



ORCAN und Entwife: Kopplung für ausgewählte Probleme der Kristallzüchtung

Institut für Kristallzüchtung im Forschungsverbund Berlin e.V.

Max-Born-Str. 2, 12489 Berlin

<http://numerik.ikz-berlin.de>



Gliederung

1. Einleitung
 - Modellierung und Software im IKZ
 - Motivation
2. ORCAN und Entwife
 - Entwife-Struktur
 - Realisierungsstand
3. Ausblick und Zusammenfassung



Modellierung und Software im IKZ / I

- ▶ konstruktionsbegleitende Modellierung
 - Bewertung des Einflusses konstruktiver Änderungen
- ▶ Technologie-orientierte Modellierung von Züchtungsprozessen
 - Aussagen zur Prozessführung
- ▶ grundlagenorientierte Aufgabenstellungen
 - Untersuchungen zur Wachstumskinetik
 - Weiterentwicklung numerischer Verfahren

Modellierung und Software im IKZ / II





ENTWIFE / I

Pro:

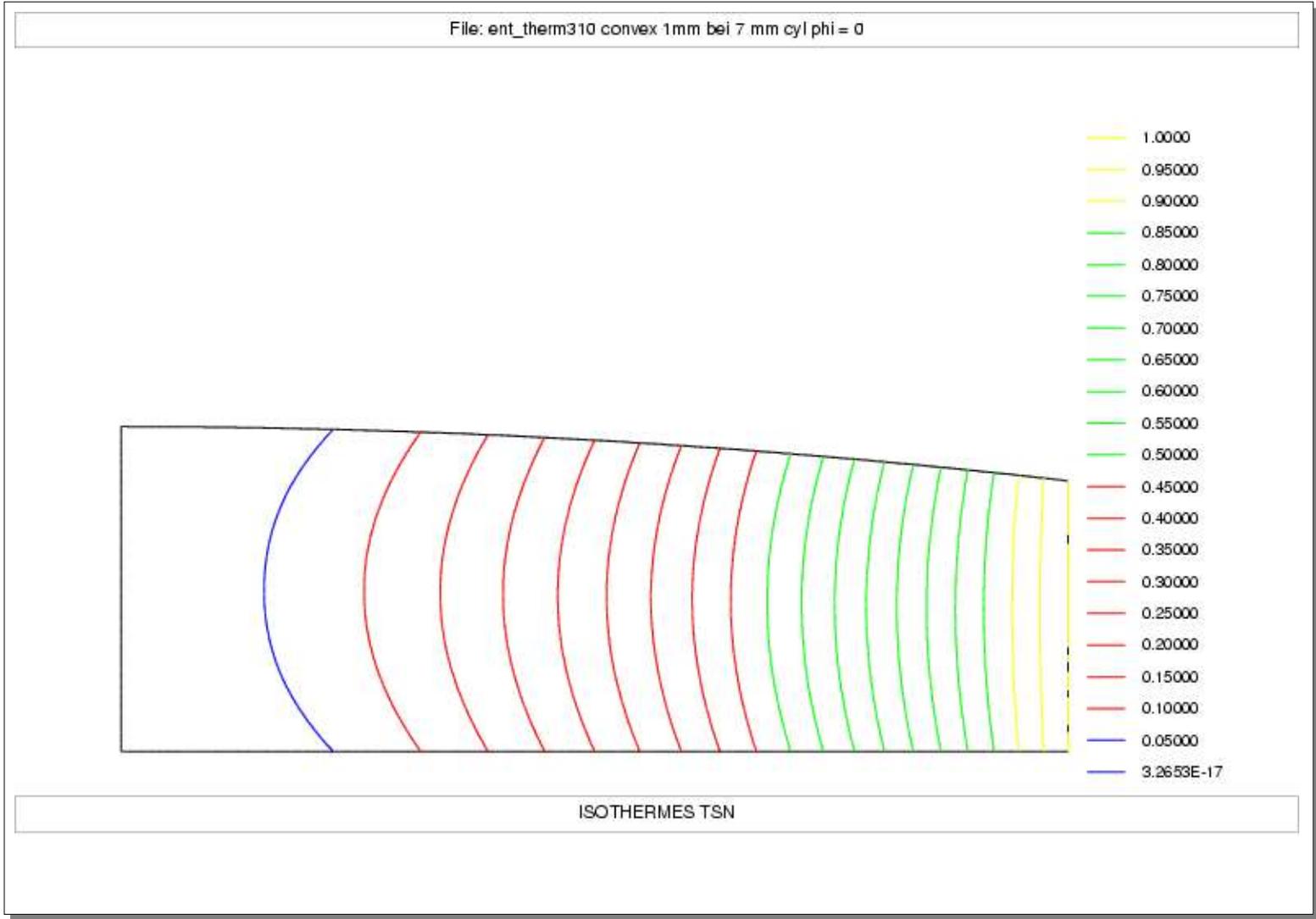
- ▶ allgemeiner FEM-Löser für Gleichungen bis 2. Grades
 - schwache Form der Gleichungen erforderlich
- ▶ modulare Struktur
- ▶ im Quellcode verfügbar (Fortran)
 - Code-Generierung mit ENTCODE (Mathematica-Kern)
- ▶ geeignet für HPC-Cluster und SMP-Computer

