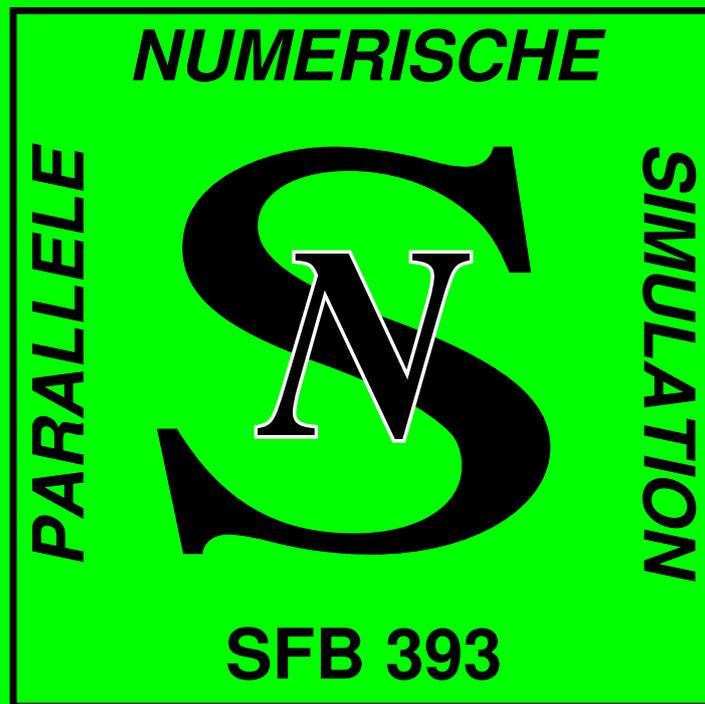




TECHNISCHE UNIVERSITÄT CHEMNITZ

Sonderforschungsbereich 393

Numerische Simulation auf
massiv parallelen Rechnern



ARBEITS- UND ERGEBNISBERICHT 2002 – 2003 – 2004

Deutsche Forschungsgemeinschaft
— Sonderforschungsbereiche —

über
Magnifizenz der Technischen Universität Chemnitz

Bezeichnung des Sonderforschungsbereichs:

Numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern
Parallele Numerische Simulation für Physik und Kontinuumsmechanik

Sprecherhochschule: Technische Universität Chemnitz

Sprecher:

Prof. Dr. Arnd Meyer
Numerische Analysis
Fakultät für Mathematik
TU Chemnitz
D-09107 Chemnitz
Tel. 0371/531/2659

Sekretariat:

Fakultät für Mathematik
Numerische Analysis
TU Chemnitz
D-09107 Chemnitz
Tel.: 0371/531/2659
Fax: 0371/531/2657

WWW-Homepage: <http://www.tu-chemnitz.de/sfb393>

Chemnitz, den 30. April 2004

(Prof. Dr. rer. nat. habil. Arnd Meyer)
– Sprecher des SFB 393 –

Chemnitz, den 30. April 2004

(Prof. Dr.-Ing. habil. Klaus-Jürgen Matthes)
– Rektor der TU Chemnitz –



TECHNISCHE UNIVERSITÄT
CHEMNITZ



Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|--|------------|
| 1 | Allgemeiner Teil/Zusammenfassung | 5 |
| 1.1 | Wissenschaftliche Entwicklung des Sonderforschungsbereichs | 7 |
| 1.2 | Entwicklung der Kooperation im Sonderforschungsbereich | 9 |
| 1.3 | Stellung innerhalb der Hochschule | 9 |
| 1.4 | Förderung der Lehre und des wissenschaftlichen Nachwuchses | 10 |
| 2 | Projektbereiche | 11 |
| | Projektbereich A | |
| | A3 - Parallele, adaptive Löser | 17 |
| | A7 - Wavelets für Randintegraloperatoren | 45 |
| | A11 - Gemischte FE-Methoden | 63 |
| | A12 - FEM vom Nitsche-Typ | 77 |
| | A13 - Randkonzentrierte Finite-Elemente-Methoden | 107 |
| | A14 - Feinstruktur im Bernoulli–Anderson–Modell | 119 |
| | Projektbereich B | |
| | B8 - Parallelisierung irregulärer numerischer Algorithmen | 131 |
| | Projektbereich C | |
| | C1 - Lokalisierung elektronischer Zustände in amorphen Materialien | 149 |
| | C3 - Relaxation komplexer Systeme | 165 |
| | C7 - Bandstrukturprogramm für Amorphisierungsphänomene an Grenzflächen | 187 |
| | C8 - Langzeitverhalten großer dynamischer Systeme | 199 |
| | Projektbereich D | |
| | D1 - Simulation elastisch-plastischer Deformationen | 221 |
| | D2 - Algorithmen für phasengekoppelte, disperse Mehrphasenströmungen | 261 |
| | D5 - Kumulantenmethode | 273 |
| 3 | Gesamtdokumentation der Aktivitäten | 289 |
| 3.1 | Aktivitätenliste | 291 |
| 3.1.1 | Seminare, Vorträge und Präsentationen in Chemnitz | 291 |
| 3.1.2 | Übersicht über Workshops und Tagungen | 304 |
| 3.1.3 | Gästeprogramm, wissenschaftliche Kontakte | 305 |

| | | |
|-------|--|-----|
| 3.1.4 | Qualifikationen | 324 |
| 3.2 | Übersicht über die Veröffentlichungen | 327 |
| 3.2.1 | Referierte Literatur | 327 |
| 3.2.2 | Beiträge in Proceedings; Sonstige Veröffentlichungen | 336 |
| 3.2.3 | Preprintreihe des SFB 393 | 341 |
| 3.2.4 | Beiträge im Internet | 346 |

KAPITEL 1

Allgemeiner Teil/Zusammenfassung

1.1 Wissenschaftliche Entwicklung des Sonderforschungsbereichs

In der dritten Arbeitsperiode des SFB 393 wurden die Grundlagenuntersuchungen und Experimentalrealisierungen

- für die numerischen Grundprobleme bei moderner FEM und BEM und ihre schnellen Löser (Projektbereich A);
- zur Parallelisierung typischer Anwendungen (Projektbereich B);
- für die Anwendung auf numerische Simulationen der Physik (in Projektbereich C) sowie
- für die Simulation kontinuumsmechanischer Fragestellungen (in Projektbereich D)

erfolgreich weitergeführt.

Dies betrifft zum einen disziplinäre Ergebnisse in den einzelnen Teilprojekten, zum anderen sind die meisten Forschungsleistungen im SFB 393 durch das interdisziplinäre Zusammenwirken von Wissenschaftlern aus mehreren Fakultäten gekennzeichnet oder wurden durch die Diskussionen im SFB–Seminar besonders befruchtet, was im folgenden Abschnitt genauer ausgeführt wird.

Im Projektbereich A wurden hauptsächlich

- adaptive Finite Elemente Techniken in ihrer Gesamtheit untersucht, einschließlich
 - neue Datenstrukturen z.B. zur Vergrößerung,
 - anisotrope Fehlerschätzer/Netzsteuerungen,
 - 2D–Implementierung für weitere Anwendungsklassen wie Kontakt mit variablen Hindernissen, Rissfortschritt, gemischte Probleme
 - parallele 3D–Implementierung mit Rebalancing.
- Wavelet–Galerkinverfahren für Integralgleichungen auf komplexen Oberflächen entwickelt, mit biorthogonalen Waveletbasen für stückweise glatte und Waveletkonstruktionen nach Tausch/White für stückweise linear approximierten Oberflächen.
- mit numerischen und analytischen Methoden die Resonanzen in der Eigenwertstatistik zufälliger Matrizen mit singulärer Verteilung untersucht.

Im Projektbereich B wurde

- die adaptive 3D–FEM durch Schaffung einer „communication engine“ in eine moderne Parallelvariante für beliebige Clustersysteme und Rebalancierungstechniken erhoben.

Im Projektbereich C wurden

- elektrische und thermische Transporteigenschaften stark ungeordneter, quantenmechanischer Systeme mittels numerischer Verfahren untersucht, wobei der Einfluss von Magnetfeld, Vielteilchenwechselwirkung, Potentialkorrelation und endlicher Phasenkohärenzlänge an einem Metall-Isolator-Übergang (MIÜ) im Mittelpunkt standen,
- Relaxationmechanismen in komplexen Systemen effizient simuliert und analysiert, wobei einerseits das Überwinden von energetischen Barrieren und zum anderen die Konnektivität im Zustandsraum zu einer Reihe interessanter Effekte, wie z.B. den Alterungsphänomenen führte,
- die komplexe Strukturbildung an Grenzflächen zwischen Silizium und frühen Übergangsmetallen einschließlich amorpher Modifikationen untersucht, wobei zur Berechnung elektronischer Bandstrukturen parallelisierte Programme unter Verwendung einer gemischten Basis aus ebenen Wellen und lokalisierten Funktionen zum Einsatz kamen,
- für nichtlineare dynamische Systeme mit vielen Freiheitsgraden die Aufdeckung der Zusammenhänge zwischen charakteristischen Größen der nichtlinearen Dynamik, wie z.B. Lyapunovspektren, und makroskopischen Größen, wie z.B. Transportkoeffizienten, durch die Entwicklung von Langzeitalgorithmen vorangetrieben.

Im Projektbereich D

- ist die numerische Simulation nichtlinearer Materialmodelle der Festkörpermechanik auf der Grundlage adaptiver FE-Algorithmen wesentlich effektiver gestaltet worden. Neben der Anpassung von Fehlerschätzern auf komplexe Problemstellungen der Elasto-Plastizität großer Verzerrungen und der Rissbruchmechanik wurden neuartige Strategien zur Übertragung von Feldgrößen bei Netzverfeinerung und Netzvergrößerung realisiert.
- wurde die Praxisrelevanz der entwickelten Software durch die Berücksichtigung des 2D-Kontaktes gegen starre Hindernisse wesentlich erweitert.
- wurde die Simulation von Schädigungsrissen und Rissfortschritt mit adaptiver Lösertechnik durch eine spezielle Netzteilungsstrategie erfolgreich ausgeführt.
- ist die numerische Simulation von dispersen Mehrphasenströmungen (Fluid-Feststoff-Strömungen) mittels paralleler Euler-Lagrange-Verfahren im Wesentlichen zum Abschluss gebracht worden.
- wurden gaskinetisch motivierte Simulationsmethoden mit neu formulierten thermischen Randbedingungen erfolgreich an verschiedenen Problemen aus der kinetischen Theorie und Fluidodynamik getestet und FE-Formulierungen auf die Herleitung der Methoden übertragen.

1.2 Entwicklung der Kooperation im Sonderforschungsbereich

Die interdisziplinäre Zusammenarbeit von Wissenschaftlern verschiedener Fachdisziplinen hat an der TU Chemnitz eine lange Tradition und wurde zu einem Hauptmerkmal des SFB 393.

So sind die meisten Forschungsleistungen im SFB 393 durch das interdisziplinäre Zusammenwirken von Wissenschaftlern aus mehreren Fakultäten gekennzeichnet.

Dies bezieht sich **erstens** auf die gemeinsame Bearbeitung der Teilprojekte in D durch Ingenieure, Naturwissenschaftler und Mathematiker. So wurde die erfolgreiche Simulation von 2-dimensionalen Risswachstum durch die Kombination von adaptiven Finiten Elementen und angepasster hierarchischer Lösertechnik einerseits mit mechanisch relevanten Rissfortschrittskriterien andererseits erreicht. **Zweitens** ergab die Zusammenarbeit der Mathematiker mit den Informatikern (Tp. A3/A11/A12 mit B8) eine neue Parallelrealisierung für effiziente 3D-Finite Elemente Rechnungen mit Adaptivität. **Drittens** war die Zusammenarbeit zwischen Kollegen aus der Physik (Projektbereich C) und der Mathematik besonders in den Teilprojekten A13 und D5 manifestiert. Dies wird sich in der Fortführung neben D5 besonders in weiterer gemeinsamer Projektbearbeitung innerhalb C8 ausdrücken.

1.3 Stellung innerhalb der Hochschule

An der TU Chemnitz werden im Berichtszeitraum vier Sonderforschungsbereiche von der DFG gefördert. Der SFB 393 arbeitet auf dem auch international exponierten Wissenschaftsprofil des „High Performance Computing“, was nicht zuletzt durch großzügige Förderungen in den letzten 20 Jahren einen bedeutenden Aufschwung erlebt hat. Damit ist in Chemnitz ein besonderes Kompetenzzentrum entstanden, was auch zu Kooperationsbeziehungen zu anderen Forschungseinrichtungen Sachsens (TU Dresden, TU-Bergakademie Freiberg, Institut für Troposphärenforschung Leipzig, MPI Leipzig) sowie Deutschlands führte.

Innerhalb der TU Chemnitz zeichnet sich der SFB 393 durch seine Interdisziplinarität besonders aus.

Der SFB 393 kann auf eine gute Unterstützung von Seiten der TU Chemnitz und des Sächsischen Staatsministeriums für seine bisherigen drei Antragsphasen zurückblicken. So war zuletzt der C4-Ruf von Prof. Benner auf die Professur „Mathematik in Industrie und Technik“ mit seiner Bereitschaft zur Integration und Mitarbeit im SFB verknüpft.

Der SFB 393 bedankt sich auch bei der Verwaltung der TU Chemnitz für die zunehmend konstruktive Zusammenarbeit bei Personalfragen und der Drittmittel-Verwaltungshilfe. Eine besondere Rolle spielt der SFB 393 bei der Neukonzipierung eines TU-Parallelrechners, wenn sich für unseren derzeit genutzten CLIC (528 Pentium III + Fast-Ethernet) ein Modernisierungsschub notwendig macht.

Naturgemäß sind die Wissenschaftler des SFB 393 die Hauptnutzer von Parallelrechen-technik, deshalb wurde zur intensiven Vorbereitung dieser Erneuerung die so genannte CHIC-Initiative, eine Arbeitsgruppe aus Mitarbeitern des Universitätsrechenzentrums

und weiteren 23 Professuren der TU Chemnitz (natürlich darunter die des SFB 393) gegründet, die seit Beginn des Jahres 2003 strategische Planungen hierfür leistet. Dabei wurde deutlich, dass die Forschungsrichtung „Numerische Simulation / Hochleistungsrechnen“ aber ebenso „Mathematische Modellbildung“ wie auch andere (nichtnumerische) Simulationen einen überaus großen Anteil an Forschungsleistungen in der TU Chemnitz haben. Deshalb wird dies eine zukünftige Profillinie innerhalb der TU Chemnitz zusätzlich zu den bisher formulierten sein. Dies wird als eine wesentliche Wirkung der Arbeit des SFB 393 auf die gesamte Universität verstanden.

1.4 Förderung der Lehre und des wissenschaftlichen Nachwuchses

Die Untersuchungen im Sonderforschungsbereich beeinflussen naturgemäß die Arbeiten an den beteiligten Fakultäten und Instituten erheblich. Nicht nur die aus den Teilprojekten finanzierten wissenschaftlichen Mitarbeiter, sondern auch die aus anderen Mitteln finanzierten Wissenschaftler nehmen starken Anteil an den Themen und Veranstaltungen des SFB.

Besonderes Gewicht hat die Qualifizierung hauptsächlich von Promovenden innerhalb der durch den SFB zustande gekommenen Forschungsgruppen. So entstanden unmittelbar aus den im SFB mitarbeitenden Arbeitsgruppen im Berichtszeitraum

| | |
|--------------------|--|
| in der Mathematik: | 2 Promotionen und 1 Habilitation, |
| in der Physik: | 4 Promotionen (3 verteidigt, 1 steht vor Abschluss) |
| im Maschinenbau: | 2 Promotionen und 1 Habilitation, |

Der unmittelbare Einfluss auf die Lehre ist vor allem durch die Tätigkeiten der studentischen Hilfskräfte und durch Diplom- und Jahresarbeits Themen gegeben. Besonders konnten die umfangreichen Mittel für studentische Hilfskräfte die Arbeitsgruppen des SFB in die Lage versetzen, Studenten höherer Semester zielgerichtet in die Forschungsarbeit zu integrieren. Die Tätigkeit als studentische Hilfskraft hatte typischerweise stets wissenschaftlichen Charakter, einige konnten nach Erwerb des Disploms für die weiteren Projektarbeiten auf halben Stellen gewonnen werden. Insgesamt haben ständig etwa 15 Studenten im SFB mitgearbeitet (summarisch mehr als 25).

Vorträge von Gastwissenschaftlern aus dem In- und Ausland und Besuche an Institutionen mit ähnlich gelagertem Forschungsprofil führen zu einem erheblichen Zuwachs an Fachinformation, die die Forschung und Lehre der beteiligten Fachbereiche und Institute befruchteten.

KAPITEL 2

Projektbereiche

Projektbereich

A

Mathematische Grundalgorithmen

Teilprojekt

A3

Parallele adaptive Finite-Elemente-Algorithmen und Löser
für symmetrische, positiv definite Probleme

2.1 Teilprojekt A3

Parallele adaptive Finite-Elemente-Algorithmen und Löser für symmetrische, positiv definite Probleme

2.1.1 Antragsteller

PD Dr. Thomas Apel an Professur Numerische Analysis, TU Chemnitz

Doz. Dr. Michael Jung, Institut für Wissenschaftliches Rechnen, TU Dresden

Dr. Gerd Kunert an Professur Wissenschaftliches Rechnen, TU Chemnitz

2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. Sven Beuchler / Professur Numerische Analysis, TU Chemnitz (bis Sept. 2003)

MSc. Sergej Grosman / Professur Numerische Analysis, TU Chemnitz

DM Gunter Winkler / Professur Numerische Analysis, TU Chemnitz (Jan. bis Dez. 2003)

DM Peter Steinhorst / Professur Numerische Analysis, TU Chemnitz (ab Okt.2003)

Prof. Arnd Meyer / Professur Numerische Analysis, TU Chemnitz

Dr. Matthias Pester / Professur Mathematik in Industrie und Technik, TU Chemnitz

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

2.2.1 Adaptive anisotrope Netzsteuerung

Für Aufgaben mit anisotropem Lösungsverhalten wie Kantensingularitäten und Randschichten sind lösungsangepasste Diskretisierungen anisotrop. Die adaptive Steuerung anisotroper Netze, insbesondere die automatische Erkennung von Anisotropierichtungen im Laufe der Rechnung und eine entsprechende Ausrichtung der finiten Elemente ist international noch nicht zufriedenstellend geklärt und war ein Bearbeitungsschwerpunkt im Projekt. Dabei werden solche Strategien verfolgt, die hierarchische anisotrope Netze liefern, so dass Multilevel-Verfahren zur effizienten Lösung der Finite-Elemente-Gleichungssysteme eingesetzt werden können. Wesentliche Fortschritte gibt es aber nicht nur bei der Netzsteuerung, sondern auch bei einem anderen wichtigen Bestandteil adaptiver Verfahren, den *a posteriori* Fehlerschätzern, die für anisotrope Diskretisierungen zunehmend besser verstanden werden.

2.2.2 Auflösungsverfahren bei anistropen Diskretisierungen

Die Entwicklung effizienter Löser für die bei anisotropen Diskretisierungen entstehenden Finite-Elemente-Gleichungssysteme ist ein weiteres Ziel im Projekt.

In einer Reihe von Arbeiten werden Lösungsalgorithmen für anisotrope Differentialgleichungen, zum Beispiel der Gestalt $-a(x, y)u_{xx} - b(x, y)u_{yy} = f$, wobei einer der beiden Koeffizienten a oder b klein ist, diskutiert (siehe z.B. [BZ01, Hac85, KW98, Pfl98]). In diesen Arbeiten wird besonderes Augenmerk auf die Auflösung gelegt, aber es werden nicht der singular gestörte Charakter derartiger Aufgaben und adäquate Diskretisierungen berücksichtigt. Im Teilprojekt sollen schnelle Löser auf der Basis von Multilevel-

Algorithmen entwickelt werden, die bei adaptiven anisotropen Diskretisierungen zum Einsatz kommen.

2.2.3 Auflösungsstrategien für Verfahren höherer Ordnung

In der Antragsperiode 1999–2001 wurde für einen Gebietszerlegungs-Vorkonditionierer für zweidimensionale Randwertaufgaben ein suboptimaler Multigrid-Löser für die Probleme im Inneren der Teilgebiete konstruiert und analysiert. Dieser Vorkonditionierer sollte zusammen mit dem Vorkonditionierer von Korneev [IK95a], [IK95b] für das Schur-Komplement in das Programm *SPC-PM-Po2p* implementiert werden. Dieser Vorkonditionierer sollte auch für Netze bestehend aus Rechteckelementen mit einem starken Streckungsverhältnis ausgetestet und gegebenenfalls modifiziert werden.

Ein weiterer Schwerpunkt bestand darin, das bestehende Programm *SPC-PM-3AdH* auf die Diskretisierung von Randwertproblemen mittels FEM unter Verwendung eines Polynomgrades $p > 2$ zu erweitern und zu parallelisieren.

Für dreidimensionale Probleme war die Entwicklung eines Vorkonditionierers für die Probleme im Inneren der Teilgebiete noch nicht ausreichend geklärt. Diese Fragestellung sollte in einem dritten Schwerpunkt bearbeitet werden.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

2.3.1 Adaptive anisotrope Netzsteuerung

Eine adaptive anisotrope Netzsteuerung erfordert im Laufe der Rechnung ein automatisches Erkennen der Anisotropierichtungen sowie das Anpassen der Elemente entlang dieser Richtungen. Dabei ist es formal und praktisch günstig, die adaptiven Schritte aufzuteilen in die Aspekte *Informationsgewinnung* und *Netzgenerierung/-verfeinerung*.

Bei der **Informationsgewinnung** sucht man diejenigen Informationen, die ein anisotropes Element beschreiben, nämlich *Streckungsrichtungen*, *Streckungsverhältnisse* und *Elementgröße*. Günstigerweise sollten diese Informationen von einem geeigneten anisotropen Fehlerschätzer bereitgestellt werden. Leider gelingt dies im Allgemeinen nur für die letzte Information, die *Elementgröße* (Volumen). Fehlerschätzer nehmen natürlich trotzdem eine zentrale Rolle ein, da sie nicht nur zur Bestimmung einer geeigneten Elementgröße dienen, sondern die Grundlage jeglicher Zuverlässigkeits- und Effizienzbetrachtungen von Diskretisierungsmethoden sind. Obwohl es im Antrag nicht ausdrücklich formuliert wurde, wurden von G. Kunert und S. Grosman entsprechende Vorarbeiten zu anisotropen Fehlerschätzern [Kun99, Kun00a, KV00, Kun00b, Kun01a, Kun01b, Kun01c, Kun01d, Kun02] weitergeführt, wobei unerwartete Resultate erzielt werden konnten.

