechenclustern zusammengeführt werden können. Zur Zeit befinden sich bereits zwei GPU-Rechencluster in der Liste der zehn schnellsten Supercomputer weltweit, weitere werden in Kürze folgen. Voraussetzung für einen gewinnbringenden Einsatz dieser neuartigen Technologie ist, dass das jeweilige Problem möglichst komplett parallelisierbar ist, da serielle Algorithmen von der GPU nicht effizient gelöst werden können.