Con:

- ▶ umfangreiches numerisches Wissen erforderlich
 - schwache Form der Gleichungen erforderlich
 - dabei: u.U. partielle Integration notwendig
- ▶ kein Nutzerinterface
- ▶ einfache Gittergeneratoren
- ▶ kein interaktives Postprocessing



ENTWIFE / II





ENTWIFE / III

```
>> OUTPUT DATA
```

```
/*      >> PRINT GLOBAL FREEDOMS          */
      >> SAVE MODEL
      >> SAVE GLOBAL FREEDOMS
      >> SET PLOT OPTIONS
      NO FOOTER
      HEADING  'File: ent_therm310 convex 1mm bei 7 mm cyl phi = 0'
/*-----*/
      COORDINATE SCALE FACTORS    1.0 1.0 1.0
      GRID COLOUR      'BLACK'
      CAPTION COLOUR   'BLACK'
      HEADING COLOUR   'BLACK'
      BOUNDARY COLOUR  'BLACK'
      LINE THICKNESS    0.3
```

...

```
>> PLOT CONTOURS
      CAPTION  'ISOTHERMES TSN'
      VARIABLE 'TSN'
      COLOURS  +
      'BLUE' 'BLUE' +
      'RED'  'RED'  'RED'  'RED'  'RED'  'RED'  'RED'  'RED'  'RED' +
      'GREEN' 'GREEN' 'GREEN' 'GREEN' 'GREEN' 'GREEN' 'GREEN' 'GREEN' 'GREEN' +
      'YELLOW' 'YELLOW' 'YELLOW'
      NUMBER OF CONTOURS  21
```



Realisierung / I

Entwicklungsziel(e)

1. Entwife als ORCAN-Modul:

- Nutzung der ORCAN-Infrastruktur als intelligente Oberfläche für Entwife
- das numerische Problem wird für den Anwender „vorkonfektioniert“
- Erfassung aller änderungsfähigen Parameter über das GUI
- Kommunikation ORCAN \longleftrightarrow Entwife über einen Wrapper
- Verwendung des ORCAN Postprocessings

2. Nutzung verfügbarer ORCAN-Module für die Entwife-Erweiterung

- Gittergeneratoren
- Viewfaktorenberechnung



Realisierung / II

Aufgaben des Entwife-Wrappers (Perl / C++):

1. Bau des INPUT-Files mit den GUI-Parametern
2. Start des Entwife-Jobs, ggf. über LAN im HPC-Cluster / SMP-System
3. Erzeugung einer ORCAN-kompatiblen Datenstruktur

Datenformate:

- ▶ Input- und Ergebnisdatei liegen im ASCII-Format vor
 - Input-File: strukturierte Beschreibungssprache TGIN
 - Datenaustauschfile: GMV-ähnliches Format