Die ersten beiden Informationen *Streckungsrichtungen* und *Streckungsverhältnisse* können (bisher) nicht aus Fehlerschätzern extrahiert werden. Der in der Literatur am häufigsten genutzte Ansatz verwendet die Matrix der zweiten Ableitungen, d. h. die Hesse-Matrix der FEM-Lösung [PVMZ87, Sim94, Dol98, D'A99, BD97, CHM95, HDB⁺00, RGK93]. Von G. Kunert wurde gezeigt, dass die auf dieser Basis konstruierten anisotropen Netze auch für die untersuchten Fehlerschätzer geeignet sind [Kun00b].

Nachdem die gewünschten anisotropen Netzinformationen bestimmt wurden, erfolgt die anisotrope **Netzgenerierung/-verfeinerung**. Den meisten anisotropen Methoden liegt

eine lokale anisotrope Transformation zugrunde. Beispielhaft seien hier die Übersichten in [Sim94] oder [BH96] und Arbeiten der Gruppe um Borouchaki/George genannt [BGM97, BGH⁺97, GB98].

Eine andere Gruppe von Methoden umfasst Algorithmen zur *Netzverbesserung* und/oder *Netzverfeinerung*. Netzverbesserung im engeren Sinne wird durch Netzglättung (d. h. Knotenverschiebung) erreicht. Netzverfeinerung geschieht durch Operationen wie das Einfügen/Löschen/Tauschen von *mesh entities* (Netz-Strukturen) wie Knoten, Kanten, Flächen und Elementen, siehe z. B. [Dol98, CHM95, BD97, BH96, FPZ01, SR99].

Die genannten Arbeiten verdeutlichen, dass anisotrope Netzgenerierung/-verfeinerung schon intensiv untersucht wurde, besonders in 2D. In 3D ist die gesamte Problematik erst ansatzweise diskutiert und insbesondere im anisotropen Kontext weniger verstanden. Die von uns angestrebten Beiträge umfassen vor allem folgende Punkte:

- Es sollen die Grundlagen der Fehlerschätzung auf anisotropen Diskretisierungen ausgebaut werden. Dabei ist an weitere Fehlerschätzer (postprocessing basierte Fehlerschätzer nach Zienkiewicz und Zhu, Fehlerschätzer auf der Basis lokaler Neumannprobleme, hierarchische Fehlerschätzer) gedacht.
- Die in der Antragsperiode 1999–2001 begonnenen Untersuchungen über die Hessian-Strategie zur Generierung anisotroper Netze und die Beziehung zur anisotropen Fehlerschätzung [Kun00c] sollen ausgebaut und vertieft werden.
- Es sollen Algorithmen zur Erkennung von Anisotropierichtungen und zur Generierung anisotrop ausgerichteter Netze entwickelt werden. Um Multilevel-Verfahren einsetzen zu können, sollen hierarchische anisotrope Netze konstruiert werden.
- Alle entwickelten Algorithmen sollten implementiert und getestet werden.
- Der dreidimensionale Fall, der in der Literatur weniger tief bearbeitet ist, soll angegangen werden.

Neuland wird hier vor allem beim dritten genannten Punkt betreten. Vom methodischen Ansatz her sollte das Grobnetz einer anisotropen Netz-Hierarchie entweder mit einem anisotropen Advancing-Front-Algorithmus oder über anisotrope Delaunay-Triangularisierung erfolgen. Die Verfeinerung soll so geschehen, dass die Hierarchie weitgehend erhalten bleibt. Werden bei der Verfeinerung des Netzes neue Knoten eingefügt, so ist eine (kleine) Abweichung vom Mittelpunkt der Vaterknoten erlaubt (z. B. durch Netzglättung). Wenn schon existierende Knoten verschoben werden müssen, um ein hinreichend ausgerichtetes anisotropes Netz zu erhalten, so können auch die vorangehenden Netze modifiziert werden.

2.3.2 Auflösungsverfahren bei anisotropen Diskretisierungen

Als erstes Modellbeispiel für die Konstruktion schneller Löser bei anisotropen Diskretisierungen wird das Randwertproblem $-\varepsilon\Delta u + u = f$ in $\Omega = (0, 1)^2$ und $u = 0$ auf $\partial\Omega$ ($\varepsilon \ll 1$) betrachtet. Bei diesem Beispiel treten Randschichten auf, so dass eine Diskretisierung in Randnähe mittels anisotropen Elementen erfolgen muss. Auf der Basis von Gebietszerlegungsverfahren und Multilevel-Algorithmen wird für dieses Problem ein schneller Löser vorgeschlagen. Die hierbei gewonnenen Erfahrungen werden bei der Konstruktion von Multilevel-Lösern in den adaptiven Algorithmen genutzt.

2.3.3 Auflösungsstrategien für Verfahren höherer Ordnung

Zur Lösung von Finite-Elemente-Gleichungssystemen, die bei der p - bzw. hp -Version entstehen, wurden in der Periode 1999–2001 schnelle Lösungsverfahren entwickelt. Im Berichtszeitraum bestand das Ziel darin, diese schnellen Löser in das Programm *SPC-PM-Po2p* zu implementieren. Als Modellproblem wurde das Randwertproblem

$$-\Delta u = f \quad \text{in } \Omega, \quad u = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega$$

betrachtet, wobei Ω ein aus Vierecken zusammengesetztes Gebiet ist. Zur Diskretisierung wurden stückweise polynomiale Funktionen p -ten Grades verwendet. Zur Definition der Ansatzfunktionen über jedem Teilgebiet wurden dabei die integrierten Legendre-Polynome genutzt. Nummeriert man die Freiheitsgrade in der Reihenfolge: Freiheitsgrade in den Eckknoten der Vierecke, Freiheitsgrade auf den Kanten der Vierecke, Freiheitsgrade im Inneren der Vierecke, dann hat die FE-Steifigkeitsmatrix K die Blockstruktur

$$\begin{pmatrix} K_V & K_{VE} & K_{VI} \\ K_{EV} & K_E & K_{EI} \\ K_{IV} & K_{IE} & K_I \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

Hierbei steht „V“ für die Eckknoten (vertices), „E“ für die Freiheitsgrade auf den Kanten (edges) und „I“ für die inneren Freiheitsgrade. Zur Definition einer Vorkonditionierungsmatrix wurde in [IK95a] der folgende Weg vorgeschlagen. Zunächst wird die Matrix

$$K_{1,V} = \begin{pmatrix} K_V & 0 \\ 0 & K^{(1)} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad K^{(1)} = \begin{pmatrix} K_E & K_{EI} \\ K_{IE} & K_I \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

betrachtet, für die die Spektraläquivalenzungleichungen

$$\frac{c}{1 + \log p} K_{1,V} \leq K \leq 2K_{1,V} \quad (2.3)$$

gelten. Zur Definition einer Vorkonditionierungsmatrix für die Matrix K muss somit noch ein Vorkonditionierer für $K^{(1)}$ gefunden werden. Den Ausgangspunkt für dessen Definition bildet die Faktorisierung

$$K^{(1)} = \begin{pmatrix} I_E & K_{EI}K_I^{-1} \\ 0 & I_I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_E & 0 \\ 0 & K_I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_E & 0 \\ K_I^{-1}K_{IE} & I_I \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

der Matrix $K^{(1)}$ mit dem Schurkomplement $S_E = K_E - K_{EI}K_I^{-1}K_{IE}$. Zur Konstruktion eines Vorkonditionierers der Matrix $K^{(1)}$ unter Nutzung der obigen Faktorisierung benötigt man einen Vorkonditionierer für das Schurkomplement, einen Fortsetzungsoperator von den Kanten ins Innere der Vierecke und einen Vorkonditionierer für die Matrix K_I .

Die Matrix K_I ist eine Blockdiagonalmatrix. Jeder Block korrespondiert zu einem Element. Daher ist die Diskretisierung von

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f & \text{in } \mathcal{R}_d = (-1, 1)^d \\ u &= 0 & \text{auf } \partial\mathcal{R}_d \end{aligned} \quad (2.5)$$

mit der p -Version der FEM unter Nutzung des einen Elements \mathcal{R}_d das typische Modellproblem für den Löser der Subprobleme in 2D ($d = 2$) und 3D ($d = 3$). Das Randwertproblem (2.5) wird mit der p -Version der FEM diskretisiert. Als Ansatzraum $\mathbb{M}_{p,d}$ wird

$$\mathbb{M}_{p,d} = \{u \in H_0^1(\mathcal{R}_d), u \in \text{span}\{x_1^{i_1} \cdots x_d^{i_d}\}_{i_1, \dots, i_d=0}^p\}$$

gewählt. Dann lautet die Galerkin-Projektion des Problems (2.5) auf $\mathbb{M}_{p,d}$:

Suche $u_p \in \mathbb{M}_{p,d}$, so dass

$$a(u_p, v_p) = \int_{\mathcal{R}_d} \nabla u_p \cdot \nabla v_p = \int_{\mathcal{R}_d} f v_p \quad \forall u_p \in \mathbb{M}_{p,d} \quad (2.6)$$

gilt. Als Basis im Raum $\mathbb{M}_{p,d}$ werden Tensorprodukte der integrierten Legendrepolynome $\hat{L}_i(x)$ eingeführt, siehe [JK97]. Mit $\hat{L}_{i_1, \dots, i_d}(x_1, \dots, x_d) = \hat{L}_{i_1}(x_1) \cdots \hat{L}_{i_d}(x_d)$ gilt nun

$$\mathbb{M}_{p,d} = \text{span} \left\{ \hat{L}_{i_1, \dots, i_d} \right\}_{i_1, \dots, i_d=2}^p.$$

Dann ist (2.6) äquivalent zum Lösen eines linearen Gleichungssystems $K_d \underline{u} = \underline{f}$ mit der Steifigkeitsmatrix

$$K_d = \left[a(\hat{L}_{i_1, \dots, i_d}, \hat{L}_{j_1, \dots, j_d}) \right]_{i_1, \dots, i_d, j_1, \dots, j_d=2}^p.$$

Die Matrix K_d ist dabei eine Blockdiagonalmatrix aus 2^d Blöcken, d.h.

$$K_d = P \text{ blockdiag} [K_{i,d}]_{i=1}^{2^d} P^T, \quad (2.7)$$

wobei P eine bekannte Permutationsmatrix ist. Die Blöcke $K_{i,d}$ sind untereinander spektraläquivalent, d.h. es gilt $K_{i,d} \sim K_{j,d}$ für $i, j = 1, \dots, 2^d$. Damit genügt es, einen effektiven Vorkonditionierer für $K_{1,d}$ zu finden, wobei

$$K_{1,d} = \sum_{j=1}^d \left(\bigotimes_{k=1}^{j-1} F_1 \right) \otimes D_1 \left(\bigotimes_{k=j+1}^d F_1 \right) \quad (2.8)$$

mit

$$F_1 = \begin{pmatrix} 1 & -c_2 & 0 & 0 & \cdots \\ & 1 & -c_4 & \ddots & \\ & & 1 & -c_6 & \ddots \\ \text{SYM} & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -c_{p-2} & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad D_1 = \begin{pmatrix} d_2 & 0 & \cdots \\ 0 & d_4 & \ddots \\ 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix}$$

und den Koeffizienten

$$c_i = \sqrt{\frac{(2i-3)(2i+5)}{(2i-1)(2i+3)}} \quad \text{und} \quad d_i = \frac{(2i-3)(2i+1)}{2},$$

siehe [JK97].

Literaturverzeichnis zu 2.3 (eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

- [Ant01] SFB 393 - Numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern. Finanzierungsantrag 2002–2003–2004, TU Chemnitz, 2001.
- [BD97] G. C. Buscaglia und E. A. Dari. Anisotropic mesh optimization and its application in adaptivity. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 40(22):4119–4136, 1997.
- [BGH⁺97] H. Borouchaki, P. L. George, F. Hecht, P. Laug und E. Saltec. Delaunay mesh generation governed by metric specifications. Part I: Algorithms. *Finite Elem. Anal. Des.*, 25(1–2):61–83, 1997.
- [BGM97] H. Borouchaki, P. L. George und B. Mohammadi. Delaunay mesh generation governed by metric specifications. Part II: Applications. *Finite Elem. Anal. Des.*, 25(1–2):85–109, 1997.
- [BH96] F. J. Bossen und P. S. Heckbert. A pliant method for anisotropic mesh generation. In *Proceedings of the 5th Annual International Meshing Roundtable*, Pittsburgh, PA, 1996. Sandia National Laboratories.
- [BZ01] J. H. Bramble und X. Zhang. Uniform convergence of the multigrid V-cycle for an anisotropic problem. *Math. Comp.*, 70:453–470, 2001.
- [CHM95] M. J. Castro-Díaz, F. Hecht und B. Mohammadi. New progress in anisotropic grid adaption for inviscid and viscous flow simulations. In *Proceedings of the 4th Annual International Meshing Roundtable*, pages 73–85, Albuquerque, NM, 1995. Sandia National Laboratories. Also Report 2671 at INRIA.
- [D’A99] E. D’Azevedo. On optimal bilinear quadrilateral meshes. *Eng. Comput.*, 15(3):219–227, 1999.
- [Dol98] V. Dolejší. Anisotropic mesh adaption for finite volume and finite element methods on triangular meshes. *Computing and Visualisation in Science*, 1:165–178, 1998.
- [FPZ01] L. Formaggia, S. Perotto, and P. Zunino. An anisotropic a-posteriori error estimate for a convection-diffusion problem. *Comput. Vis. Sci.*, 4(2):99–104, 2001.
- [GB98] P.-L. George and H. Borouchaki. *Delaunay triangulation and meshing – Application to finite elements*. Hermes Science Publishing, Paris, 1998.
- [Hac85] W. Hackbusch. *Multi-grid methods and applications*. Springer, Heidelberg, 1985.
- [HDB⁺00] W. G. Habashi, J. Dompierre, Y. Bourgault, D. Ait-Ali-Yahia, M. Fortin und M.-G. Vallet. Anisotropic mesh adaptation: Towards user-independent, mesh-independent and solver-independent CFD solutions: Part I: General principles. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 32:725–744, 2000.
- [IK95a] S. A. Ivanov und V. G. Korneev. On the preconditioning in the domain decomposition technique for the p -version finite element method. Part I. Technical Report SPC 95-35, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, December 1995.
- [IK95b] S. A. Ivanov und V. G. Korneev. On the preconditioning in the domain decomposition technique for the p -version finite element method. Part II. Technical Report SPC 95-36, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, December 1995.

- [JK97] S. Jensen und V. G. Korneev. On domain decomposition preconditioning in the hierarchical p -version of the finite element method. *Comput. Methods. Appl. Mech. Eng.*, 150(1–4):215–238, 1997.
- [KW98] B. N. Khoromskij und G. Wittum. Robust interface reduction for highly anisotropic elliptic equations. In W. Hackbusch und G. Wittum, Hrsg, *Multigrid Methods V, Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, Bd. 3, S. 140–151. Springer, 1998. Proceedings of the Fifth European Multi-Grid Conference held in Stuttgart, Germany, October 1–4, 1996.
- [Kun99] G. Kunert. *A posteriori error estimation for anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes*. Dissertation, TU Chemnitz, 1999. Logos, Berlin, 1999.
- [Kun00a] G. Kunert. An a posteriori residual error estimator for the finite element method on anisotropic tetrahedral meshes. *Numer. Math.*, 86:471–490, 2000.
- [Kun00b] G. Kunert. Anisotropic mesh construction and error estimation in the finite element method. Preprint SFB393/00_01, TU Chemnitz, 2000.
- [Kun00c] G. Kunert. Anisotropic mesh construction and error estimation in the finite element method. Preprint SFB393/00–01, TU Chemnitz, January 2000. Auch: <http://archiv.tu-chemnitz.de/pub/2000/0066/index.html>.
- [Kun01a] G. Kunert. A local problem error estimator for anisotropic tetrahedral finite element meshes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 39:668–689, 2001.
- [Kun01b] G. Kunert. A posteriori L_2 error estimation on anisotropic tetrahedral finite element meshes. *IMA J. Numer. Anal.*, 21:503–523, 2001.
- [Kun01c] G. Kunert. Robust a posteriori error estimation for a singularly perturbed reaction-diffusion equation on anisotropic tetrahedral meshes. *Adv. Comp. Math.*, 15:237–259, 2001.
- [Kun01d] G. Kunert. Robust local problem error estimation for a singularly perturbed problem on anisotropic finite element meshes. *Math. Model. Numer. Anal.*, 35:1079–1109, 2001.
- [Kun02] G. Kunert. A note on the energy norm for a singularly perturbed model problem. *Computing*, 69:265–272, 2002.
- [KV00] G. Kunert und R. Verfürth. Edge residuals dominate a posteriori error estimates for linear finite element methods on anisotropic triangular and tetrahedral meshes. *Numer. Math.*, 86:283–303, 2000.
- [Pfl98] Chr. Pflaum. Fast and robust multilevel algorithms. Habilitationsschrift, Bayerische Julius-Maximilians-Universität Würzburg, 1998.
- [PVMZ87] J. Peraire, M. Vahdati, K. Morgan und O. C. Zienkiewicz. Adaptive remeshing for compressible flow computation. *J. Comp. Phys.*, 72:449–466, 1987.
- [RGK93] W. Rick, H. Greza und W. Koschel. FCT-solution on adapted unstructured meshes for compressible high speed flow computations. In E. H. Hirschel, Hrsg., *Flow simulation with high-performance computers I, Notes on Num. Fluid Mechanics*, Bd. 38, S. 334–438. Vieweg, 1993.

- [Sim94] R. B. Simpson. Anisotropic mesh transformation and optimal error control. *Applied Numerical Mathematics*, 14:183–198, 1994.
- [SR99] T. Skalický und H.-G. Roos. Anisotropic mesh refinement for problems with internal and boundary layers. *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, 46:1933–1953, 1999.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Adaptive anisotrope Netzsteuerung

Anisotrope Fehlerschätzung

Die oben genannten anvisierten Ziele konnten erreicht werden. Wie gewohnt, konnten für eine Reihe von Fehlerschätzern lokale Abschätzungen nach unten gezeigt werden. Die globalen Fehlerabschätzungen nach oben sind alle von der Form

$$\text{Globaler Fehler} \lesssim \text{Alignment Measure} \cdot \text{Fehlerschätzer}$$

Diese Struktur der Fehlerschranke war nach unseren Vorarbeiten zu erwarten, siehe z. B. [Kun99]. Das *Alignment Measure* misst dabei die Ausrichtung des anisotropen Netzes mit der anisotropen Lösung. Für isotrope Netze sowie gut ausgerichtete anisotrope Netze ist das Alignment Measure in der Größenordnung 1 (in numerischen Experimenten $\approx 1.5 \dots 4$). An dieser Stelle soll darauf nicht weiter eingegangen werden; wir verweisen auf [Kun99] für eine ausführliche Diskussion.

Um die Methodik zur Konstruktion und zum Beweis der Eigenschaften anisotroper Fehlerschätzer auf ihre Grenzen zu untersuchen, wurden auch weitere Aufgaben betrachtet. Im Folgenden werden wesentliche Ergebnisse und die entsprechenden Arbeiten benannt.

Fehlerschätzer auf der Basis lokaler Neumannprobleme (*equilibrated residual method*)

Für das singular gestörte Reaktions-Diffusions-Problem

$$-\varepsilon^2 \Delta u + \kappa^2 u = f \quad \text{in } \Omega$$

mit gemischten Randbedingungen wurde in [AB98] für $\varepsilon = 1$ ein Fehlerschätzer vorgestellt, der auf isotropen Netzen zuverlässig und effizient ist, wobei die Konstanten in den Abschätzungen unabhängig vom Störungsparameter κ sind. S. Grosman hat diesen Fehlerschätzer im Kontext anisotroper Netze untersucht [Gro02]. Wesentliche Teilresultate sind:

- Definition eines Fortsetzungsoperators, der die Ergebnisse der Originalarbeit so verschärft, dass anisotrope Elemente verwendet werden können,
- Beweis der Zuverlässigkeit des Fehlerschätzers,
- Analyse der Effizienz des Fehlerschätzers, wobei ein Faktor („lokale Matching-Funktion“) auftritt, der bei stark anisotropen Netzen anwachsen kann,
- ein numerischer Test, der zeigt, dass der Fehlerschätzer den tatsächlichen Fehler wirklich um so stärker überschätzt, je größer das Streckungsverhältnis der Elemente wird,
- eine Analyse der Steifigkeitsmatrizen für die lokalen Probleme, die zeigt, dass die Probleme auf stark anisotropen Netzen schlecht gestellt sind.

S. Grosman ist es dann gelungen, eine Modifikation dieses Fehlerschätzers vorzuschlagen und zu analysieren, der die Mängel des originalen Fehlerschätzers überwindet. Auch hier sollen die wesentlichen Teilresultate aufgezählt werden:

- Analyse der Zuverlässigkeit, wobei ein Faktor („globale Matching-Funktion“) auftritt, der bereits aus den Arbeiten von G. Kunert bekannt ist und kontrolliert werden kann,
- Beweis der Effizienz,
- ein numerischer Test, der zeigt, dass der modifizierte Fehlerschätzer bessere Ergebnisse als der originale Fehlerschätzer liefert,
- eine Analyse der Steifigkeitsmatrizen für die lokalen Probleme, die zeigt, dass diese auf stark anisotropen Netzen bessere Eigenschaften im Vergleich zum originalen Fehlerschätzer haben.

In [AGJM01] wurde dieser Fehlerschätzer mit weiteren Fehlerschätzern verglichen.

Hierarchische Fehlerschätzer Ein beliebter, weil einfacher Fehlerschätzer ist der so genannte hierarchische Fehlerschätzer. Dieser wurde von S. Grosman in [Gro04] analysiert. Zur Beschreibung der wesentlichen Resultate seien folgende Bezeichnungen eingeführt. Sei $V_1 \subset H_0^1(\Omega)$ der Raum der stückweise linearen Finite-Element-Funktionen und $V_2 = V_1 \oplus \tilde{V}_2 \subset H_0^1(\Omega)$ ein angereicherter Raum. Im isotropen Fall wird V_1 gewöhnlich mit den quadratischen Kanten-Blasenfunktionen angereichert, diese sind jedoch hier ungeeignet. Weiterhin seien mit $u_1 \in V_1$ und $u_2 \in V_2$ die Finite-Element-Lösungen bezeichnet.

Wesentliche Teilresultate sind:

- die Definition von gequetschten Blasenfunktionen (squeezed bubbles) zur Anreicherung von V_1 , so dass eine Fehlerreduktionseigenschaft (*error reduction property*, auch *saturation assumption*) erfüllt ist und $u_2 - u_1$ ein Fehlermaß für $u - u_1$ darstellt,
- der Beweis einer verschärften Cauchy-Ungleichung für die Räume V_1 und \tilde{V}_2 , so dass es möglich ist, eine globale Schätzfunktion für den Finite-Element-Fehler in \tilde{V}_2 zu berechnen,
- der Beweis, dass diese global definierte Schätzfunktion durch eine Summe lokal über den Kanten berechenbarer Anteile approximiert werden kann,
- der Beweis der oben genannten Abschätzungen (lokale Abschätzung von unten, globale Abschätzung mit *Alignment Measure* von oben) für einen abgeleiteten lokalen Fehlerschätzer.

In Testrechnungen zeigte sich, dass das *Alignment Measure* notwendigerweise in die Konstante der Fehlerreduktionseigenschaft eingeht: Ist das Netz unangemessen stark anisotrop, dann strebt das *Alignment Measure* gegen Unendlich und die Konstante in der Fehlerreduktionseigenschaft gegen Eins.

Zienkiewicz-Zhu Fehlerschätzung Die so genannten Zienkiewicz-Zhu Fehlerschätzer beruhen auf einem Postprocessing und sind aufgrund ihrer Einfachheit und relativen Robustheit recht beliebt. Die theoretische Analyse für anisotrope Netze war bisher nur ungenügend geklärt. In einer gemeinsamen Arbeit mit S. Nicaise [KN04] wurden etliche theoretische Fortschritte erzielt, so dass ein Zienkiewicz-Zhu Fehlerschätzer für anisotrope Netze formuliert und analysiert werden konnte.

Konvektions-Diffusions-Probleme mit dominanter Konvektion Um die Methodik zur Konstruktion und zum Beweis der Eigenschaften anisotroper Fehlerschätzer auf ihre Grenzen zu untersuchen, wurden auch Konvektions-Diffusions-Probleme mit dominanter Konvektion betrachtet. Es gelang, die bekannten isotropen Fehlerschätzer auf anisotrope Netze zu übertragen [Kun03b]. Dabei stellte sich heraus, dass die Schwierigkeiten ähnlich wie im isotropen Fall liegen. Sie sind daher auch weniger durch die anisotropen Netze bedingt, sondern vor allem durch die zugrunde liegende Differentialgleichung. In gewissen Aspekten besitzt eine anisotrope Diskretisierung sogar Vorteile: z.B. kann man praktisch auf eine Stabilisierung der numerischen Methode verzichten, wenn das anisotrope Netz passend gewählt wird.

Wie von anderen Problemen bekannt und auch hier erwartet, konnten lokale Fehlerschranken nach unten und globale Fehlerschranken nach oben bewiesen werden. Für die Qualität der Fehlerabschätzung ist zum einen eine anisotrope Peclet-Zahl wichtig. Ist diese in der Größenordnung von 1 oder kleiner, so entsprechen sich die obere und untere Fehlerschranke. Andernfalls klafft zwischen beiden Schranken eine Lücke. Dieses Verhalten ist vollkommen analog zum isotropen Vorbild, d.h. nicht der Netz-Anisotropie geschuldet.

Zum anderen hängen die Fehlerschätzer von der Anisotropie des Netzes ab, und zwar genauso wie von anderen Differentialgleichungen gewohnt [Kun03b, Kun99]. Ausgedrückt wird dies über das schon erwähnte *Alignment Measure*. Für eine ausführliche Diskussion verweisen wir deshalb auf die zitierte Literatur.

Stokes Gleichungen In Kooperation mit E. Creuse und S. Nicaise (Valenciennes, Frankreich) konnten eine Reihe von Resultaten für das Stokes-Problem bewiesen werden [CKN03]. Da die Stokes-Gleichungen ausführlich im Teilprojekt A11 besprochen sind, werden hier nur die wesentlichsten Errungenschaften vorgestellt.

- Die Voraussetzungen an die Diskretisierung wurden detailliert untersucht und so wenig restriktiv wie möglich formuliert. Damit sind viele Element-Paare abgedeckt.
- Der 2D-Fall und der komplexere 3D-Fall wurden untersucht.
- Konforme und nichtkonforme Diskretisierungen sind analysiert worden. Der letztere Fall ist wesentlich technischer; betrachtet wurden so genannte Crouzeix-Raviart Elemente.
- Viele Element-Typen wurden behandelt (Dreiecke, Vierecke, Tetraeder, Pentaeder, Hexaeder).
- Fehlerabschätzungen nach oben und unten konnten erreicht werden. Dabei war die Analyse zum Teil wesentlich technischer als von skalaren Gleichungen gewohnt (bedingt u.a. durch die verwendete gemischte Formulierung). Insgesamt sind die Resultate etwas weniger vorteilhaft als z. B. für die Poisson-Gleichung.

Fehlerabschätzungen für Finite-Volumen-Verfahren Für das singular gestörte Reaktions-Diffusions-Problem wurde von G. Kunert, Z. Mghazli und S. Nicaise auch eine Finite-Volumen-Diskretisierung auf anisotropen Gittern analysiert [KMN03]. Ein Residuenfehlerschätzer wurde vorgeschlagen und analysiert, wobei Zuverlässigkeit und Effizienz bewiesen werden konnten.

Generierung adaptiver anisotrope Netze

Einen wichtigen Platz nahmen die Untersuchungen zur effektiven Steuerung der Netzverfeinerungstechniken ein mit dem Ziel, notwendige Anisotropien in der lösungsangepassten Ausrichtung zu erhalten. Die Ergebnisse sollen hier in drei Unterpunkten dargestellt werden:

- theoretische Ergebnisse,
- Implementation und Tests mit Vierecksnetzen,
- Tests mit Dreiecksnetzen.

Theoretische Ergebnisse Wie bereits in Abschnitt 2.3.1 dargelegt wurde, erfordert die adaptive anisotrope Netzsteuerung Informationen über Streckungsrichtungen und Streckungsverhältnisse der Elemente, die oft aus einer Näherung der Hesse-Matrix der Lösung gewonnen werden. G. Kunert ist es in [Kun02] gelungen zu zeigen, dass die so generierten Netze auch eine effiziente und zuverlässige Fehlerabschätzung erlauben. Damit wurde die Berechtigung sowohl der Hessian-Strategie als auch der anisotropen Fehlerschätzer (und der verwendeten Methoden) bestätigt. Für Details verweisen wir auf die Originalarbeit [Kun02].

Obwohl adaptive Strategien international schon seit etwa 25 Jahren entwickelt und benutzt werden, ist ein Konvergenzbeweis für adaptive Strategien erst in den letzten Jahren gelungen [Dör96, MNS00]. Dabei wurden isotrope Vernetzungen zugrunde gelegt. S. Grosman konnte nun den Konvergenzbeweis auf spezielle anisotrope adaptive Strategien übertragen. Von ihm konnte auch gezeigt werden, dass die zugrunde gelegte adaptive Strategie für einzelne Klassen von Funktionen quasi-optimale Netze produziert. Beide Ergebnisse werden in seiner Doktorarbeit enthalten sein, die etwa Ende des Jahres 2004 fertiggestellt sein wird.

Netzsteuerung – Implementation und Tests mit Vierecksnetzen *SPC-PM 2Ad* ist ein im SFB 393 seit langem (weiter-)entwickeltes Finite-Elemente-Programm zur Lösung von zweidimensionalen Reaktions-Diffusions-Aufgaben und linearen Elastizitätsproblemen, siehe auch Abschnitt 2.4.4. Um einfache Hierarchien der Kanten zu erhalten, war seit jeher die Teilung eines Vierecks stets die Halbierung – eine Viertelung entsteht durch Nacheinanderausführen von Halbierungen in 2 Raumrichtungen. Dies kann elegant zur Erzeugung von anisotropen Netzen genutzt werden, indem der Fehlerschätzer / Fehlerindikator nicht nur ein Element zur Verfeinerung (Teilung) markiert, sondern durch zusätzliche Untersuchung festgelegt, ob Kante 1 und 3 oder Kante 2 und 4 zu teilen sind (oder alle vier).

Bevor der von uns verwendete Algorithmus angegeben wird, soll jedoch zunächst die Berechnung einer Näherung des Hessians im lokalen Elementkoordinatensystem erläutert werden, da diese Information zur Teilungsentscheidung benötigt wird, um die markierten Elemente richtungsabhängig zu halbieren. Hierzu wird als Näherung für den Hessian $H(x) = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} \right)$ in einem kleinen Gebiet $\Omega_0 \subset \Omega$ üblicherweise die Matrix

$$H = \int_{\Omega_0} H(x)v(x) d\Omega \quad \Bigg/ \quad \int_{\Omega_0} v(x) d\Omega$$

für eine beliebige Funktion $v(x) \in H^1(\Omega_0)$ vorgeschlagen. Diese ist konstant in Ω_0 . Nach Anwendung des Gaußschen Satzes kann die Approximation der 2. Ableitungen entfallen:

$$H = \left(\int_{\partial\Omega_0} v (\mathbf{n}(\nabla u)^T + \nabla u \mathbf{n}^T) ds - \int_{\Omega_0} \nabla v \nabla u^T + \nabla u \nabla v^T d\Omega \right) / \int_{\Omega_0} v d\Omega .$$

Diese Form wird von verschiedenen Autoren mit unterschiedlicher Wahl von Ω_0 und v benutzt. Für die Approximation von $H(x)$ im Element K entsteht mit $v(x) \equiv 1$ und $\Omega_0 = K$ die einfache Formel

$$H = \int_{\partial K} (\mathbf{n} \nabla u^T + \nabla u \mathbf{n}^T) ds / \text{meas}K ,$$

was mit Trapezregel zur Integration über die 4 Kanten \vec{E}_i einfach berechenbar ist:

$$H_0 = \sum_{i=1}^4 \frac{1}{2|\vec{E}_i|} \vec{E}_i^\perp (g_{\text{anf},i} + g_{\text{end},i})^T, \quad H = \frac{1}{2}(H_0 + H_0^T)$$

mit $g_{\text{anf},i}$ und $g_{\text{end},i}$ den Näherungen für ∇u am Kantenanfangs- und Kantenendknoten, die nach einer üblichen Gradientenmittelung als knotenorientierte Daten vorliegen. Diese Approximation von H entsteht aber zunächst im globalen Koordinatensystem und wird nun noch in ein noch zu definierendes elementorientiertes Koordinatensystem transformiert.

Die Festlegung dieses elementorientierten Koordinatensystems muss stabil erfolgen und andererseits auf die interne Nummerierung der Kanten Rücksicht nehmen. Deshalb sei (gegenüberliegende Kanten werden der Einfachheit halber als gleichorientiert angenommen):

$$q_1 = \frac{\vec{E}_1 + \vec{E}_3}{|\vec{E}_1 + \vec{E}_3|} \quad \text{und} \quad q_2 = q_1^\perp \quad \text{bei } |\vec{E}_1 + \vec{E}_3| > |\vec{E}_2 + \vec{E}_4|$$

andernfalls

$$q_2 = \frac{\vec{E}_2 + \vec{E}_4}{|\vec{E}_2 + \vec{E}_4|} \quad \text{und} \quad q_1 = q_2^\perp .$$

Mit $Q = (q_1 : q_2)$ wird hiernach H durch $Q^T H Q$ ersetzt.

Zur adaptiven anisotropen Netzverfeinerung hat sich folgender Algorithmus bewährt:

1. Auf der Basis der anisotropen Fehlerschätzer werden einige Elemente zur Verfeinerung markiert.
2. Zur Teilungsentscheidung wird eine Näherung des Hessians im lokalen Elementkoordinatensystem berechnet.
3. Teilungsentscheidung:

- Ist $|h_{12}^2|$ groß gegen $|h_{11} \cdot h_{22}|$, dann teile alle Kanten (Element schlecht ausgerichtet)
- sonst: Halbiere so, dass das Streckungsverhältnis $a = |\vec{E}_1 + \vec{E}_3|/|\vec{E}_2 + \vec{E}_4|$ möglichst mit $\sqrt{|h_{11}|/|h_{22}|}$ übereinstimmt.
Mit $\alpha = a^2 \cdot |h_{11}|/|h_{22}|$ wurde

$$\begin{aligned} \alpha > 3 &\implies \text{teile nur } E_1, E_3 \\ \alpha < \frac{1}{3} &\implies \text{teile nur } E_2, E_4 \\ \text{sonst :} &\implies \text{teile alle 4 Kanten} \end{aligned}$$

realisiert.

Diese Vorgehensweise erzeugte nahezu ideale Netzverfeinerungen an Randschichten. Die automatisch erzeugten Anisotropien lagen immer in der problemangepassten richtigen Größe. Dies wird durch die Experimente mit künstlich beschränkter Anisotropie bestätigt, die man in ihrer Gesamtheit auf

<http://www.tu-chemnitz.de/~amey/adaptiv-2D/>

dokumentiert findet.

Es wurde hierzu vorrangig an Viereckselementen die Hessian-Strategie zur Entscheidung über Halbierung der Elemente (mit möglicher Verdoppelung des „aspect ratio“ pro Schritt) untersucht und passend zur adaptiven Datenstruktur implementiert. Analoge Ergebnisse für Dreiecksnetze sind bei weitem schwieriger zu erhalten, weil dazu Knotenverschiebungstechniken oder „Edge-swapping“ zur Zerstörung wichtiger hierarchischer Datenstrukturen führen. Die Experimente mit Viereckselementen zeigen eindrucksvoll, dass bei Randschichten (z. B. singular gestörter Probleme) die anisotropen Netze geradezu notwendig sind, um einen analogen Fehlerverlauf bei Verfeinerung zu erhalten wie bei klassischen Problemen ohne Randschichten. Ebenso haben diese Tests die Effizienz und Robustheit der neuen anisotropen Fehlerschätzer von G. Kunert unter Beweis gestellt.

Netzsteuerung – Tests mit Dreiecksnetzen Bei Dreiecksnetzen ist die beliebige Erhöhung des Streckungsverhältnisses nicht ohne weiteres möglich. Bei ‘roter’ Teilung ist sie ausgeschlossen, bei fortgesetzter ‘grüner’ Teilung entstehen zwar anisotrope Elemente, jedoch ist deren Ausrichtung mangelhaft, da die Richtung der Kanten im Ausgangsnetz und nicht die Anisotropie der Lösung die Streckungsrichtungen bestimmt. Viele Autoren verwenden deshalb Knotenverschiebungen und/oder das so genannte ‘edge swapping’. Ersteres schließt die stabile Berechnung des Jacobians durch einfache Vererbung aus (siehe Abschnitt 2.4.4), das zweite steht im Widerspruch zu den einfachen

hierarchischen Datenstrukturen, insbesondere eines Kantenbaumes zur Nutzung in den Multilevel-Lösern.

Die von uns entwickelte Idee bestand nun darin, das Grobnetz einer anisotropen Netz-Hierarchie nach Anlauf der Rechnung auf der Basis der bis dahin gewonnenen Informationen über die Lösung neu zu generieren, gegebenenfalls sogar wiederholt. Die Verfeinerung soll so geschehen, dass die Hierarchie weitgehend erhalten bleibt. Werden bei der Verfeinerung des Netzes neue Knoten eingefügt, so ist eine (kleine) Abweichung vom Mittelpunkt der Vaterknoten erlaubt.

Die Verfolgung dieser Idee führte zu zunächst zu zwei Erkenntnissen.

- Die Neugenerierung von Netzen auf der Basis von Informationen über die zu approximierende Lösung ist eine anspruchsvolle Aufgabe, zu der es in mehreren Gruppen weltweit intensive, oft jahrelange Forschung gibt. Mit den vorhandenen personellen Möglichkeiten ist es nicht möglich einen vergleichbaren Netzgenerator neu zu entwickeln. Wir konnten jedoch zwei dieser Netzgeneratoren testen, den von V. Dolejší (Karls-Universität Prag) und BAMG von P. L. George (INRIA, Frankreich).
- Das Zulassen, neue Knoten nicht im Kantenmittelpunkt einzufügen, sondern leicht davon abzuweichen, liefert zwar mehr Freiheiten zur Optimierung des Finite-Elemente-Netzes, aber die numerischen Tests unserer theoretischen Untersuchungen, wo die neuen Knoten positioniert sein sollten, lieferten nicht die gewünschte Verbesserung der Approximation. Deshalb haben wir diese Versuche wieder eingestellt.

Als positives Resultat sollen jetzt einige Testergebnisse präsentiert werden, bei denen das ursprünglich uniforme Startnetz durch Iteration der Schritte

1. Berechnung der Finite-Elemente-Lösung der Aufgabe

$$\begin{aligned}
 -10^{-6} \Delta u + u &= f = \begin{cases} 1 & \text{für } x < 0.3(y+1), \\ 0 & \text{für } x > 0.3(y+1), \end{cases} \\
 u &= 1 \quad \text{an der Kante } x = 0, \\
 u &= 0 \quad \text{an der Kante } x = 1, \\
 \partial_n u &= 0 \quad \text{an den Kanten } y = 0 \text{ und } y = 1,
 \end{aligned}$$

2. Konstruktion eines neuen Netzes mit BAMG unter Verwendung der berechneten Lösung auf dem vorherigen Netz,

in ein anisotropes Startnetz für die eigentliche Finite-Element-Rechnung überführt wurde. Tabelle 2.1 zeigt die Entwicklung der Knoten- und Elementzahlen. Die Bilder 2.1 und 2.2 zeigen die Lösung und das Netz am Beginn und nach der 5. Iteration. Man erkennt, dass man mit wenigen Iterationen eines nahezu nichts kostenden Algorithmus (man bachte die geringen Knotenanzahlen) ein sehr günstiges anisotropes Startnetz erstellen kann, das geeignet ist, mit hierarchischer weiterer Verfeinerung bessere Lösungen zu produzieren, als es mit dem uniformen Ausgangsnetz möglich gewesen wäre.

Zusammenfassung Insgesamt zeigten die theoretischen und praktischen Untersuchungen der Hessian-Strategie, dass diese für die adaptive Generierung anisotroper hierarchischer Netze geeignet ist. Dabei wurden sowohl Vierecks- als auch Dreiecksnetze am Beispiel von Reaktions-Diffusions-Aufgaben mit extremen Rand- oder inneren Schichten getestet. Ein Vergleich ist schwer möglich, da die verwendeten Programme sehr unterschiedliche Entwicklungsstufen haben.

| Schritt | Knoten | Dreiecke |
|---------|--------|----------|
| 0 | 1681 | 3200 |
| 1 | 680 | 1326 |
| 2 | 1604 | 3172 |
| 3 | 2452 | 4876 |
| 4 | 2432 | 4836 |
| 5 | 1895 | 3750 |
| 6 | 1743 | 3456 |
| 7 | 1683 | 3335 |
| 8 | 1621 | 3208 |
| 9 | 1556 | 3074 |

Tabelle 2.1: Knoten- und Elementzahlen bei der Startnetz-Generierung mit Hilfe von BAMG

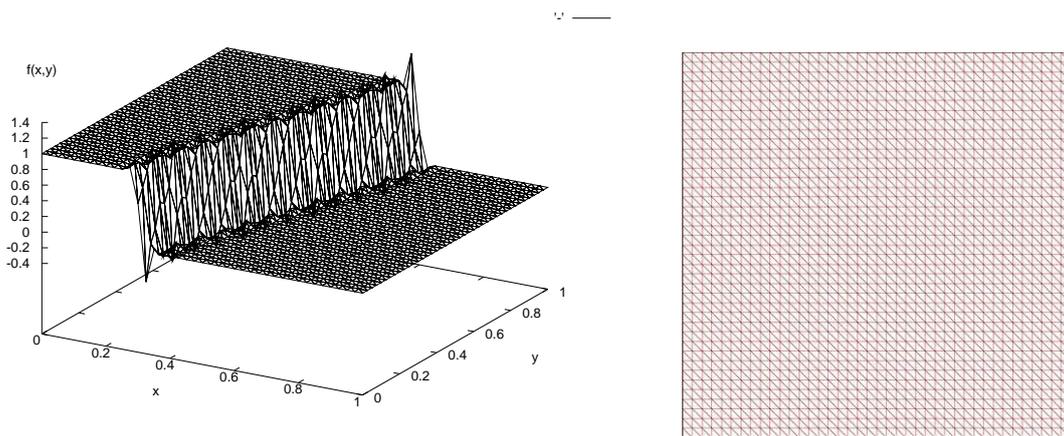


Abbildung 2.1: Oszillationsbehaftete Lösung und zugehöriges uniformes Ausgangsnetz

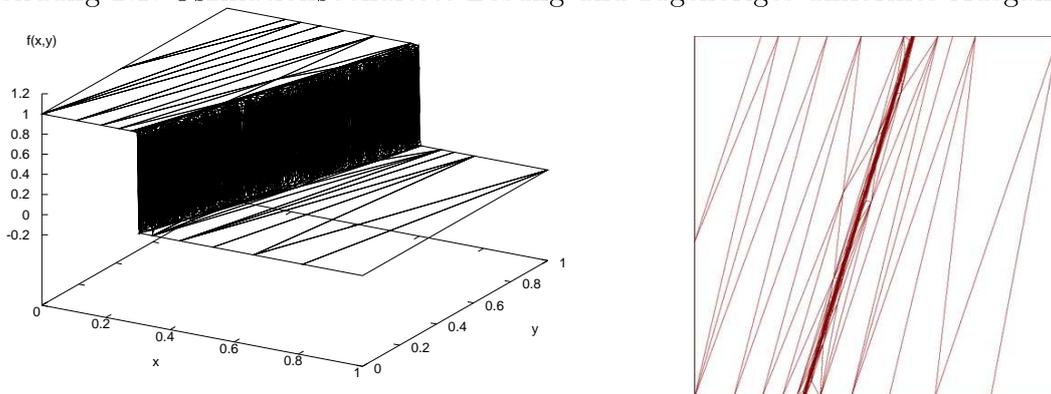


Abbildung 2.2: Lösung und anisotropes Netz nach 5 Iterationen

Weitere Ergebnisse

Überblicksartikel Ein zusammenfassender Artikel über anisotrope Diskretisierungen des Poisson- und des Stokesproblems in Gebieten mit Kanten wurde in [ANS01] veröffentlicht.