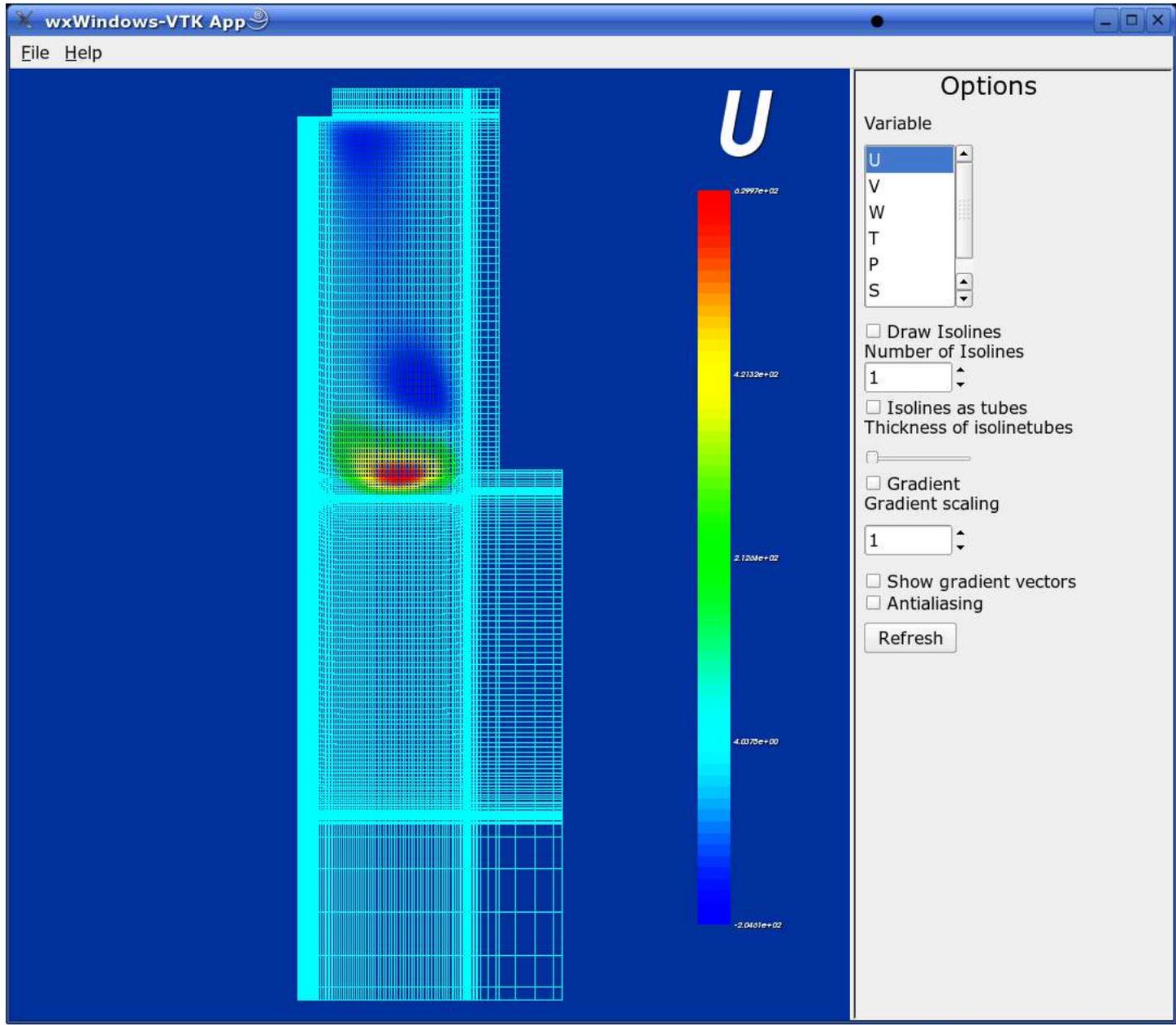
Datenaustausch / I

```

1 beginikz
2 nodes      27
3   0.0000E+00  0.0000E+00  0.0000E+00
4   0.0000E+00  0.5000E+00  0.0000E+00
5   ...
6   0.3000E+01  0.5000E+00  0.0000E+00
7   0.3000E+01  0.1000E+01  0.0000E+00
8 elements   3
9 Q984      9
10  1       7       9       3       4       8       6       2       5
11 Q9/4     9
12 10      16      18      12      13      17      15      11      14
13 Q8/4     8
14 19      25      27      21      22      26      24      20
15 variables 3
16 element type Q8/4
17 variables U  U  P
18 interpolation type      1  1  2
19 element type Q984
20 variables U  U  P
21 interpolation type      1  2  3
22 element type Q9/4
23 variables U  U  P
24 interpolation type      1  1  2
25 begin variable U
26   1   0  1.00000000E+00
27   2   0  1.00000000E+00
28   ...
29  26   0  1.00000000E+00
30  27   0  1.00000000E+00
31 end variable U
32 begin variable U
33   1   0  2.00000000E+00
34   2   0  2.00000000E+00
35   ...
36  26   0  2.00000000E+00
37  27   0  2.00000000E+00
38 end variable U
39 begin variable P
40   1   0  3.00000000E+00
41   3   0  3.00000000E+00
42   ...
43  25   0  3.00000000E+00
44  27   0  3.00000000E+00
45 end variable P
46 endikz
    
```