Für die 2004 erscheinende *Encyclopedia of Computational Mechanics* wurde Th. Apel gebeten, einen Artikel über Interpolation in Finite-Element-Räumen zu schreiben. Die Arbeit [Ape04] gibt einen Überblick über verschiedene Interpolationsoperatoren und lokale Abschätzungen des entsprechenden Interpolationsfehlers. Die Darlegung beschränkt sich auf die h -Version der Finite-Element-Methode, diskutiert aber verschiedenste Elementtypen (Dreiecks-, Vierecks-, Tetraeder und Hexaederelemente; affine und nicht-affine Elemente, isotrope und anisotrope Elemente, Lagrange- und andere Elemente).

Transformation von Hexaeder- in Tetraedernetze Th. Apel und N. Düvelmeyer haben sich mit Algorithmen zur Umwandlung von Hexaeder- in Tetraedernetze beschäftigt, wobei keine neuen Knoten eingeführt werden. Die bisher bekannten Algorithmen nutzen nur die topologische Struktur des Netzes, jedoch keine geometrischen Informationen. In der entstandenen Arbeit [AD03] wird ein Algorithmus beschrieben, der es erlaubt Qualitätskriterien für die Teilung von Vierecksflächen zu fordern.

Implementierung der Singulärfunktionsmethode Eckensingularitäten können numerisch mit der Singulärfunktionsmethode behandelt werden. Die Idee ist dabei, singuläre Lösungsanteile explizit in den diskreten Raum aufzunehmen. Im Zweidimensionalen ist das seit den 70er Jahren bekannt. Da wir auch Singulärfunktionen zu Polyeder-ecken im Dreidimensionalen berechnen können und weil wir die Hoffnung auf eine zur FEM mit ausschließlicher Netzverfeinerung konkurrenzfähige Methode haben, wurde die Singulärfunktionsmethode von Chr. Gay in das von Th. Apel entwickelte 3D-Finite-Element-Paket *FEMPS3D* implementiert [Gay02]. S. Trebesius setzt die Arbeiten derzeit fort und untersucht theoretisch und numerisch entsprechende a posteriori Fehlerschätzer.

2.4.2 Auflösungsverfahren bei anisotropen Diskretisierungen

Von Jung, Schlömer und Sohn (Institut für Wissenschaftliches Rechnen, TU Dresden) wird ein schneller Löser für das Randwertproblem $-\varepsilon\Delta u + u = f$ in $\Omega = (0, 1)^2$ und $u = 0$ auf $\partial\Omega$ ($\varepsilon \ll 1$) entwickelt. Da bei diesem Problem in Randnähe Randschichten auftreten, müssen längs des Randes bei der Finite-Elemente-Diskretisierung anisotrope Elemente eingesetzt werden (siehe Abbildung 2.3).

Auf der Basis einer nichtüberlappenden Gebietszerlegung, im Beispiel einer Zerlegung in neun Teilgebiete, wird ein Gebietszerlegungsvorkonditionierer konstruiert. Zur Lösung der Teilprobleme im Inneren der Teilgebiete werden Mehrgitterverfahren angewendet. In den anisotrop vernetzten Teilgebieten kommen dabei Linienglätter zum Einsatz. Bei der Konstruktion des Schurkomplement-Vorkonditionierers werden Ideen aus [KW98] genutzt. Die bei der Konstruktion dieses Löser gewonnenen Erfahrungen bilden eine Grundlage für die Entwicklung schneller Löser in den adaptiven Algorithmen. Da die Entwicklung der speziellen Löser für die anisotropen Diskretisierungen derzeit noch nicht abgeschlossen ist, werden wir theoretische und numerische Resultate am Ende der Laufzeit des Teilprojektes präsentieren.

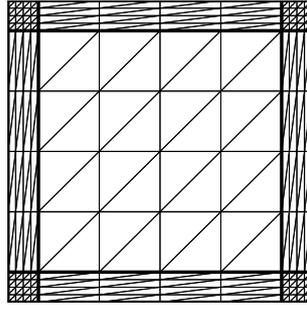


Abbildung 2.3: Anisotrope Diskretisierung

Für anisotrope Vernetzungen in der Umgebung von Kanten wurden schnelle Auflösungsverfahren untersucht. Von Apel und Schöberl wurde in [AS02] dazu ein Mehrgitterverfahren vorgeschlagen, bei dem Semicoarsening senkrecht zur Kante mit einem Linienglätter in Kantenrichtung kombiniert wurde. Die optimale Konvergenz des Verfahrens konnte bewiesen werden.

In der Diplomarbeit [Sei02] wurde eine Multilevel-Vorkonditionierung für das Verfahren der konjugierten Gradienten untersucht. Im Vorkonditionierungsschritt müssen statt des großen Gleichungssystems viele kleinere Gleichungssysteme gelöst werden. Diese sind zum Teil gleich, weshalb auch direkte Verfahren zur Lösung in Betracht gezogen werden können. Für den Vorkonditionierer wurde in der vorliegenden Diplomarbeit analog zu [Zha92] gezeigt, dass die Konditionszahl des vorkonditionierten Problems unabhängig von der Diskretisierungsschrittweite beschränkt ist. Wenn die kleinen Gleichungssysteme mit optimaler Komplexität gelöst werden können (was nicht klar ist), kann also auch das Ausgangsgleichungssystem mit optimaler Komplexität gelöst werden.

2.4.3 Auflösungsstrategien für Verfahren höherer Ordnung

Vorkonditionierung für p -Versions Elementmatrix in beliebigen Dimensionen

Die von S. Beuchler im Antragszeitraum 1999–2001 entwickelten Vorkonditionierer für die Elementsteifigkeitsmatrix $K_{1,2}$, also für $d = 2$, basieren auf Interpretationen der Matrix $K_{1,2}$ als Diskretisierungsmatrix eines degenerierten elliptischen Problems zweiter Ordnung. Eine analoge Interpretation ist sowohl für $K_{1,d}$ als auch für die in (2.8) involvierten Matrizen F_1 und D_1 möglich:

Dazu betrachte man die Randwertaufgabe 2. Ordnung:

Suche $u \in H_0^1((0, 1))$, so dass

$$a_1(u, v) = \int_0^1 u'(x)v'(x) + \omega^2(x)u(x)v(x) = \int_0^1 g(x)v(x) \quad \forall v \in H_0^1((0, 1)) \quad (2.9)$$

gilt.

Problem (2.9) wird mit stückweise linearen finiten Elementen auf dem Netz $\left\{ \left(\frac{i-1}{n}, \frac{i}{n} \right) \right\}_{i=1}^n$ diskretisiert, wobei $n = 2^l$ und l das Level der Verfeinerung ist. Als Basisfunktionen

werden die Hütchenfunktionen

$$\phi_i^{(1,l)}(x) = \begin{cases} nx - (i-1) & \text{auf } \tau_i^l \\ (i+1) - nx & \text{auf } \tau_{i+1}^l \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad \forall i = 1, \dots, n-1$$

des l -ten Levels gewählt. Weiterhin sei $\mathbb{U}_l = \text{span} \left\{ \phi_i^{(1,l)} \right\}_{i=1}^{n-1}$. Dann ist die Galerkin-Projektion von (2.9) auf \mathbb{U}_l äquivalent zum Lösen des linearen Gleichungssystems

$$\begin{aligned} (M_\omega + T_{\omega=1})\underline{u} &= \underline{g}, \quad \text{wobei} \\ M_\omega^\phi &= \left[\langle \phi_j^{(1,l)}, \phi_i^{(1,l)} \rangle_\omega \right]_{i,j=1}^{n-1}, \quad T_\omega^\phi = \left[\langle (\phi_j^{(1,l)})', (\phi_i^{(1,l)})' \rangle_\omega \right]_{i,j=1}^{n-1} \\ \text{mit } \langle u, v \rangle_\omega &= \int_0^1 \omega^2(x) u(x) v(x) \, dx \end{aligned}$$

als das gewichtete $L_{2,\omega}((0,1))$ -Skalarprodukt. In [Beu03c] wird nun gezeigt, dass

$$D_1 \sim 6n^3 M_{\omega=x}^\phi \quad \text{und} \quad 2nF_1 \sim T_{\omega=1}^\phi, \quad (2.10)$$

d.h. die in (2.8) eingeführten Matrizen F_1 und D_1 , vgl. Abschnitt 2.3.3, haben eine Interpretation als h -Versions Finite-Element-Massen- und Steifigkeitsmatrix. Für die Matrix $K_{1,d}$ ist eine analoge Interpretation möglich. Wir verweisen exemplarisch für die Fälle $d=2$ und $d=3$ auf [BSS04].

In einem weiteren Schritt wird nun eine Multilevelbasis $\{\psi_j^k\}_{k \leq l} \subset \mathbb{U}_l$ gesucht, in der die Matrizen $T_{\omega=1}^\psi = \left[\langle (\psi_j^{k'})', (\psi_j^{k'})' \rangle_{\omega=1} \right]_{k,k' \leq l}$ und $M_\omega^\psi = \left[\langle \psi_j^{k'}, \psi_j^k \rangle_\omega \right]_{k,k' \leq l}$ spektraläquivalent zu den beiden Diagonalmatrizen $D_{T_{\omega=1}^\psi} = \text{diag} [2^{2k}]_{k \leq l}$ und $D_{M_\omega^\psi} = \text{diag} [\omega^2(2^{-k}j)]_{k \leq l}$ sind, d.h. es gilt

$$T_{\omega=1}^\psi \sim D_{T_{\omega=1}^\psi} \quad \text{und} \quad M_\omega^\psi \sim D_{M_\omega^\psi}. \quad (2.11)$$

In Zusammenarbeit mit Reinhold Schneider (TU Chemnitz, Teilprojekte A7, A12, A13) und Christoph Schwab (ETH Zürich) (Besuche von Schwab in Chemnitz 20.–23.11.2001 und 7.–8.7.2002, Beuchler in Zürich 8.–13.9.2002) konnte für eine biorthogonale Waveletbasis $\{\psi_j^k\}_{k \leq l} \subset \mathbb{U}_l$, d.h. $\langle \psi_j^k, \tilde{\psi}_{j'}^{k'} \rangle = \delta_{kk'} \delta_{jj'}$, und eine Gewichtsfunktion ω , die die Annahmen

- $\|v\|_0^2 \sim \sum_{k=1}^\infty \sum_j |\langle v, \psi_j^k \rangle|^2 \sim \sum_{k=1}^\infty \sum_j |\langle v, \tilde{\psi}_j^k \rangle|^2 \quad \forall v \in L_2((0,1))$
-

$$\|v\|_1^2 \sim \sum_{k=1}^\infty 2^{2l} \sum_j |\langle v, \psi_j^k \rangle|^2 \quad \forall v \in H_0^1((0,1)) \quad (2.12)$$

- $\psi_j^k \in W^{1,\infty}((0,1)), \tilde{\psi}_j^k \in W^{1,\infty}((0,1))$
- $\psi_j^k \approx x^\beta$ bei $x=0$, $\tilde{\psi}_j^k \approx x^{\tilde{\beta}}$ bei $x=0$,
- $\omega(x) \in W^{1,\infty}((\delta,1))$ mit einem gewissen $\delta > 0$,
- $\omega(x) \approx x^\alpha$ bei $x=0$,

- $\alpha + \beta > -0.5$, $-\alpha + \tilde{\beta} > -0.5$

erfüllen, gezeigt werden, dass

$$M_\omega^\psi \sim D_{M_\omega^\psi} \quad (2.13)$$

gilt. Aus (2.12) und (2.13) folgen nun sofort die Beziehungen (2.11), da $\beta = \tilde{\beta} = 1$ und $\alpha = 1$, d.h. alle Annahmen erfüllt sind, und es stückweise lineare biorthogonale Waveletbasen gibt, die die verbleibenden Bedingungen erfüllen. Ein Beispiel sind die Waveletfamilien ψ_{26} mit 2 verschwindenden Momenten auf primaler und 6 verschwindenden Momenten auf dualer Seite. Daraus lässt sich ein Vorkonditionierer für $K_{1,d}$ entwickeln. Die Herangehensweise wird am Beispiel $d = 2$ erläutert und lässt sich mit analogen Tensorproduktargumenten auf den allgemeinen Fall übertragen.

Mit Q bezeichnen wir die Basistransformationsmatrix zwischen der Wavelet-Basis $\{\psi_j^k\}_{k \leq l}$ und $\{\phi_i^{(1,l)}\}_{i=1}^{n-1}$. Dann gilt

$$\begin{aligned} K_{1,2} &= F_1 \otimes D_1 + D_1 \otimes F_1 \\ &\sim 3n^2 \left(T_{\omega=1}^\phi \otimes M_{\omega=x}^\phi + M_{\omega=x}^\phi \otimes T_{\omega=1}^\phi \right) \\ &= 3n^2 \left(Q^{-T} T_{\omega=1}^\psi Q^{-1} \otimes Q^{-T} M_{\omega=x}^\psi Q^{-1} + Q^{-T} M_{\omega=x}^\psi Q^{-1} \otimes Q^{-T} T_{\omega=1}^\psi Q^{-1} \right) \\ &= 3n^2 \left(Q^{-T} \otimes Q^{-T} \right) \left(T_{\omega=1}^\psi \otimes M_{\omega=x}^\psi + M_{\omega=x}^\psi \otimes T_{\omega=1}^\psi \right) \left(Q^{-1} \otimes Q^{-1} \right) \\ &\sim 3n^2 \left(Q^{-T} \otimes Q^{-T} \right) \left(D_{T_{\omega=1}^\psi} \otimes D_{M_{\omega=x}^\psi} + D_{M_{\omega=x}^\psi} \otimes D_{T_{\omega=1}^\psi} \right) \left(Q^{-1} \otimes Q^{-1} \right) \\ &= 3n^2 C_2^\psi. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Die Operation $C_2^\psi \underline{w} = \underline{r}$ kostet $\mathcal{O}(n^d) = \mathcal{O}(p^d)$ arithmetische Operationen, ist also optimal. Analog lässt sich nun ein Vorkonditionierer C_d^ψ für $K_{1,d}$ entwickeln.

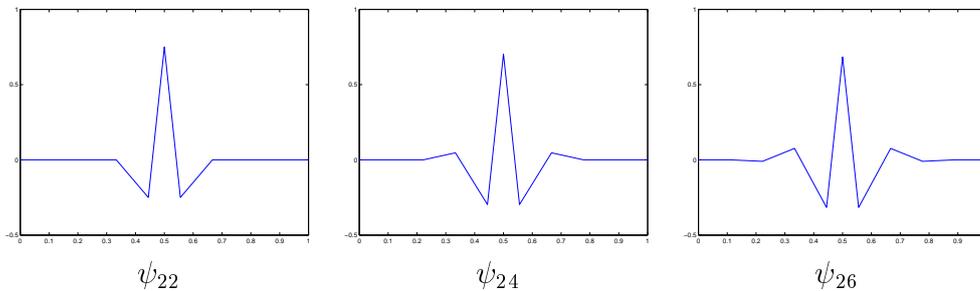
Aufbauend auf diesem Resultat konnte in [Beu03c] mit ähnlichen Argumenten auch die Spektraläquivalenzbeziehung $2nF_1 \sim T_{\omega=1}^\phi$ (2.10) gezeigt werden, die eine Verschärfung der Abschätzung $T_{\omega=1}^\phi \preceq 2nF_1 \preceq (1 + \log n)T_{\omega=1}^\phi$ ist, vgl. Arbeits- und Ergebnisbericht SFB 393 1999–2001. Die Beziehung (2.10) bewirkt auch die Verschärfung der Konditionenzahlabschätzungen in [Beu02] von $\kappa((\mathcal{M}^S)^{-\frac{1}{2}} K_2 (\mathcal{M}^S)^{-\frac{1}{2}}) \preceq (1 + \log p)$ für die Multigradvorkonditionierer für K_2 auf $\kappa((\mathcal{M}^S)^{-\frac{1}{2}} K_2 (\mathcal{M}^S)^{-\frac{1}{2}}) = \mathcal{O}(1)$. Die Resultate aus [Beu03c], [BSS04] bildeten nun die Grundlage für die Definition eines geeigneten Fortsetzungsoperators, welcher in (2.4) die Matrix $K_I^{-1} K_{IE}$ durch eine Matrix $-E$ ersetzt, [BS03]. Diese Konstruktion lässt sich auch auf den 3D-Fall übertragen.

Die Tabellen 2.2 und 2.3 zeigen Iterationszahlen und Rechenzeiten des PCG-Verfahrens zum Lösen von $K_d \underline{u} = \underline{f}$, $d = 2, 3$ mit verschiedenen Waveletvorkonditionierungen mit einer relativen Genauigkeit von 10^{-10} in der vorkonditionierten Energienorm. Es wurden die Waveletfamilien ψ_{2i} mit zwei verschwindenden Momenten auf primaler und $i = 2, 4, 6$ verschwindenden Momenten auf dualer Seite benutzt. In Abbildung 2.4 ist jeweils ein Wavelet der entsprechenden Familien abgebildet. Die Vorkonditionierung mit dem Wavelet ψ_{22} zeigt dabei in Bezug auf Rechenzeit und Iterationszahlen, die geringfügig ansteigen, die besten Ergebnisse. Für das Wavelet ψ_{26} sind die Iterationszahlen relativ hoch.

| p | ψ_{22} | | ψ_{24} | ψ_{26} |
|------|--------------|-----|-------------|-------------|
| | Zeit in sek. | It. | | |
| 7 | 0.000 | 41 | 7 | 7 |
| 15 | 0.000 | 22 | 22 | 22 |
| 31 | 0.031 | 30 | 38 | 30 |
| 63 | 0.094 | 36 | 56 | 72 |
| 127 | 0.406 | 42 | 81 | 141 |
| 255 | 2.220 | 46 | 115 | 296 |
| 511 | 11.000 | 51 | 147 | 489 |
| 1023 | 48.600 | 55 | 175 | 752 |
| 2047 | 241.000 | 58 | 200 | 963 |

Tabelle 2.2: Iterationszahlen der Wavelet-VK für $K_2 \underline{u} = \underline{f}$.

| p | ψ_{22} | | ψ_{24} | ψ_{26} |
|-----|--------------|-----|-------------|-------------|
| | Zeit in Sek. | It. | | |
| 7 | 0.004 | 3 | 19 | 19 |
| 15 | 0.266 | 41 | 41 | 41 |
| 31 | 3.480 | 50 | 67 | 49 |
| 63 | 38.200 | 56 | 104 | 164 |
| 127 | 447.000 | 64 | 160 | 446 |
| 255 | 4293.000 | 72 | 228 | 996 |

Tabelle 2.3: Iterationszahlen der Wavelet-VK für $K_3 \underline{u} = \underline{f}$.Abbildung 2.4: Wavelets ψ_{22} , ψ_{24} , ψ_{26} .

Implementierung des DD -Vorkonditionierers in 2D

Wir betrachten die Poisson-Gleichung in einem Gebiet $\bar{\Omega} = \bigcup_{i=1}^{nel} \bar{\Omega}_i$ mit $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset$ für $i \neq j$. Dann lässt sich für die in Abschnitt 2.3.3 beschriebene Matrix $K^{(1)}$ (2.2) folgender Vorkonditionierer entwickeln.

$$C^{(1)} = \begin{bmatrix} I_E & K_{EI}K_I^{-1} \\ 0 & I_I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{S,E} & 0 \\ 0 & C_I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_E & 0 \\ K_I^{-1}K_{IE} & I_I \end{bmatrix}.$$

Dabei ist C_I der Vorkonditionierer für den Löser der Teilgebiete. Als Wahlmöglichkeiten bieten sich der von Sven Beuchler im Rahmen seiner Promotion [Beu03b] entwickelte Multigrid-Vorkonditionierer \mathcal{M}^S , d.h. $C_I = \text{blockdiag} [\mathcal{M}^S]_{i=1}^{nel}$ oder der in (2.14) entwickelte Wavelet-Vorkonditionierer C_2^ψ an, d.h.

$$C_I = \text{blockdiag} [W^\psi]_{i=1}^{nel} \quad \text{mit} \quad W^\psi = 3n^2 P \text{blockdiag} [C_2^\psi]_{i=1}^4 P^T \quad (2.15)$$

und der Permutationsmatrix P aus Beziehung (2.7). Dann gelten für beide Vorkonditionierer die Spektraläquivalenzbeziehungen $C_I \sim A_I$, [Beu03c]. Als Vorkonditionierer für S_E werden die in [JK97] beschriebenen Vorkonditionierer benutzt. Zusätzlich wurde für den Block K_V der Matrix K ein Yserentant-Vorkonditionierer mit Grobgitterlöser benutzt, falls eine Diskretisierung mittels hp -Version der FEM vorliegt. Diese Domain-Decomposition Vorkonditionierer wurden von Sven Beuchler im Berichtszeitraum in das bestehende parallele Programm *SPC-PM-Po2p* implementiert und auf dem Chemnitzer Linux Cluster (CLiC) auf ihre Effizienz hin in verschiedenen Beispielen untersucht. Exemplarisch seien hier die Beispiele *hufen* und *qua1* aufgeführt. Abbil-

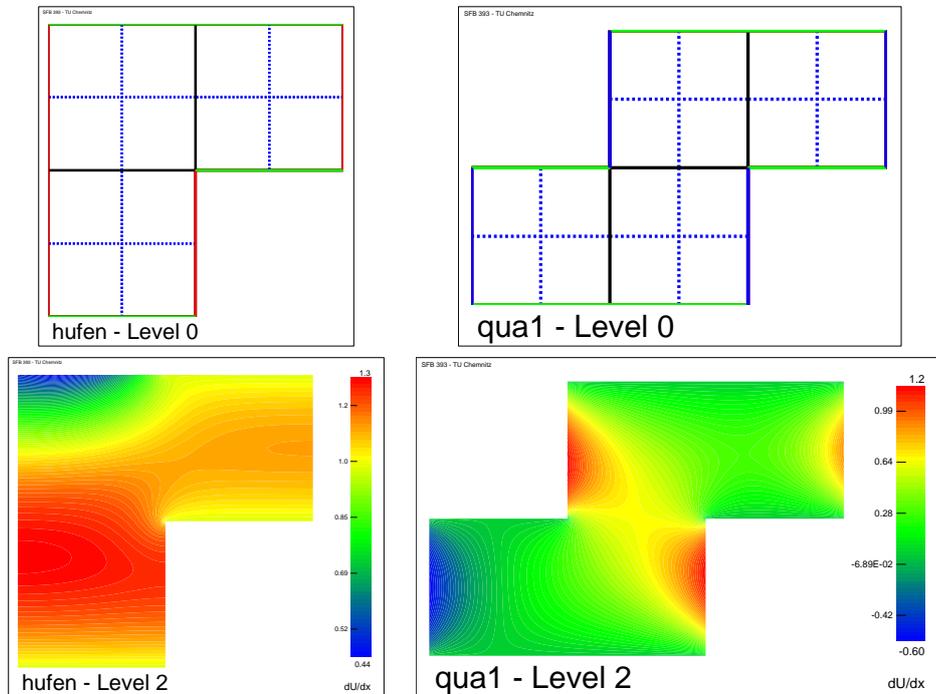


Abbildung 2.5: Beispiele *hufen* (links) und *qua1* (rechts).

| | | Levels of refinement | | | | | | | Levels of refinement | | | | |
|-----|--|----------------------|----|----|----|----|-----|--|----------------------|----|----|----|----|
| p | | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | p | | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |
| 1 | | 2 | 10 | 16 | 20 | 24 | 1 | | 2 | 10 | 16 | 20 | 25 |
| 3 | | 11 | 21 | 27 | 31 | 34 | 3 | | 10 | 20 | 28 | 32 | 35 |
| 5 | | 15 | 25 | 32 | 35 | 38 | 5 | | 13 | 25 | 31 | 36 | 40 |
| 9 | | 16 | 29 | 36 | 40 | 43 | 9 | | 14 | 28 | 34 | 41 | 44 |
| 15 | | 18 | 31 | 37 | 44 | 46 | 15 | | 15 | | | | |
| 25 | | 20 | 34 | 39 | 47 | 50 | 25 | | 17 | | | | |
| 33 | | 22 | 35 | 40 | 49 | 52 | 33 | | 18 | | | | |
| 45 | | 24 | 36 | 42 | | | 45 | | 19 | | | | |
| 63 | | 27 | 40 | 43 | | | 63 | | 21 | | | | |
| 125 | | 30 | | | | | 125 | | 23 | | | | |
| 243 | | 34 | | | | | 243 | | 24 | | | | |
| 513 | | 36 | | | | | 513 | | 26 | | | | |

Tabelle 2.4: Iterationszahlen des PCG-Verfahrens bei den Beispielen `huf en` (links) und `qua1` (rechts).

dung 2.5 zeigt die Vernetzung des Gebietes im Level 0 (Grobnetz) und das Verhalten der Lösung, Tabelle 2.4 die Iterationszahlen des PCG-Verfahrens mit einer relativen Genauigkeit von 10^{-5} in Abhängigkeit vom Polynomgrad (p -Verfeinerung) und der Anzahl der Levels (gleichmäßige h -Verfeinerung). Dabei ist ein moderates Anwachsen der Iterationszahlen bezüglich p in allen Levels festzustellen. Die Ursache für dieses Anwachsen ist in der Abschätzung (2.3) und in den Konditionszahlabschätzungen $\kappa(C_{S,E}^{-\frac{1}{2}} S_E C_{S,E}^{-\frac{1}{2}}) \leq (1 + \log p)^\alpha$ mit $\alpha = 1$ begründet.

Weitere Experimente sind in der Arbeit [Beu03a] und unter der Homepage

<http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/software/p-version-2D>

zu finden. Dabei ist ein ähnliches asymptotisches Verhalten bezüglich anwachsendem Polynomgrad wie in den anderen Beispielen festzustellen, die absoluten Iterationszahlen sind jedoch teilweise sehr verschieden.

Vorkonditionierung bei entarteten Elementen in 2D

Kritisch waren vor allem Elemente, die in ihren geometrischen Abmessungen sehr stark vom Quadrat abweichen, wie z.B. ein Rechteck mit den Seitenlängen a und b mit $a \gg b$. Dann fließen in die Konditionszahlabschätzungen für $C_1^{-1} A_1$ die Parameter a und b ein. Im Falle des Rechteckes mit den Seitenlängen a und b lässt sich mittels

$$C_{2,a,b}^{\psi} = 3n^2 (Q^{-T} \otimes Q^{-T}) \left(\frac{a}{b} D_{T_{\omega=1}^{\psi}} \otimes D_{M_{\omega=x}^{\psi}} + \frac{b}{a} D_{M_{\omega=x}^{\psi}} \otimes D_{T_{\omega=1}^{\psi}} \right) (Q^{-1} \otimes Q^{-1})$$

anstelle von C_2^{ψ} (2.14) ein optimaler Wavelet-Vorkonditionierer konstruieren, bei dem die Konditionszahl der vorkonditionierten Systemmatrix unabhängig vom Polynomgrad und den Parametern a und b ist, [BSS04].

2.4.4 Software

Überblick

In Kooperation mit den Teilprojekten A3 – A11 – A12 – D1 (im Wesentlichen) sind Programmrealisierungen entstanden, die konsequent auf gleichartigen Grundbibliotheken basieren. Die im Folgenden aufgelisteten Experimentalprogramme unterscheiden sich somit lediglich in ihrer konkreten Aufgabenverfolgung, nicht aber im Aufbau aus hochgradig gleichen Bausteinen (Modul-Bibliotheken). Deshalb wurden sie mit folgender Namensgebung belegt:

| | |
|-------------|--|
| <i>SPC-</i> | für <i>scientific parallel computing</i> in Chemnitz |
| <i>PM</i> | für Programm-Modul |
| <i>Name</i> | mit der Spezifikation der Leistung. |

Im Einzelnen entstanden:

| | |
|----------------------|---|
| <i>SPC-PM 2Ad</i> | adaptives 2D-FE-Programm für Reaktions-Diffusionsaufgaben und lineare Elastizität Zusatz: Kontakt, Rissfortschritt, Rotationssymmetrie |
| <i>SPC-PM 3Ad</i> | adaptives 3D-FE-Programm für Reaktions-Diffusionsaufgaben und lineare Elastizität Parallelversion mit Balancierung aus Tp. B8 |
| <i>SPC-PM 2Ad Nl</i> | adaptives 2D-FE-Programm für Deformationsprobleme mit nichtlinearem Materialverhalten |
| <i>SPC-PM AdSt</i> | adaptives 2D-FE-Programm für das Stokes-Problem |
| <i>SPC-PM AdMix</i> | adaptives 2D-FE-Programm für allgemeinere gemischte FE-Formulierungen |
| <i>SPC-PM AdPl</i> | adaptives 2D-FE-Programm für die Mindlin-Reissner-Plattengleichung mit MITC-Elementen |
| <i>SPC-PM Po2p</i> | nichtadaptives, paralleles 2D-Programm für Laplace mit beliebigem Polynomgrad |

Die geschilderten numerischen Experimente wurden mit dem Programmbaustein *SPC-PM 2Ad* („Programm-Modul 2D-adaptive FEM für Potential- und Elastizitätsprobleme“) durchgeführt, der (schon konzipiert in der vorangegangenen Phase, siehe Arbeits- und Ergebnisbericht SFB 393 1999–2001) wesentlich weiter verbessert und komplettiert wurde. Neue Bestandteile sind:

- Netzvergrößerung – erreicht durch eine zusätzliche, aber sehr sparsame Datenstruktur des „Elementebaums“,
- Stabile Rechnung auch bei sehr starken Verfeinerungen, z.B. an Singularitäten (s.u.),
- Signorini-Kontakt mit beliebig geformten Hindernissen (s. Tp. A12),
- „Risswachstum“ – Aufreißen des Netzes zum Schlitzgebiet unter Erhalt der hierarchischen Datenstrukturen (s. Tp. D1).

Stabile adaptive Rechnung

Für die hier geschilderten Ergebnisse ist insbesondere die Stabilisierung der numerischen Rechnung bei extremen Verfeinerungen von Wichtigkeit. Immer wenn Gradienten im Element zu berechnen sind, wird von der üblichen Transformation eines Masterelements auf das Weltelement Gebrauch gemacht und der Jacobian dieser Abbildung benötigt. Dies tritt unumgänglich bei den Elementroutinen auf (Gradienten der Formfunktionen in Gaußpunkten zu berechnen) und im Post-Processing v.a. bei Fehlerschätzern (z.B. Sprung von $(\nabla u) \cdot \mathbf{n}$ über einer Elementkante). Die klassischen Finite Elemente Routinen berechnen diese Jacobi-Matrix mit der Formel

$$J = \sum_{i=1}^{n_e} (\nabla N_i) x^{(i)T}$$

aus den Knoten $x^{(i)}$ des Elements und den Formfunktionen des Masterelements $N_i(\hat{x})$. Dabei treten stets Differenzen von Knotenkoordinaten auf (z.B. im einfachsten Falle des linearen Dreiecks $J = (x^{(2)} - x^{(1)} : x^{(3)} - x^{(1)})^T$). Da bei jeder Kantenteilung die neuen Knoten eine Bitrepräsentation ihrer Mantisse erhalten, die um 1 Bit mehr mit der ihrer Väter übereinstimmt, führt die adaptive Teilung nach etwa 20 Schritten zu Instabilitäten, weil J wegen drastiger Mantissenauslöschung nicht mehr genau genug berechenbar ist.

Dies wurde in [Mey03b] für Dreiecke und Vierecke sowie für 3D-Elemente besonders untersucht. Es wurde eine „Vererbung“ der Matrix J bei der Teilung der Elemente angegeben, die diese Instabilität vollständig beseitigt. Eine Ausdehnung auf gekrümmte Ränder ist in [Mey03a] angefügt.

Literaturverzeichnis

- [AB98] M. Ainsworth und I. Babuška. Reliable and robust a posteriori error estimation for singularly perturbed reaction-diffusion problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 36:331–353, 1998.
- [AD03] Th. Apel und N. Düvelmeyer. Transformation of hexahedral finite element meshes into tetrahedral meshes according to quality criteria. *Computing*, 71:293–304, 2003.
- [AGJM01] Th. Apel, S. Grosman, P. K. Jimack und A. Meyer. A new methodology for anisotropic mesh refinement based upon error gradients. Preprint SFB393/01-11, TU Chemnitz, 2001. Erweiterte Fassung erscheint bei Appl. Numer. Math. 2004.
- [ANS01] Th. Apel, S. Nicaise und J. Schöberl. Finite element methods with anisotropic meshes near edges. In P. Neittaanmäki und M. Křížek, Hrsg., *Proc. Internat. Conf. Finite Element Methods: Three-dimensional Problems, GAKUTO Internat. Series, Math. Sci. Appl.*, Bd. 15, S. 1–8, Tokyo, 2001. Gakkotosho.
- [Ape04] Th. Apel. Interpolation in h -version finite element spaces. In E. Stein, R. de Borst und T. J. R. Hughes, Hrsg., *Encyclopedia of Computational Mechanics*. Wiley, 2004.
- [AS02] Th. Apel und J. Schöberl. Multigrid methods for anisotropic edge refinement. *SIAM J. Numer. Anal.*, 40:1993–2006, 2002.
- [Beu02] S. Beuchler. Multi-grid solver for the inner problem in domain decomposition methods for p -FEM. *SIAM J. Numer. Anal.*, 40(3):928–944, 2002.

- [Beu03a] S. Beuchler. A Dirichlet-Dirichlet DD preconditioner for p -FEM. Preprint SFB393 03-12, Technische Universität Chemnitz, July 2003.
- [Beu03b] S. Beuchler. Multi-level solvers for degenerated problems with applications to p -versions of the fem. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, 2003.
- [Beu03c] S. Beuchler. Optimal preconditioners for the p -version of the FEM. Preprint SFB393 03-03, Technische Universität Chemnitz, March 2003.
- [BS03] S. Beuchler und J. Schöberl. Extension operators on tensor product structures in 2d and 3d. Technical Report 2003-01, Johann Radon Institute for Computational Applied Mathematics, Linz, December 2003.
- [BSS04] S. Beuchler, R. Schneider und C. Schwab. Multiresolution weighted norm equivalences and applications. *Numerische Mathematik*, 2004. (zur Veröffentlichung angenommen).
- [CKN03] E. Creusé, G. Kunert und S. Nicaise. A posteriori error estimation for the Stokes problem: Anisotropic and isotropic discretizations. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 2003. (eingereicht).
- [Dör96] W. Dörfler. A convergent adaptive algorithm for Poisson's equation. *SIAM J. Numer. Anal.*, 33:1106–1124, 1996.
- [Gay02] Chr. Gay. Solving of Poisson equations with singularities. Projet de fin d'études, TU Chemnitz, 2002.
- [Gro02] S. Grosman. Robust local problem error estimation for a singularly perturbed reaction-diffusion problem on anisotropic finite element meshes. Preprint SFB393/02-07, TU Chemnitz, 2002.
- [Gro04] S. Grosman. The robustness of the hierarchical a posteriori error estimator for reaction-diffusion equation on anisotropic meshes. Preprint SFB393/04-02, TU Chemnitz, 2004.
- [JK97] S. Jensen und V. G. Korneev. On domain decomposition preconditioning in the hierarchical p -version of the finite element method. *Comput. Methods. Appl. Mech. Eng.*, 150(1–4):215–238, 1997.
- [KMN03] G. Kunert, Z. Mghazli und S. Nicaise. A posteriori error estimation for a finite volume discretization on anisotropic meshes. Preprint SFB393/03–16, TU Chemnitz, 2003.
- [KN04] G. Kunert und S. Nicaise. Zienkiewicz–Zhu error estimators on anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes. *Math. Model. Numer. Anal.*, 2004. (zur Veröffentlichung angenommen).
- [Kun99] G. Kunert. *A posteriori error estimation for anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes*. Dissertation, TU Chemnitz, 1999. Logos, Berlin, 1999.
- [Kun01] G. Kunert. A posteriori H^1 error estimation for a singularly perturbed reaction diffusion problem on anisotropic meshes. Preprint SFB393/01-21, TU Chemnitz, August 2001. *IMA J. Numer. Anal.* (eingereicht).
- [Kun02] G. Kunert. Towards anisotropic mesh construction and error estimation in the finite element method. *Numer. Meth. PDE*, 18(6):625–648, 2002.

- [Kun03a] G. Kunert. Advances in a posteriori error estimation on anisotropic finite element discretizations. TU Chemnitz, März 2003. Habilitationsschrift.
- [Kun03b] G. Kunert. A posteriori error estimation for convection dominated problems on anisotropic meshes. *Math. Methods Appl. Sci.*, 26(7):589–617, 2003.
- [KW98] B. N. Khoromskij und G. Wittum. Robust interface reduction for highly anisotropic elliptic equations. In W. Hackbusch und G. Wittum, Hrsg., *Multigrid Methods V, Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, Bd. 3, S. 140–151. Springer, 1998. Proceedings of the Fifth European Multi-Grid Conference held in Stuttgart, Germany, October 1–4, 1996.
- [Mey03a] A. Meyer. Stable calculation of the Jacobians for curved triangles. Preprint SFB393/03-05, TU Chemnitz, 2003.
- [Mey03b] A. Meyer. Stable evaluation of Jacobian matrices on highly refined finite element meshes. *Computing*, 70:359–373, 2003.
- [MNS00] P. Morin, R. H. Nochetto und K. Siebert. Data oscillation and convergence of adaptive FEM. *SIAM J. Numer. Anal.*, 38:466–488, 2000.
- [Sei02] J. Seidel. Eine Auflösungsmethode für das Finite-Elemente-Gleichungssystem bei anisotroper Diskretisierung in der Umgebung einer Kante. Diplomarbeit, TU Chemnitz, 2002.
- [Zha92] X. Zhang. Multilevel Schwarz methods. *Numer. Math.*, 63:521–539, 1992.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Das Teilprojekt A3 soll in der nächsten Antragsperiode nicht wieder beantragt werden. Das ergibt sich zum einen aus dem Weggang der Antragsteller Th. Apel und G. Kunert, die vor allem auf dem Gebiet der anisotropen Diskretisierungen in den letzten Jahren viel Arbeit geleistet haben, die auch international Anerkennung gefunden hat. Zum anderen wurde das Teilthema *Auflösungsstrategien für Verfahren höherer Ordnung* vor allem von S. Beuchler bearbeitet, der die TU Chemnitz ebenfalls verlassen hat. Der Ruf von Th. Apel auf eine Professur, die Habilitation von G. Kunert und die Promotion von S. Beuchler bescheinigen dem Projekt eine erfolgreiche Arbeit, die von der bereits abzusehenden Promotion von S. Grosman noch ergänzt wird.

Natürlich gibt es noch offene Fragen. Nach der ersten Arbeit von Gerd Kunert zu anisotropen Fehlerschätzern beim Stokes-Problem sollen weitere Systeme partieller Differentialgleichungen angegangen werden. Dabei ist zunächst an ein singular gestörtes System von zwei partiellen Differentialgleichungen gedacht, von denen eine 2. Ordnung und eine 4. Ordnung ist. Dazu wird Th. Apel einen DFG-Einzelantrag stellen, wobei S. Grosman als Bearbeiter vorgesehen ist.

Interessant ist auch die Erweiterung der Fehlerschätzer für die Navier-Stokes-Gleichungen, da dort ebenfalls anisotrope Randschichten entstehen können. Bei beiden Systemen könnte jedoch die bisherige Herangehensweise an ihre Grenzen stoßen, so dass alternative Methoden untersucht werden sollten.

Weiterhin muss die numerische Validierung der Fehlerschätzer weitergeführt werden, um den Einfluss der Alignment Measures zu belegen.

Teilprojekt

A7

Gebietsadaptierte Wavelets und parallele
Multiskalenmethoden für Randintegraloperatoren

2.1 Teilprojekt A7

Gebietsadaptierte Wavelets und parallele Multiskalenmethoden für Randintegraloperatoren

2.1.1 Antragsteller

| | |
|--|--|
| Prof. Dr. Reinhold Schneider 20.03.1957 Professur Scientific Computing Universität Kiel Christian-Albrechts-Platz 4 24118 Kiel Tel.: (0431) 880-7470 Fax: (0431) 880-4464 rs@numerik.uni-kiel.de | Prof. Dr. Guido Brunnett 22.12.1959 Professur Grafische Datenverarbeitung Fakultät für Informatik Technische Universität Chemnitz 09107 Chemnitz Tel.: (0371) 531-1533 Fax: (0371) 531-1801 guido.brunnett@informatik.tu-chemnitz.de |
|--|--|

2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. Helmut Harbrecht, Fakultät für Mathematik, Technische Universität Chemnitz

Dr. Marek Vanco, Fakultät für Informatik, Technische Universität Chemnitz

Dipl.-Math. Ulf Kähler, Fakultät für Mathematik, Technische Universität Chemnitz

Dipl.-Math. Maharavo Randrianarivony, Fakultät für Informatik, Technische Universität Chemnitz

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Eine Reihe praxisrelevanter Randwertprobleme, wie beispielsweise Außenraumprobleme der Akustik und der Elektrostatik, sowie Randwertprobleme der Elastizitätstheorie und der Strömungsmechanik, lassen sich mittels Randintegralgleichungsmethoden bzw. durch Kombination von Finite-Element- und Randintegralgleichungsmethoden vorteilhaft behandeln. Solche Randintegralmethoden führen jedoch üblicherweise auf vollbesetzte Matrizen. Die Behandlung vollbesetzter großdimensionierter Gleichungssysteme verbietet sich naturgemäß wegen des enormen Bedarfs an Speicherplatz und Rechenzeit. Moderne Ansätze wie das *Panel-Clustering-Verfahren* [HN], die *schnelle Multipolentwicklung* [GR], oder zu diesen verwandte Verfahren wie *\mathcal{H} -Matrizen* [HK] oder die *Adaptive Cross Approximation* [BR], versprechen einen Ausweg aus dieser Situation. Ein weiterer Zugang sind *Multiskalen- oder Waveletapproximationsmethoden* [BCR, S], welche auf der Verwendung von Multiskalenbasen oder biorthogonalen Waveletbasen zur

Diskretisierung der Integralgleichungen beruhen. Die dadurch entstehenden Systemmatrizen sind quasi-dünnbesetzt, d.h. sie lassen sich ohne Verlust an Genauigkeit durch dünnbesetzte Matrizen ersetzen. Zudem können sie leicht vermittels Diagonalskalierung vorkonditioniert werden [DKU].

Die Aufgabenstellung dieses Teilprojektes bestand darin, Wavelet-Galerkin-Verfahren dahingehend weiterzuentwickeln, dass sie sich zur Lösung von Randintegralgleichungen auf komplexen Oberflächen eignen. Dabei sollten sowohl Oberflächen, die aus stückweise glatten Teilflächen bestehen, als auch polygonal approximierte Flächen betrachtet werden. In der letzteren Situation sollte die Wavelet-Konstruktion nach Tausch/White zum Einsatz kommen.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

2.3.1 Weiterentwicklung des Wavelet-Galerkin-Verfahrens für stückweise glatte Oberflächen

Für die Anwendung der Wavelet-Matrixkompression nach Schneider auf Probleme mit komplexen Geometrien war es notwendig, die zum Antragszeitpunkt vorhandenen Methoden in verschiedener Hinsicht weiterzuentwickeln. Dabei wurden insbesondere die folgenden Fragestellungen betrachtet:

- Definition von biorthogonalen Waveletbasen auf Oberflächen,
- Entwicklung geeigneter Kompressionskriterien, die entscheiden, ob ein Matrixkoeffizient benötigt wird,
- Entwicklung geeigneter numerischer Integrationsmethoden zur effizienten Berechnung der benötigten Matrixkoeffizienten,
- Adaptive Lösung der Randintegralgleichungen.

2.3.2 Vorverarbeitung der Geometriedaten

Sollen Integralgleichungen auf realistischen Geometrien gelöst werden, so ist davon auszugehen, dass das geometrische Modell unter Einsatz eines kommerziellen Modellierungswerkzeuges (CAD-System) erstellt wurde und der Export in das System zur Lösung der Integralgleichung (Solver) über ein normiertes Austauschformat erfolgt. Die zentrale Aufgabe bestand in der Realisierung von Softwareprozeduren, die diesen Datentransfer automatisieren und dafür sorgen, dass die exportierten Daten vom Solver auch tatsächlich verarbeitet werden können. Für diese Arbeiten wurde das weitverbreitete Austauschformat IGES (Initial Graphics Exchange Specification) ausgewählt.

Weitere für die Geometrieverarbeitung benötigte Funktionen betreffen die geeignete Diskretisierung der Flächenstücke, die Flächenanpassung an diskrete Daten sowie die Segmentierung der Oberfläche etwa an scharfen Kanten.

2.3.3 Ein Wavelet-Galerkin-Verfahren für polygonale Oberflächen

Verfeinerungsstrategien, wie sie sonst zur Konstruktion von Wavelets verwendet werden, lassen sich auf polygonal approximierten Oberflächen nicht anwenden. Stattdessen kann man durch Vergrößerungsstrategien ebenfalls eine Hierarchie verschiedener Skalen schaffen. In [TAW] wurde eine konkrete Konstruktion angegeben, die die Problematik in beinahe idealer Art und Weise löst. Diese Konstruktion kann auf eine weitgehend beliebig gegebene Diskretisierung angewandt werden und liefert Basisfunktionen mit verschwindenden Multipolmomenten, bzw. solche, die orthogonal auf Polynomen im Raum stehen.

Das Ziel bestand darin, diese Wavelets zu konstruieren und sie als Grundlage für ein Galerkin-Verfahren basierend auf der *Standardform* zu verwenden. Die entstehende Systemmatrix wurde vom Antragsteller R. SCHNEIDER bereits eingehend untersucht [DPS2, DPS3, PS1, S]. Diese Matrix ist im Gegensatz zu den in der Regel vollbesetzten Systemmatrizen von traditionellen Einskalen-Galerkin-Verfahren quasi-dünnbesetzt. Dies bedeutet, dass sie mittels der sogenannten Matrixkompression auf eine dünnbesetzte Matrix komprimiert werden kann, ohne dass es zu Verlusten bei Stabilität oder Konvergenz kommt. Da die benötigten Koeffizienten a-priori bekannt sind, müssen nur die nichtverschwindenden Einträge der Systemmatrix berechnet werden. Das Aufstellen der komprimierten Systemmatrix ist jedoch keineswegs einfach zu bewerkstelligen. Daher war ein großer Teil der Arbeit dem möglichst schnellen und effektiven Berechnen der Systemmatrix gewidmet. Die Fragen der Konvergenz des komprimierten Verfahrens, der Vorkonditionierung, sowie entsprechender Abschätzungen (Approximationseigenschaft und inverse Ungleichung), wie sie für biorthogonale Waveletbasen bekannt und grundlegend sind [D, S], bedurften für diese neuartigen Basisfunktionen ebenfalls noch einer genaueren Untersuchung.

Literaturverzeichnis

- [BCR] G. Beylkin, R. Coifman, and V. Rokhlin. The fast wavelet transform and numerical algorithms. *Comm. Pure and Appl. Math.*, 44:141–183, 1991.
- [BR] M. Bebendorf and S. Rjasanow. Adaptive low-rank approximation of collocation matrices. *Computing*, 70, No.1, 1–24, 2003.
- [CDD1] A. Cohen, W. Dahmen, and R. DeVore. *Adaptive Wavelet Methods for Elliptic Operator Equations – Convergence Rates*, Math. Comp. **70**, 27–75 (2001).
- [CDD2] A. Cohen, W. Dahmen, and R. DeVore. *Adaptive Wavelet Methods II – Beyond the Elliptic Case.*, Found. Comput. Math. **2**, 203–245 (2002).
- [D] A. COHEN, I. DAUBECHIES, J.-C. FEAUVEAU, Biorthogonal bases of compactly supported wavelets, *Pure Appl. Math.*, 45:485–560, 1992.
- [DKU] W. DAHMEN, A. KUNOTH, AND K. URBAN, Biorthogonal spline-wavelets on the interval – stability and moment conditions, *Appl. Comp. Harm. Anal.*, 6:259–302, 1999.
- [DPS2] W. DAHMEN, S. PRÖSSDORF, R. SCHNEIDER, Wavelet approximation methods for periodic pseudodifferential equations. Part 2 - Fast solution and matrix compression, *Advances in Computational Mathematics*, **1**, 259–335, (1993).

- [DPS3] W. DAHMEN, S. PRÖSSDORF, R. SCHNEIDER, Multiscale methods for pseudo-differential equations on smooth manifolds, in: *Proceedings of the International Conference on Wavelets: Theory, Algorithms, and Applications*, C.K. Chui, L. Montefusco, L. Puccio (eds.), *Wavelet Analysis and Applications*, **5**, Academic Press, 385–424, (1994).
- [GR] L. GREENGARD AND V. ROKHLIN, A fast algorithm for particle simulation, *J. Comput. Phys.*, **73**:325–348, 1987.
- [H] H. HARBRECHT, *Wavelet-Galerkin-Schemes for boundary integral equations in three Dimensions*, Dissertation, Technische Universität Chemnitz (2001).
- [HK] W. HACKBUSCH AND B.N. KHOROMSKIJ, A sparse \mathcal{H} -matrix arithmetic, II: Application to multi-dimensional problems, *Computing*, **64**:21–47, 2000.
- [HN] W. HACKBUSCH AND Z.P. NOWAK, On the fast matrix multiplication in the boundary element method by panel clustering, *Numer. Math.*, **54**:463–491, 1989.
- [PS1] T. VON PETERSDORFF, C. SCHWAB, Wavelet approximation of first kind integral equations in a polygon, *Numer. Math.*, **74**, 479–516, (1996).
- [S] R. SCHNEIDER, Multiskalen- und Wavelet-Matrixkompression: Analysisbasierte Methoden zur Lösung großer vollbesetzter Gleichungssysteme, Habilitationsschrift, TH Darmstadt, (1995), *Advances in Numerical Mathematics*, Teubner Stuttgart, (1998).
- [TAW] J. TAUSCH, J. WHITE, Multiscale bases for the sparse representation of boundary integral operators on complex geometries, *SIAM J. Sci. Comput.*, **24**:1610–1629, 2003.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Weiterentwicklung des Wavelet-Galerkin-Verfahrens für stückweise glatte Oberflächen

Die durchgeführten Arbeiten zur Thematik von Waveletbasen auf Oberflächen haben dazu geführt, dass deren Konstruktion im Wesentlichen verstanden und realisiert ist. Unsere Erfahrung zeigt, dass Wavelets mit möglichst kleinem Träger auf die besten Kompressionsergebnisse führen und die Performance des Wavelet-Galerkin-Verfahrens erheblich verbessern. Gegenüber ersten Ansätzen sind gerade hier große Fortschritte erzielt worden: die (vereinfachten) Tensorproduktwavelets vom Typ II und III können durch ein wesentlich kleineres Wavelet (optimiertes Wavelet vom Typ II) ersetzt werden ohne die Multiskalenräume zu verändern, vergleiche Abbildung 2.1. Für weitere Details und Vergleichsrechnungen sei auf [HS3] verwiesen.

Die a-priori Kompressionstrategie, die in [S] entwickelt wurde, ist durch eine zusätzliche a-posteriori Kompressionstrategie ergänzt worden [DHS]. Wie numerische Ergebnisse belegen [DHS, HS1, HS4], verbessert diese die Wavelet-Matrixkompression zusätzlich um einen Faktor 2–4. Um die Effizienz des Verfahrens kurz darzustellen, führen wir beispielhaft die numerischen Ergebnisse für die Einfachschichtgleichung des Laplace [DHS]

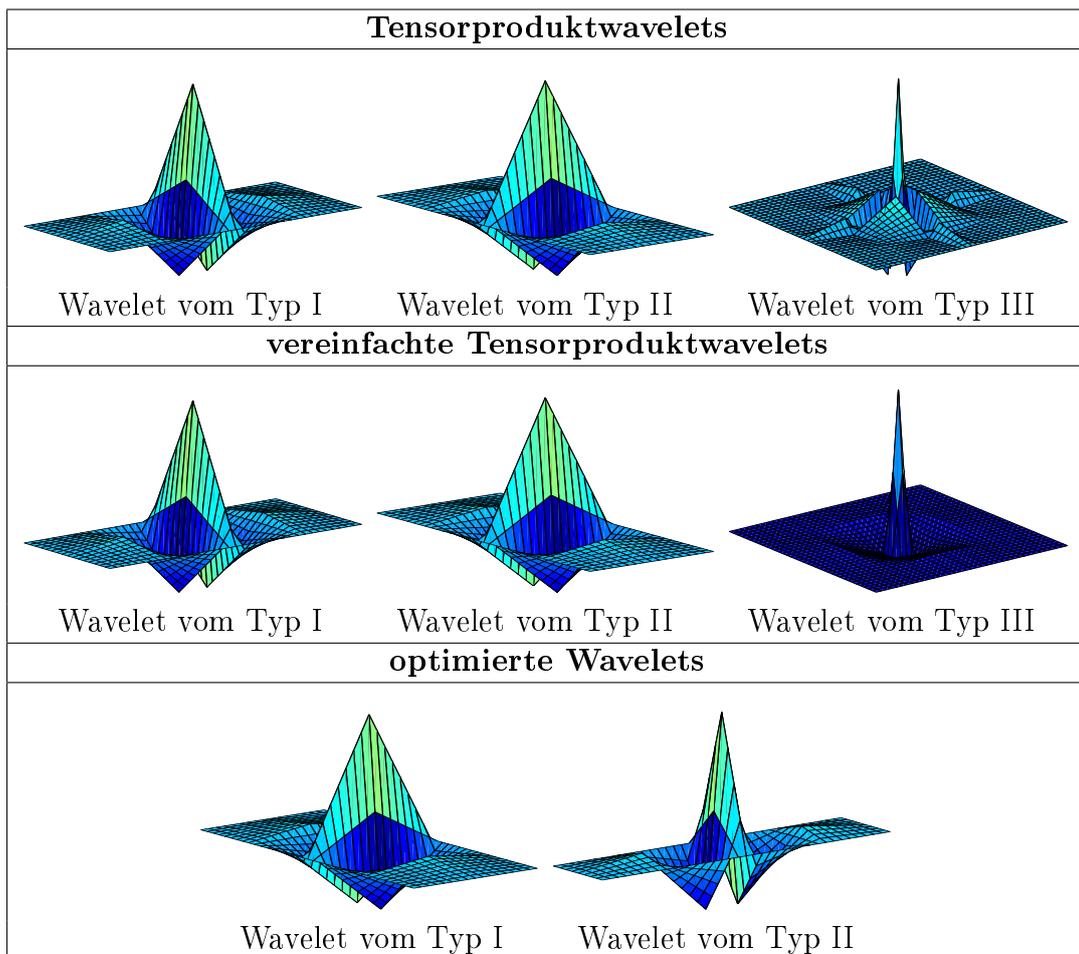


Abb. 2.1: Übersicht zur Konstruktion der stückweise bilinearen Wavelets mit vier verschwindenden Momenten.

kurz auf: Auf einer Kugel (parametrisiert via 6 Patches) bzw. einer Kurbelwelle (parametrisiert via 142 Patches, vergleiche auch Abbildung 2.3) sind pro Zeile im Durchschnitt nur 254 bzw. 406 Einträge a-priori relevant. A-posteriori reduziert sich deren Zahl sogar auf 130 bzw. 139 relevante Einträge, ohne die Genauigkeit des Galerkin Verfahrens zu beeinträchtigen. Diese Ergebnisse wurden erzielt im Falle von 1.6 bzw. 2.3 Mio. Unbekannten. Abbildung 2.2 visualisiert zusätzlich in beiden genannten Fällen das asymptotische Verhalten der Kompressionsstrategie. Uns ist bislang kein Verfahren bekannt, das bei Randintegralgleichungen hinsichtlich der Kompression eine vergleichbare Datenreduktion bietet.

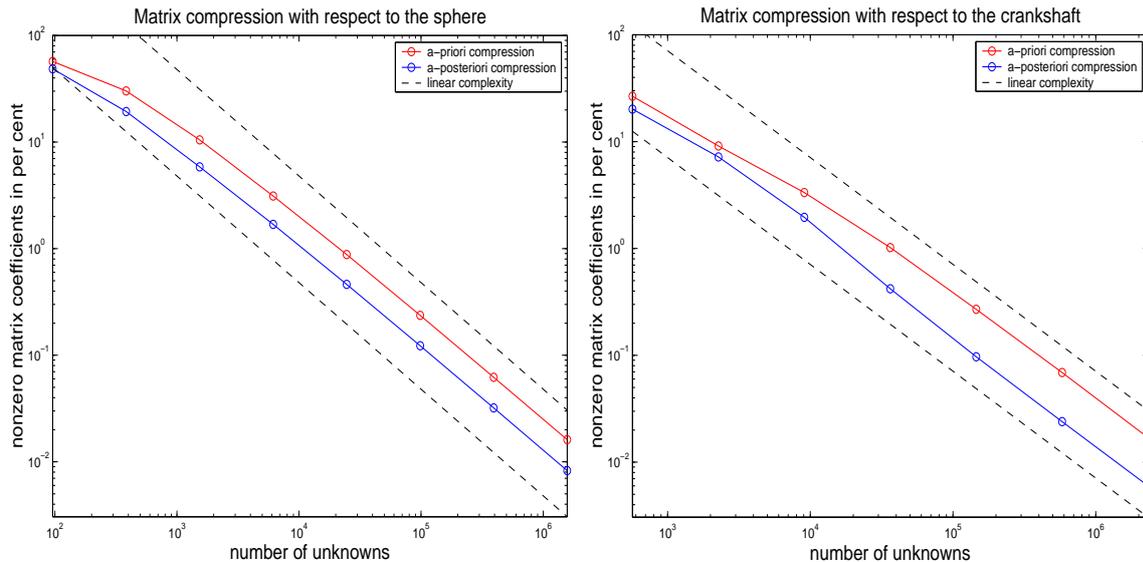


Abb. 2.2: Kompressionsraten bezüglich der Einheitssphäre und einer Kurbelwelle.

Der größte Anteil an Rechenzeit wird nach wie vor zur Berechnung der relevanten Matrixeinträge benötigt, das heißt für die numerische Quadratur. Zwar ist es inzwischen verstanden, dass theoretisch jede exponentiell konvergente hp -Quadratur auf eine insgesamt lineare Komplexität führt, jedoch wird in unseren Beispielen diese Asymptotik noch nicht erreicht. Hinsichtlich der Berechnung der Matrixkoeffizienten sehen wir noch Verbesserungsbedarf. Die aktuelle Realisierung basiert auf Tensorprodukt-Gauß-Legendre-Quadraturformeln kombiniert mit dem Duffy-Trick für die auftretenden singulären Integrale [DHS, HS5]. Die in [BDDMK] untersuchten Alternativen scheinen allerdings keinen großen Leistungssprung zu ermöglichen. Es sei allerdings auch angemerkt, dass wir seit den ersten Ergebnissen in [S] bis heute unser Verfahren durch algorithmische und mathematische Verbesserungen (die verbesserte Rechentechnik ist hierbei ausgeklammert) um einen Faktor 40–50 beschleunigt haben.

Die Vorkonditionierung der Systemmatrizen von Operatoren positiver oder negativer Ordnung ist mit Wavelets aufgrund der Normäquivalenzen einfach durch eine Diagonalskalierung durchführbar. Eine Verbesserung dieser zwar asymptotisch optimalen, praktisch aber oftmals unzufriedenstellenden Vorkonditionierung ist in [HS4] vorgeschlagen worden. Es darf an dieser Stelle auch auf [BSS] hingewiesen werden, in dem vermittelt Waveletbasen sogar degenerierte elliptische Operatoren erfolgreich vorkonditioniert

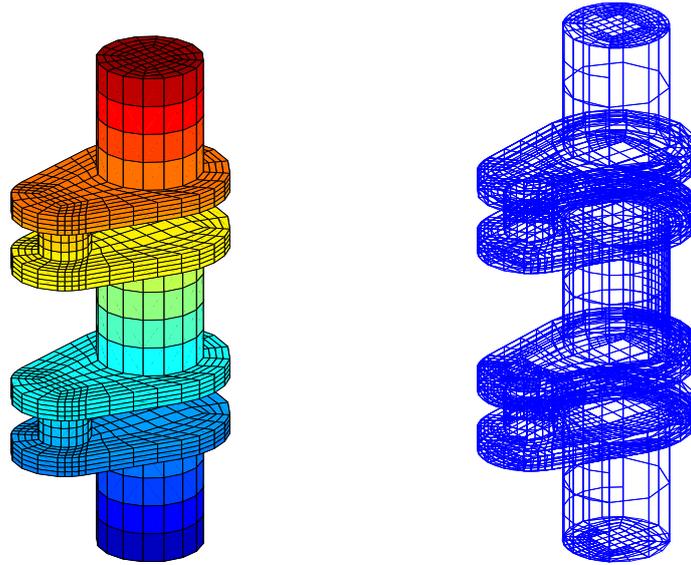


Abb. 2.3: Parametrische Darstellung der Kurbelwelle und adaptive Netzverfeinerung.

worden sind. Mit Hilfe der Normäquivalenzen konnte auch ein modifiziertes Verfahren zur Regularisierung schlecht gestellter oder inverser Probleme entwickelt werden. Hierzu muss die Regularität der Lösung a-priori nicht bekannt sein. Eine quasi-optimale Lösung kann durch eine Selbstregularisierung für Operatoren negativer Ordnung gefunden werden [HPS]. Zur effizienten Berechnung kann ein Wavelet-Matrixkompressionsverfahren vorteilhaft angewendet werden.

Erste Fortschritte bei der Umsetzung eines adaptiven Wavelet-Galerkin-Verfahrens wurden in [HS2, HS4] erzielt. Im Vergleich zum nichtadaptiven Verfahren wird bei weitaus geringerem Aufwand die gleiche Genauigkeit erzielt. Allerdings benötigt der Konvergenzbeweis bisher noch die Saturationsannahme und die Optimalität des Verfahrens ist nicht sichergestellt. An einer Einarbeitung der neueren Entwicklungen von [CDD1, CDD2] wird derzeit gearbeitet. Eine adaptive Netzverfeinerung bezüglich der Kurbelwelle ist in Abbildung 2.3 (rechts) dargestellt.

Erwähnenswert ist ebenfalls die (Least-Squares-) Kopplung von Finiten Elementen und Wavelet-Randelementen, die theoretisch grundlegend untersucht und zumindest in 2D auch realisiert worden ist [HPPS1, HPPS2, GHS]. Eine Realisierung in 3D ist langfristig geplant.

Erfolgreich wird das vorliegende Wavelet-Galerkin-Verfahren zur Shape-Optimierung angewandt [EH1, EH2, EH3, EH4, EH5], bei der zur Gradienten- und Hessiansberechnung Dirichlet- oder Neumann-Daten und für Verfahren zweiter Ordnung sogar noch höhere Ableitungen der Zustandsgleichung effizient berechnet werden müssen.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass die Multiskalendiskretisierung von 2D und 3D Randwertproblemen durchgeführt wurde. Die Ergebnisse spiegeln die theoretischen Resultate wider und zeigen, dass für stückweise parametrische Geometriedarstellungen mit bis zu 1000 einzelnen Patches ein sehr leistungsfähiges Wavelet-Galerkin-Verfahren entstanden ist, das eine wesentliche Einsparung an Speicherplatz und Rechenzeit erbringt.

2.4.2 Vorverarbeitung der Geometriedaten

Die zentrale Aufgabe der Geometrievorverarbeitung besteht darin, eine im IGES-Format spezifizierte Oberflächenbeschreibung so aufzubereiten, dass das System zur Lösung der Integralgleichung (Solver) auf die Flächenelemente direkt zugreifen kann. Nach der Analyse der Struktur eines IGES-Files wurden Routinen erstellt, die aus einem beliebigen IGES-File die relevanten Daten extrahieren (Anzahl und Art der vorhandenen Flächenstücke und ihre Randkurven, spezifizierende Daten der Parametrisierung) und dem Solver zuführen. Für alle 30 Elemente der Entity Class „Curve and Surface Geometry“ wurden Auswertungsprozeduren erzeugt, die für einen Punkt im Parametergebiet der Fläche (Kurve) den zugehörigen Flächenpunkt (Kurvenpunkt) und die zugehörigen Ableitungen zurückliefern (Beispiel: de-Boor-Algorithmus für B-Spline-Flächen). Damit kann der Solver die durch IGES spezifizierte Geometrie grundsätzlich in vollem Umfang verarbeiten.

Eine besondere Schwierigkeit bei der Realisierung dieser Arbeit stellte die Behandlung der „Trimmed Surface Entity“ (Entity Type 144) dar. Bei einer getrimmten Fläche handelt es sich um eine beliebige Flächenparametrisierung über einem Standardparametergebiet, wobei durch Angabe geschlossener Kurven innerhalb des Parametergebietes gewisse Bereiche als „ungültig“ erklärt sind. Die IGES-Spezifikation erlaubt eine beliebige Anzahl derartiger Begrenzungskurven unter der Voraussetzung, dass sie keine Doppelpunkte besitzen, sich gegenseitig nicht schneiden und ihr Inneres paarweise disjunkt ist. In CAD Konstruktionen kommen getrimmte Flächen als Resultat von Flächenverschneidungen oder Blendingoperationen sehr häufig vor.

Da die Waveletkonstruktion von Schneider das Vorliegen des Standardparametergebietes $[0, 1]^2$ annimmt, ist es notwendig, das Parametergebiet einer getrimmten Fläche in Teile zu zerlegen, die sich diffeomorph auf das Einheitsquadrat abbilden lassen. Das von uns entwickelte Verfahren vollzieht sich in einer Zerlegungs- und einer Konstruktionsphase [RBS].

In der Zerlegungsphase werden die Randkurven des Parametergebietes zunächst diskretisiert. Das dadurch entstandene mehrfach zusammenhängende Polygon wird dann in mehreren Schritten zunächst in eine Menge von einfach zusammenhängenden Polygonen, dann in eine Menge konvexer Polygone und schließlich in eine Menge vierseitiger Polygone zerlegt. Dabei ist darauf zu achten, dass die Zerlegung so erfolgt, dass die nachfolgende Ersetzung der Polygonseiten durch die entsprechenden Abschnitte der ursprünglichen gekrümmten Kurven in korrekter Weise möglich wird.

In der Konstruktionsphase wird mit Hilfe eines transfiniten Interpolationsschemas für jedes vierseitige Teilgebiet (mit gekrümmten Randkurven) ein Diffeomorphismus auf das Einheitsquadrat generiert. Dabei ist es unter Umständen notwendig, das vierseitige Teilgebiet weiter zu zerlegen, um zu garantieren, dass die erzeugte Abbildung tatsächlich ein Diffeomorphismus ist. Für den wichtigen Spezialfall von Randkurven, die in Bezierdarstellung gegeben sind, wurden zu diesem Zweck notwendige und hinreichende Bedingungen für die zulässige Lage der Bezierpunkte abgeleitet [RaB5].

Zu den benötigten Funktionen der Geometrieverarbeitung gehört darüber hinaus ein Werkzeug zur Diskretisierung der Oberflächen. In [RaB1] berichteten wir über die Ent-

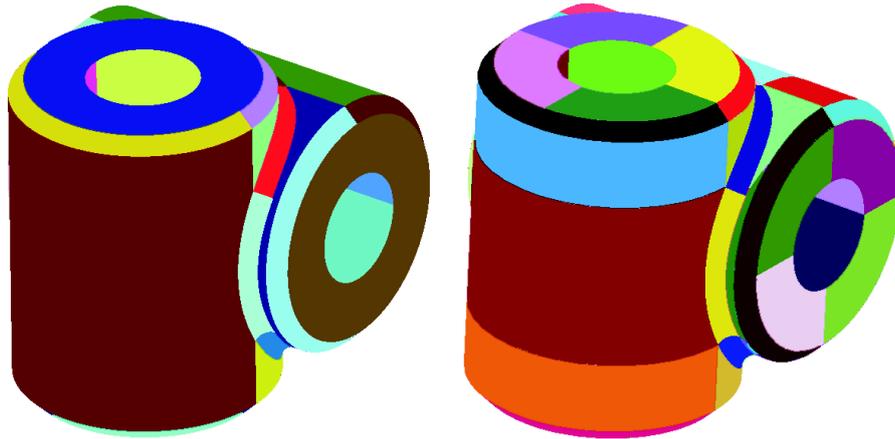


Abb. 2.4: Zerlegung in vierseitige Teilgebiete

wicklung einer derartigen Funktion, die für beliebige im IGES-Format spezifizierte Flächenverbände ein konsistentes Dreiecksnetz mit Fehlerkontrolle erzeugt. Hierbei wird zunächst jede Teilfläche unter Einsatz der Delaunay-Triangulierung in Dreiecke zerlegt. Jedes dieser Ausgangsnetze wird anschließend unter Einsatz einer lokalen Fehlerfunktion verfeinert. Im abschließenden Schritt werden die einzelnen Netze zu einem konsistenten Netz verschmolzen.

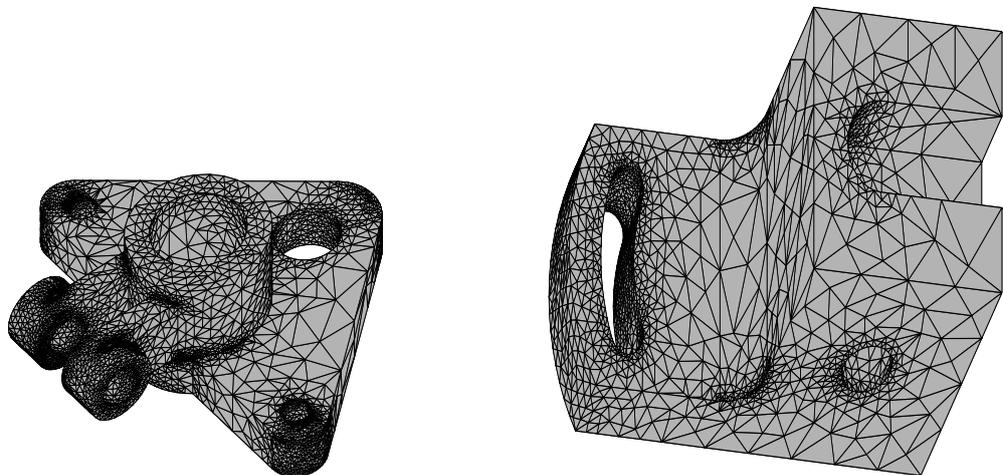


Abb. 2.5: Automatische Netzgenerierung für Oberflächen

Für sehr komplexe Modelle wird eine akzeptable Laufzeit des Verfahrens zur Lösung der Integralgleichung nur durch eine Simplifizierung der Oberflächenbeschreibung zu erzielen sein. Eine derartige Vereinfachung wird auf der Anpassung von Flächenstücken an diskrete Daten, die von der Oberfläche der Originalgeometrie gewonnen wurden, basieren. Es wurde deshalb ein Verfahren zur Anpassung von NURBS-Flächen an diskrete Daten realisiert, bei dem die Knoten der Splinedarstellung als freie Parameter betrachtet

werden [RaB2]. Aufgrund des hohen Bedarfs an Rechenzeit wurde in [RaB3, RaB4] eine parallele Implementierung dieser Methode mit Lastbalancierung vorgestellt.

Besitzt das zu approximierende Objekt scharfe Kanten, so ist es notwendig den Verlauf dieser Kanten zu detektieren, bevor eine Flächenanpassung durchgeführt werden kann. Hierzu wurde in [RaBr] ein Verfahren vorgestellt, das unter Einsatz von Waveletfunktionen Kantenverläufe in diskreten Daten detektiert.

2.4.3 Ein Wavelet-Galerkin-Verfahren für polygonale Oberflächen

Ausgangspunkt der Betrachtungen ist die Geometrie, gegeben als stückweise linear approximierende Oberfläche. Sowohl zur Konstruktion der Wavelets als auch zur Umsetzung des Konzeptes hierarchischer Matrizen und der Multipol-Methode wird eine hierarchische Unterteilung der polygonal gegebenen Oberfläche benötigt, der so genannte Clusterbaum. Zur Generierung des Clusterbaums wurde sowohl eine hierarchische räumliche Unterteilung als auch eine weitere Strategie realisiert, die auf der Zusammenfassung benachbarter Elemente in den Knoten des Baums beruht.

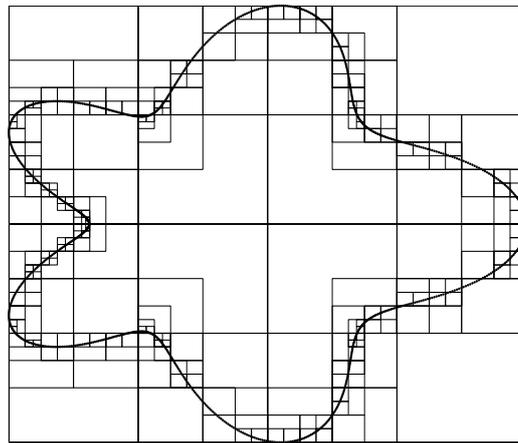


Abb. 2.6: Hierarchische Unterteilung des 'Orbitals'

Basierend auf der hierarchischen Unterteilung (Abbildung 2.6) lassen sich die Wavelets nach J. TAUSCH UND J. WHITE [TAW], die orthogonal auf den Spuren von Polygonen im Raum stehen, rekursiv aus stückweise konstanten bzw. stückweise linearen Ansatzfunktionen erzeugen. Bei dieser Vergrößerungsstrategie entstehen in jedem Rekursionsschritt Waveletfunktionen sowie Skalierungsfunktionen (Abbildung 2.7), die zur Erzeugung von Wavelets auf dem gröberen Level weiterverwendet werden.

Die jeweiligen Multiwavelets spalten sich dabei erst durch die Singulärwertzerlegung lokaler Momentenmatrizen ab. Dieses Prinzip wurde in der Diplomarbeit von T. WEBER [Webe] durch Verwendung von einfachen QR-Zerlegungen verbessert, da die neuen Waveletfunktionen sogar eine ansteigende Anzahl von verschwindenden Multipolmomenten besitzen.

Die so entstandene Multiwaveletbasis (Abbildung 2.8) wurde als Grundlage für ein Galerkin-Verfahren verwendet. Stellvertretend für verschiedene Randintegralgleichungen rea-

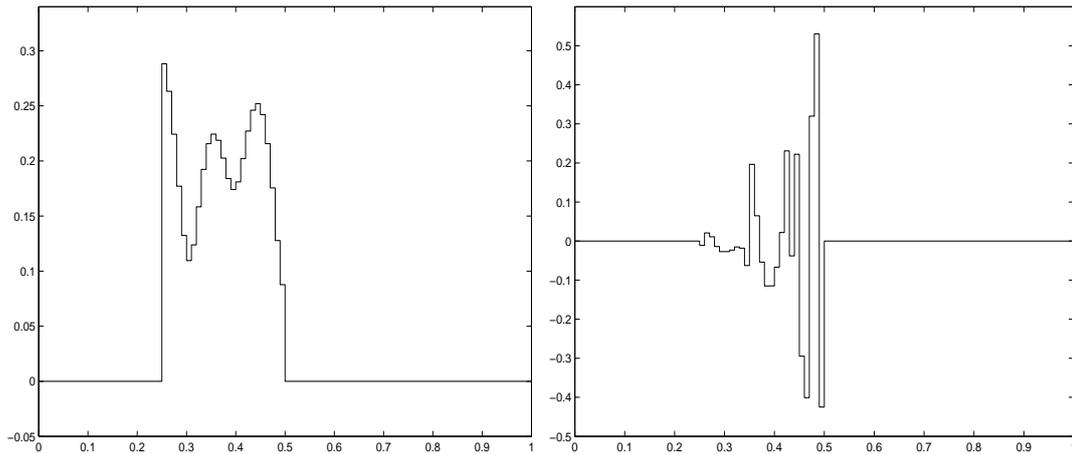


Abb. 2.7: Skalierungs- (links) und Waveletfunktion (rechts) für das in Abbildung 2.6 dargestellte Orbital

lisierte U. KÄHLER [Käh] das Wavelet-Galerkin-Verfahren für die indirekte Formulierung zur Lösung der Laplace-Gleichung. Dazu wurden das Einfachschicht- und das Doppelschichtpotential in 2 Raumdimensionen umgesetzt.

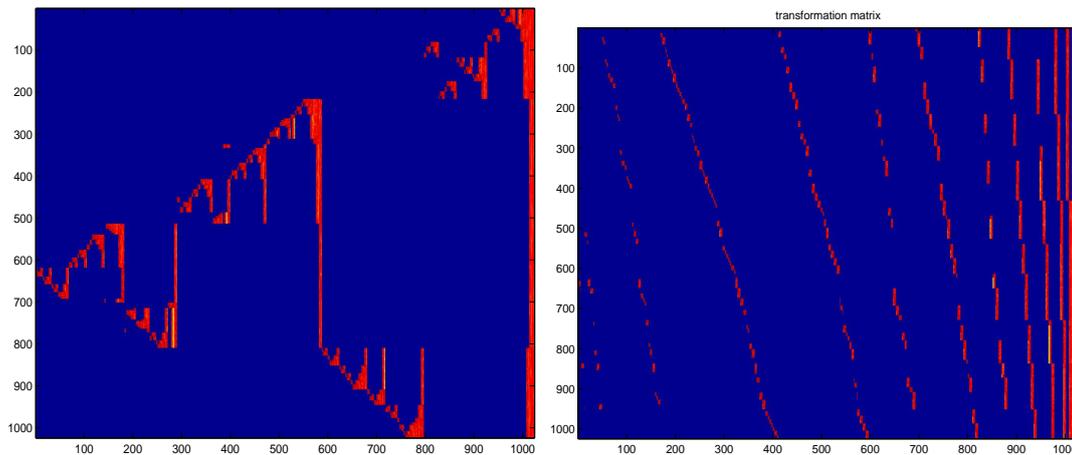


Abb. 2.8: Koeffizientenmatrix der Wavelets in rekursiver (links) bzw. nach Leveln geordneter Struktur (rechts)

Dabei werden mittels der a-priori-Kompression [HS4] die zu berechnenden Einträge der Systemmatrix bestimmt und anschließend mit Hilfe einer Reihenentwicklung analog zur Fast-Multipole-Methode berechnet. Zur effizienten Bestimmung der benötigten Polynomgrade dieser Reihen wurde ein a-posteriori-Fehlerkriterium verwendet, das H. HARBRECHT in seiner Dissertation [H] entwickelt hat. Es ist zu beachten, dass im Gegensatz zu anderen schnellen Verfahren die Systemmatrix explizit aufgestellt wird (Abbildung 2.9). Sie benötigt jedoch durch ihre dünnbesetzte Struktur (Abbildung 2.10) bei weitem nicht den Speicherplatz der Systemmatrix eines klassischen Einskalen-Verfahrens.

Die für dieses Verfahren notwendigen Untersuchungen der verwendeten Wavelets hin-

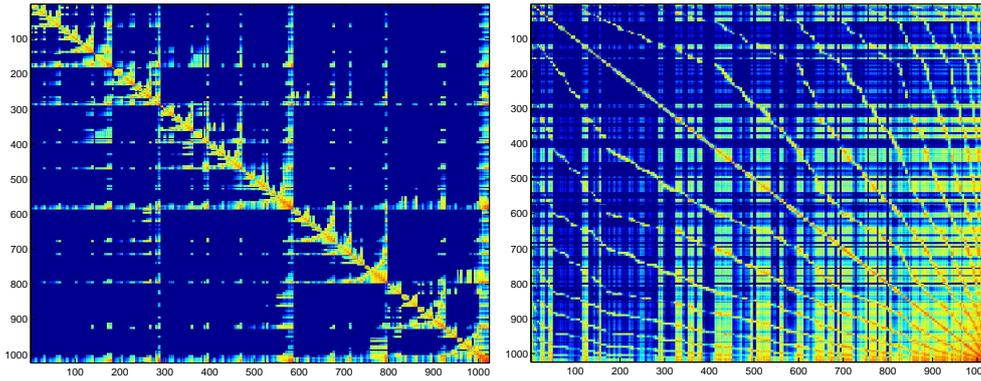


Abb. 2.9: Systemmatrix des Wavelet-Galerkin-Schemas in rekursiver (links) bzw. Fingerstruktur (rechts)

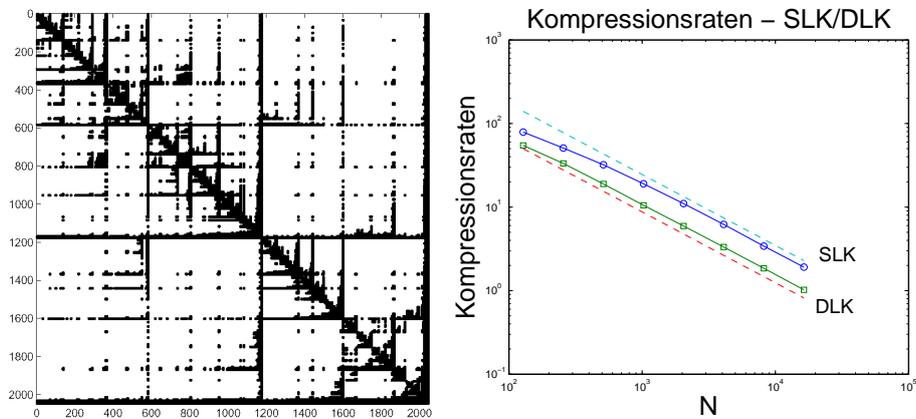


Abb. 2.10: Verteilung der nichtverschwindenden Einträge innerhalb der Systemmatrix (links) und die zugehörigen Kompressionsraten bzgl. des Einfachschicht- und des Doppelschichtpotentials (rechts)

sichtlich der Approximationseigenschaft und der inversen Ungleichung wurde in [HKS2] für beliebig viele Raumdimensionen durchgeführt. Es konnten hier aber auch die in [Käh] gemachten Aufwandsabschätzungen auf den allgemeinen n -dimensionalen Fall ausgeweitet werden.

Da zur Bestimmung der Systemmatrixeinträge bereits Teile des Fast-Multipole-Verfahrens verwendet wurden, war es naheliegend das Wavelet-Verfahren mit dem klassischen Einskalen-Verfahren und dem Multipol-Verfahren zu vergleichen. Die numerischen Ergebnisse zeigen die Konkurrenzfähigkeit des Wavelet-Galerkin-Verfahrens mit anderen schnellen Verfahren und lassen die Nach- und Vorteile des Verfahrens erkennen.

In Abbildung 2.11 erkennt man die asymptotische Unterlegenheit des klassischen Einskalen-Verfahrens gegenüber den anderen beiden Verfahren. Die Abbildung zeigt aber auch, dass das Wavelet-Verfahren in der gegenwärtigen Implementierung noch etwa um den Faktor drei langsamer ist als das Fast-Multipole-Verfahren. Die Ursache dafür liegt in der Verwendung der Multipole-Methode innerhalb des Wavelet-Verfahrens. Abbil-

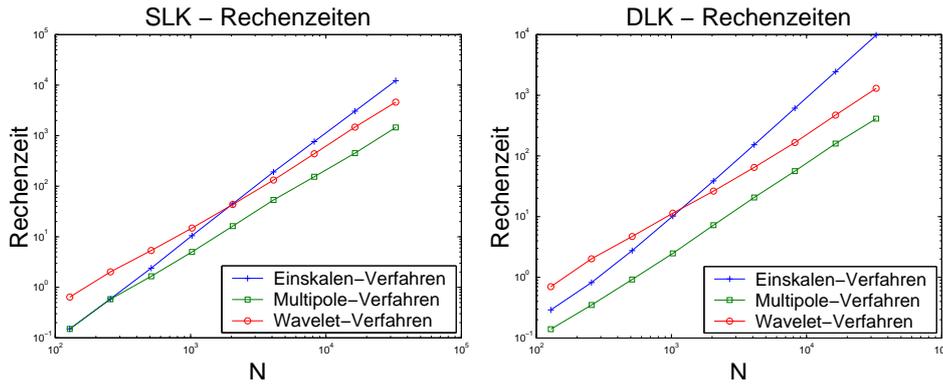


Abb. 2.11: Vergleich der Rechenzeiten des klassischen Einskalen-Verfahrens, des Multipol-Verfahrens und des Wavelet-Galerkin-Verfahrens für das Einfachschicht- (links) bzw. Doppelschichtpotential (rechts)

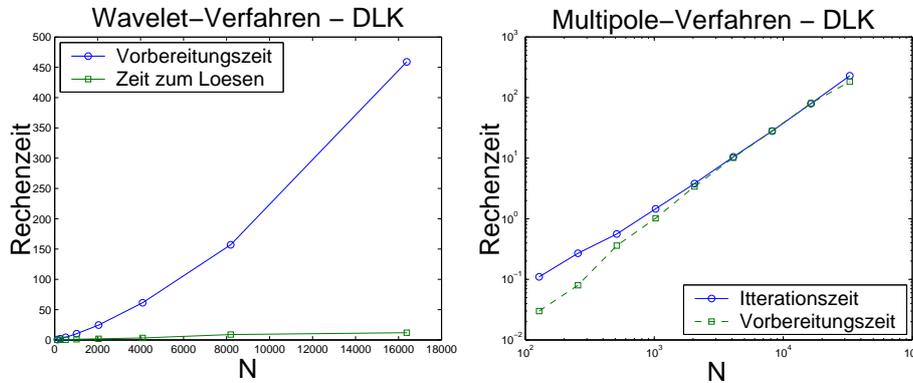


Abb. 2.12: Vergleich der Rechenzeiten zum Aufstellen der Systemmatrix und des anschließenden Lösen des entstandenen Gleichungssystems im Fall des Wavelet-Galerkin-Verfahrens (links) und Vergleich der Vorbereitungs- und der Iterationsphase im Fall der Fast-Multipole-Methode (rechts) für das Doppelschichtpotential

Abb. 2.12 illustriert die Vorteile des Wavelet-Galerkin-Verfahrens im Hinblick auf das Lösen von Randintegralgleichungen mit verschiedenen rechten Seiten. Da beim Wavelet-Verfahren für jede neue rechte Seite nur ein dünnbesetztes Gleichungssystem gelöst werden muss, ist der Mehraufwand verschwindend gering. Beim Multipol-Verfahren wird dagegen, ähnlich wie bei anderen schnellen Verfahren, für jede neue rechte Seite die Iterationsphase erneut durchlaufen. Hierbei ist zusätzlich zu beachten, dass beim Multipolverfahren die für die Iterationsphase benötigte Rechenzeit stark abhängig ist von der Konditionierung des Problems.

Neuentstandene Literatur

- [BDDMK] A. BARINKA, T. BARSCH, S. DAHLKE, M. MOMMER, M. KONIK, *Quadrature formulas for refinable functions and wavelets, II. Error analysis*, J. Comput. Anal. Appl. **4**, 339–361, 2002.
- [BSS] S. BEUHLER, R. SCHNEIDER, C. SCHWAB, *Multiresolution weighted norm equivalences and applications*, Preprint SFB393/02-09, TU Chemnitz, 2002 (erscheint in Num. Math.).
- [DHS] W. DAHMEN, H. HARBRECHT, R. SCHNEIDER, *Compression Techniques for Boundary Integral Equations – Optimal Complexity Estimates*, Preprint SFB393/02-06, TU Chemnitz, 2002 (eingereicht bei SINUM).
- [EH1] K. EPPLER, H. HARBRECHT, *Numerical Solution of Elliptic Shape Optimization Problems using wavelet-based BEM*, Optim. Methods Softw. **18**, No. 1, 105–123, 2003.
- [EH2] K. EPPLER, H. HARBRECHT, *2nd Order Shape Optimization using Wavelet BEM*, Technical Report 06-2003, Preprint Series of the Institute of Mathematics, TU Berlin, 2003 (eingereicht bei Optim. Methods Softw.).
- [EH3] K. EPPLER, H. HARBRECHT, *Exterior Electromagnetic Shaping using Wavelet BEM*, Technical Report 13-2003, Preprint Series of the Institute of Mathematics, TU Berlin, 2003 (eingereicht bei Math. Meth. Appl. Sci.).
- [EH4] K. EPPLER, H. HARBRECHT, *Second order Lagrange multiplier approximation for constrained shape optimization problems*, Technical Report 35-2003, Preprint Series of the Institute of Mathematics, TU Berlin, 2003. (erscheint in Proceedings of 21. IFIP TC 7 Conference on system modeling and optimization).
- [EH5] K. EPPLER, H. HARBRECHT, *Fast wavelet BEM for 3d electromagnetic shaping*, Bericht 03-9, Berichtreihe des Mathematischen Seminars der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, 2003, (erscheint bei Appl. Numer. Math.).
- [HKS] H. HARBRECHT, M. KONIK, R. SCHNEIDER, *Fully Discrete Wavelet Galerkin Schemes*, Engineering Analysis with Boundary Elements **27**, 423–437, 2003.
- [HKS2] H. HARBRECHT, U. KÄHLER, R. SCHNEIDER, *Wavelet Galerkin BEM on unstructured meshes*, Preprint SFB393/04-06, 2004.
- [HPPS1] H. HARBRECHT, F. PAIVA, C. PÉREZ, R. SCHNEIDER, *Biorthogonal wavelet approximation for the coupling of FEM-BEM*, Num. Math. **92**, 325–356, 2002.
- [HPPS2] H. HARBRECHT, F. PAIVA, C. PÉREZ, R. SCHNEIDER, *Multiscale preconditioning for the coupling of FEM-BEM*, Num. Lin. Alg. Appl. **10**, 197–222, 2003.
- [HPS] H. HARBRECHT, S. PEREVERZEV, R. SCHNEIDER, *Self-regularization by projection for noisy pseudodifferential equations of negative order*, Numer. Math. **95**, 123–143, 2003.
- [HS1] H. HARBRECHT, R. SCHNEIDER, *Wavelets for the Fast Solution of Boundary Integral Equations*, Proceedings of the Fifth World Congress on Computational Mechanics (WCCM V), July 7-12, 2002, Vienna, Austria, Editors: Mang, H.A.; Rammerstorfer, F.G.; Eberhardsteiner, J., Publisher: Vienna University of Technology, Austria, (nichtreferierter Tagungsbeitrag).

- [HS2] H. HARBRECHT, R. SCHNEIDER, *Adaptive Wavelet Galerkin BEM*, in *Computational Fluid and Solid Mechanics 2003*, vol. 2, edited by K.J. Bathe, Elsevier, 1982–1986, 2003.
- [HS3] H. HARBRECHT, R. SCHNEIDER, *Biorthogonal wavelet bases for the boundary element method*, Preprint SFB393/03-10, TU Chemnitz, 2003 (erscheint in Mathematische Nachrichten).
- [HS4] H. HARBRECHT, R. SCHNEIDER, *Wavelet based fast solution of boundary integral equations*, Preprint SFB393/03-07, TU Chemnitz, 2003 (erscheint in Proceedings of the International Conference on Abstract and Applied Analysis (ICAAA 2002)).
- [HS5] H. HARBRECHT, R. SCHNEIDER, *Wavelet Galerkin Schemes for Boundary Integral Equations – Implementation and Quadrature*, Preprint SFB393/02-21, TU Chemnitz, 2002 (eingereicht bei SISC).
- [GHS] G.N. GATICA, H. HARBRECHT, R. SCHNEIDER, *Least squares methods for the coupling of FEM and BEM*, SINUM **41**, 1974–1995, 2003.
- [Käh] U. KÄHLER, *Waveletbasierte Matrixkompression für Randintegralgleichungen auf komplizierten Oberflächen*, Diplomarbeit, TU Chemnitz, 2003.
- [RaBr] M. RANDRIANARIVONY, G. BRUNETT, *A multiresolution method for detecting higher order discontinuities from irregular noisy samples*, Proceeding Conference on curve and surface fitting, Saint-Malo, Nashboro Press, 333-342, ISBN: 0-9728482-1-5, 2003.
- [RaB1] M. RANDRIANARIVONY, G. BRUNETT, *Generating well behaved meshes for parameterized surfaces*, Proceeding Conference on Geometric Modeling and Graphics, London, IEEE Computer Society, 56-61, ISBN: 0-7695-1985-7, 2000).
- [RaB2] M. RANDRIANARIVONY, G. BRUNETT, *Approximation by NURBS curves with free Knots*, Proc. Vision, Modeling and Visualization 2002, Akademischer Verlagsgesellschaft, 195-201, ISBN: 3-89838-034-3, 2002.
- [RaB3] M. RANDRIANARIVONY, G. BRUNETT, *Parallel implementation of curve reconstruction from noisy samples*, Preprint Sonderforschungsbereich 393, SFB393/02-15, 2002.
- [RaB4] M. RANDRIANARIVONY, G. BRUNETT, *Parallel implementation of surface reconstruction from noisy samples*, Preprint Sonderforschungsbereich 393, SFB393/02-16, 2002.
- [RaB5] M. RANDRIANARIVONY, G. BRUNETT, *Necessary and sufficient conditions for the regularity of a planar Coons map*, Preprint Sonderforschungsbereich 393, SFB393/04-07, 2004.
- [RBS] M. RANDRIANARIVONY, G. BRUNETT, R. SCHNEIDER, *Constructing a diffeomorphism between a trimmed domain and the unit square*, Sonderforschungsbereich 393, Preprint SFB393/03-20, (2003), Eingereicht zur Veröffentlichung Conf. on Mathematical Methods for Curves and Surfaces, Tromso, 2004.
- [Webe] T. WEBER, *Multiwavelet Packets*, Diplomarbeit, TU Chemnitz, 2003.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Ein augenblicklich aktives Forschungsfeld ist die Einarbeitung der Ideen und Entwicklungen von [CDD1, CDD2] in den bisher vorhandenen adaptiven Algorithmus für stückweise glatte Oberflächen. Realisiert werden soll ein effizienter adaptiver Algorithmus, der ohne Saturationsannahme mit optimaler Komplexität die beste n -Term Approximation an die Lösung einer Randintegralgleichung berechnet. Gerade hierfür ist die Beschreibung von Geometrien mit Hilfe von CAD-Programmen hilfreich und ermöglicht die Behandlung praxisrelevanter Probleme.

Aus dem Prinzip der separaten Verarbeitung der Teilflächen ergibt sich, dass die Anwendbarkeit des Verfahrens abhängig ist von der Anzahl gegebener Patches. Für sehr komplexe Modelle wird eine akzeptable Laufzeit des Verfahrens nur durch eine Simplifizierung der Oberflächenbeschreibung zu erzielen sein. Es ist deshalb geplant ein Clusterverfahren zu entwickeln, das abhängig von anwendungsrelevanten Parametern eine Reduzierung der Teilflächenanzahl durch Zusammenfassung von Patches durchführt.

Ferner wird an der Realisierung des Wavelet-Galerkin-Verfahrens zur Lösung weiterer Gleichungen gearbeitet, wie zum Beispiel der Helmholtz-Gleichung. Eine ebenfalls sehr interessante Aufgabenstellung ist die schnelle Lösung der Radiosity-Gleichung. Hierbei ist allerdings die effiziente Umsetzung der Sichtbarkeitsfunktion eine nichttriviale Aufgabe.

Der Ansatz von J. Tausch und J. White ist bisher nur für geschlossene Oberflächen formuliert worden. Deshalb soll das Verfahren so modifiziert werden, dass es für beliebige Flächenverbände einsetzbar wird. Aus der vorliegenden 2D-Implementierung des Verfahrens ist bekannt, dass eine Clusterbildung, die auf Zusammenfassung benachbarter Elemente beruht, der hierarchischen räumlichen Unterteilung überlegen ist. Deshalb soll als Alternative zur hierarchischen Raumunterteilung eine Clusterstrategie entwickelt werden, die das Prinzip der Zusammenfassung von Nachbarelementen auf die Oberflächensituation verallgemeinert.

Wir erwarten eine Reduzierung der Rechenzeit durch eine Berücksichtigung der verschwindenden Multipolmomente der Wavelets aus [Webe] bei der Reihenentwicklung der verwendeten Fast-Multipole-Methode. Durch diesen reduzierten Entwicklungsaufwand könnte das Wavelet-Verfahren im Falle dreier Raumdimensionen auch weniger Rechenzeit benötigen als das schon deutlich gründlicher erforschte Multipol-Verfahren. Im Anschluss an die sequentielle Realisierung des Tausch/White-Verfahrens in 3D ist die parallele Implementierung dieses Verfahrens vorgesehen.

Teilprojekt

A11

Gemischte Formulierungen: adaptive anisotrope finite
Elemente und parallele Löser

2.1 Teilprojekt A11

Gemischte Formulierungen: adaptive anisotrope finite Elemente und parallele Löser

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Arnd Meyer, TU Chemnitz, Professur Numerische Analysis

PD Dr. Thomas Apel, TU Chemnitz, an Professur Numerische Analysis

Thomas Apel ist Ende 2003 ausgeschieden, da er eine Professur an der Universität der Bundeswehr München angenommen hat.

2.1.2 Projektbearbeiter

PD Dr. Gerd Kunert, Professur Wissenschaftliches Rechnen (bis September 2003)

M.Sc. Sviatoslav Derezin, Professur Numerische Analysis

M.Sc. Alexander Smuglyakov (ab April 2002), Professur Numerische Analysis

Dipl.-Math. Peter Steinhorst (ab Okt. 2003), Professur Numerische Analysis

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Gegenstand dieses Teilprojekts sind gemischte Finite-Elemente-Diskretisierungen für das Stokes- und das Reissner-Mindlin-Problem. Wir hatten uns zum Ziel gestellt, effiziente Simulationssoftware zu entwickeln, die auf theoretisch fundierten effizienten, d. h. adaptiven und lösungsangepassten, parallelen Lösungsstrategien beruht.

Bei der Simulation der Strömung viskoser Fluide entstehen Lösungen mit anisotropem Verhalten durch Kantensingularitäten oder Randschichten. Lösungsangepasste Diskretisierungen sind folglich auch *anisotrop*. Unser Ziel bestand darin, Elementepaare auf deren Eignung bei Diskretisierungen auf anisotropen Netzen zu untersuchen und *a posteriori* Fehlerschätzer für das Stokes-Problem mit anisotropen Netzen herzuleiten.

Die numerische Berechnung der Verformung von Platten und Schalen wurde im SFB 393 bisher mit den symmetrischen, positiv definiten Formulierungen nach Kirchhoff und Koiter untersucht. Wesentlich akzeptierter im Ingenieurbereich ist jedoch das Reissner-Mindlin-Plattenmodell in gemischter Formulierung, wobei insbesondere MITC-Elemente und deren stabilisierte Versionen verwendet werden. Im Rahmen des Projekts sollten für isotrope Vernetzungen parallele Auflösungsverfahren mit dem Bramble-Pasciak-Ansatz und *a posteriori* Fehlerschätzer entwickelt werden.

Auf die beiden Teilaufgaben wird im Folgenden durch die Kurztitel *Stokes* und *Plattenprobleme* Bezug genommen.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

2.3.1 Stokes

Für effiziente, lösungsangepasste Algorithmen müssen Elemente mit beliebig großem Streckungsverhältnis, anisotrope Elemente, zugelassen werden. Das führt zu einer Reihe bisher noch unbefriedigend geklärter Fragestellungen. Der Kenntnisstand zum Zeitpunkt

der Antragstellung sowie die daraus für das Projekt abgeleiteten Fragestellungen werden in den folgenden Abschnitten besprochen.

Stabilität

Für die Stabilität gemischter Methoden müssen die approximierenden Räume eine diskrete Inf-Sup-Bedingung erfüllen, wobei die Konstante im Fall anisotroper Netze unabhängig vom Streckungsverhältnis der Elemente von der Null weg beschränkt sein muss. Zum Zeitpunkt der Antragstellung gab es dazu für den zweidimensionalen Fall eine Reihe geeigneter Elemente niedriger Ordnung, siehe Becker und Rannacher [BR95, Bec95], und hoher Ordnung, siehe z. B. Ainsworth/Coggins [AC00] und Schötzau/Schwab/Stenberg [SS98, SSS99]. Im Dreidimensionalen war als Element niedriger Ordnung nur das nicht-konforme Crouzeix-Raviart-Element als positives Beispiel bekannt, siehe Acosta/Durán [AD99] und Apel/Nicaise/Schöberl [ANS01]. Erste 3D-Ergebnisse zu *hp*-Methoden wurden in [TS03] angegeben.

Die Fragestellung im Teilprojekt bestand darin zu klären, welche Elementepaare für das angestrebte Ziel geeignet sind, d. h. eine stabile Diskretisierung auch bei der Verwendung anisotroper Netze liefern.

A posteriori Fehlerschätzer für die Stokes-Gleichungen

Eine wesentliche Aufgabe in diesem Teilprojekt ist die Herleitung von *a posteriori Fehlerschätzern* für die Stokes-Gleichungen, die auch auf *anisotropen Diskretisierungen* zuverlässig und effizient sind. Insbesondere für solche Finite-Elemente-Paare, für die Stabilität bewiesen wurde, sollen Fehlerschätzer hergeleitet werden. Die Voraussetzungen an die Diskretisierung sollen analysiert und so wenig restriktiv wie möglich formuliert werden.

Besondere Betonung soll auf eine umfassende und allgemeine Analysis gelegt werden, die sowohl den zwei- als auch den dreidimensionalen Fall sowie konforme und nichtkonforme Diskretisierungen umfassen soll. Die Elementtypen sollen möglichst Dreiecke und Vierecke (in 2D) sowie Tetraeder, Pentaeder (Prismen) und Hexaeder (in 3D) beinhalten. Von der methodischen Seite soll mit Fehlerschätzern vom Residuentyp begonnen werden, da diese relativ einfach und gut erforscht sind. Insbesondere existieren isotrope Fehlerschätzer für die Stokes-Gleichungen. Techniken zur Herleitung anisotroper Fehlerschätzer sind für andere Differentialgleichungen u.a. von Kunert entwickelt worden. Je nach den Ergebnissen wird sich die weitere Ausrichtung der Forschung gestalten.

Löser

Zur Auflösung von symmetrischen, indefiniten Gleichungssystemen, wie sie bei der Diskretisierung des Stokes-Systems entstehen, gibt es im Wesentlichen zwei Möglichkeiten. Beim Uzawa-Algorithmus werden die Geschwindigkeitsfreiheitsgrade aus dem System eliminiert und ein positiv (semi-)definites Gleichungssystem für den Druck gelöst. Einen anderen Weg haben Bramble und Pasciak [BP88] beschrieben, indem sie zeigten, dass man ein positiv definites System in einem angepassten Skalarprodukt erhalten kann. Dieser *Bramble-Pasciak-CG* ist effizient, wenn man einen optimalen Vorkonditionierer für die Diskretisierung des Laplace-Operators zur Verfügung hat. Für einige konforme

anisotrope Diskretisierungen mit Elementen niedriger Ordnung sind solche Vorkonditionierer bekannt. Je nachdem, welche stabilen Elementepaare für das Stokesproblem eingesetzt werden sollen, können diese Vorkonditionierer verwendet werden oder es müssen modifizierte Vorkonditionierer entwickelt werden.

Implementierung

Die angestrebten Untersuchungen zu stabilen Elementen für das Stokes-Problem als Prototyp gemischter FEM erfordern ein Experimentalprogramm, das die wesentlichen Eigenschaften der Fehlerschätzer, der Netzsteuerung und der schnellen Lösung der (hier indefiniten) Gleichungssysteme leicht illustrieren kann.

2.3.2 Plattenprobleme

Bei der numerischen Berechnung von Schalen- und Plattendeformationen steht am Anfang eine Hypothese über den Verlauf der Verschiebungen (und evtl. Spannungen/Verzerrungen) über die Dicke. Die so genannten *hierarchischen Modelle* wählen polynomiale Ansätze. Das einfachste Modell hieraus setzt einen linearen Verschiebungsverlauf über die Dicke an und ergibt die Reissner-Mindlin-Formulierung, bei zusätzlicher Kirchhoff-Hypothese entsteht die Kirchhoff-Platte (4. Ordnung) bzw. das Koitersche Schalenmodell. Für alle diese Modelle liegt der numerische Vorteil darin, dass (nach Dicken-Integration) eine mehr oder weniger komplizierte Differentialgleichung im Zweidimensionalen übrig bleibt. Ebenfalls gibt es für alle diese Modelle die üblichen Untersuchungen zur Konvergenz von Finite-Elemente-Näherungen und viele davon werden im Ingenieurbereich extensiv genutzt [Ber96].

Allerdings sind die numerischen Eigenschaften der resultierenden linearen Gleichungssysteme erheblich ungünstiger als bei vergleichbaren Differentialoperatoren 2. Ordnung, so dass für ihre schnelle Lösung nach wie vor kaum etwas bekannt ist. Erste Ergebnisse, die bekannte Multilevel-Techniken auf den Fall der Kirchhoff-Gleichung bzw. des Koiter-Modell übertragen, wurden in den vergangenen Jahren auch im SFB 393 erzielt [Mat97, The98]. Allerdings bezogen sich diese Ergebnisse auf eher selten benutzte Bogner-Fox-Schmidt- und Adini-Rechteck-Elemente (immerhin 12 bzw. 9 Freiheitsgrade pro Knoten bei Schalen, kubische Polynome). Ein weiterer Nachteil im behandelten Modell liegt in der Unmöglichkeit, Randschichten zu repräsentieren.

Hier bringt die Hinwendung zum Reissner-Mindlin-Modell die Vorteile von einfacheren Räumen (2. Ordnung). Es ist wieder möglich, Dreiecksvernetzungen zu nutzen. Im Gegensatz zu einfachen (nicht immer stabilen) Ansätzen für die Finite-Elemente-Räume, hat sich in den letzten Jahren auch im Ingenieurbereich die MITC-Elemente-Familie als ein erfolgreiches Werkzeug erwiesen [BBF89, CS98, LSV93, SS97]. Hiermit sind die gewünschten Fehlerabschätzungen garantiert. Obwohl die Matrix der resultierenden Gleichungssysteme wieder positiv definit ist (mit Teilblöcken zu den verschiedenen Freiheitsgraden), wurde dieses Problem hier aufgenommen, weil die Beweise dieser Fehlerabschätzungen auf äquivalente Sattelpunktsprobleme zurückgreifen müssen. Die Zielstellung für das Projekt bestand darin, hierarchische Löser eventuell auf Grundlage des Bramble-Pasciak-CG für die einfachsten MITC-Elemente zu entwickeln und zu implementieren.

Ein weiteres Problem besteht im Auftreten von Randschichten bei kleiner Plattendicke.

Daher ist die adaptive Arbeitsweise für die Auflösung der Randschichten bedeutsam; als Zielstellung sollte mit der Herleitung von Fehlerschätzern begonnen werden.

Aus der Analogie mit der singular gestörten Reaktions-Diffusionsgleichung wird eine adäquate lösungsangepasste Diskretisierung anisotrop sein. Es sollte untersucht werden, welche Elementtypen sich dafür eignen, d. h., bei welchen Elementen die Inf-Sup-Konstante gleichmäßig bezüglich des Streckungsverhältnisses der Elemente von der Null weg beschränkt ist.

Literaturverzeichnis zu 2.3 (eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

- [AC00] M. Ainsworth and P. Coggins. The stability of mixed hp -finite element methods for Stokes flow on high aspect ratio elements. *SIAM J. Numer. Anal.*, 38:1721–1761, 2000.
- [AD99] G. Acosta and R. G. Durán. The maximum angle condition for mixed and non-conforming elements. Application to the Stokes equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 37:18–36, 1999.
- [ANS01] Th. Apel, S. Nicaise, and J. Schöberl. A non-conforming finite element method with anisotropic mesh grading for the Stokes problem in domains with edges. *IMA J. Numer. Anal.*, 21:843–856, 2001.
- [BBF89] F. Brezzi, K.-J. Bathe, and M. Fortin. Mixed-interpolated elements for Reissner-Mindlin plates. *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, 28:1787–1801, 1989.
- [Bec95] R. Becker. *An adaptive finite element method for the incompressible Navier–Stokes equations on time-dependent domains*. PhD thesis, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 1995.
- [Ber96] M. Bernadou. *Finite element methods for thin shell problems*. Wiley, Chichester, 1996.
- [BP88] J. H. Bramble and J. E. Pasciak. A preconditioning technique for indefinite systems resulting from mixed approximations of elliptic problems. *Math. Comput.*, 50:1–17, 1988. Corrections in 51:387–388, 1988.
- [BR95] R. Becker and R. Rannacher. Finite element solution of the incompressible Navier-Stokes equations on anisotropically refined meshes. In *Fast solvers for flow problems*, volume 49 of *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, pages 52–62, Wiesbaden, 1995. Vieweg.
- [CS98] D. Chapelle and R. Stenberg. An optimal low-order locking-free finite element method for Reissner-Mindlin plates. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 8:407–430, 1998.
- [LSV93] M. Lyly, R. Stenberg, and T. Vihinen. A stable bilinear element for the Reissner-Mindlin plate model. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 110:343–357, 1993.
- [Mat97] H. Matthes. *Die nichtüberlappende Gebietszerlegungsmethode zur Parallelisierung und Vorkonditionierung iterativer Verfahren zur Lösung von Platten- und Schalenproblemen*. PhD thesis, TU Chemnitz, 1997.
- [SS97] R. Stenberg and M. Suri. An hp error analysis of MITC plate elements. *SIAM J. Numer. Anal.*, 34:544–568, 1997.

- [SS98] D. Schötzau and Ch. Schwab. Mixed hp -FEM on anisotropic meshes. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 8:787–820, 1998.
- [SSS99] D. Schötzau, Ch. Schwab, and R. Stenberg. Mixed hp -FEM on anisotropic meshes II: Hanging nodes and tensor products of boundary layer meshes. *Numer. Math.*, 83:667–697, 1999.
- [The98] M. Theß. Parallel multilevel preconditioners for thin smooth shell finite element analysis. *Numer. Linear Algebra Appl.