Datenaustausch / II



© 2005 IKZ Berlin

Dateneingabe

```

1 /* /work10/kb/entcode/ent_therm310/source/ent_therm310.f */
2 /*-----*/
3 /* PARALLEL RESOURCES */
4 /* PROCESSORS 2 */
5
6 /* SPACE ALLOCATION */
7 /* REAL WORKSPACE 25000000 */
8 /* INTEGER WORKSPACE 8000000 */
9
10 /* SOURCE FILES */
11 /* /nfs/n16/data2/kb/entcode/ent_therm310/source/ent_therm310.f */
12 /* thdfaxm.f */
13 /* dlgrby.f */
14 /* gptdat.f */
15 /* COMPILED FILES */
16 /* /nfs/n14/special4/mpi/mpich-1.2.4/src/fortran/src/abortf.o */
17
18 /* LIBRARY FILES */
19 /* /nfs/n14/special2/entwifed/r7.2_mpi_M4.3/MPI_4.3/par.a */
20
21 /* INLINE FORTRAN
22 C-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--
23 SUBROUTINE DATOPT(GF,MFREE,MLEVEL,W,NW,IW,NIW)
24 C-----
25 IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
26 COMMON/PARMS/ PUALS(100)
27 4 CONTINUE
28 CALL INITRD(JFLAG,IACT)
29 8 CONTINUE
30 C
31 CALL RDREAL('PI', PUALS(2),JFLAG,IACT)
32 ...
33
34 TITLE 'Curved interface ent_therm310 convex 1mm bei 7mm cyl phi = 0.01745 '
35
36 >> ENTWIFE
37
38 >> SET OPTIONS
39 TWO DIMENSIONS
40 CYLINDRICAL GEOMETRY
41 ...
42 >> SET VARIABLES
43 VARIABLE NAMES 'TOO' 'TCN' 'TSN' 'TT'
44
45 >> SET INTERPOLATION TYPES
46 ELEMENT NAME 'Q9/4'
47 BASIS FUNCTION TYPES 1
48
49 /*----- S T A R T I N P U T -----*/
50 #CALC
51 NZ = 5;
52 NR = 15;
53
54 R0 = 0.00000001;

```



Ausblick

- ▶ Integration des Entwife-Wrappers in ORCAN
- ▶ Integration des Datenfilters in einen VolMeshReader
- ▶ Abschluss der Entwife-Integration in ORCAN

Zusammenfassung

- ▶ leistungsfähiges Framework mit einem modernen Konzept
- ▶ Einarbeitungsaufwand sollte nicht unterschätzt werden



Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit !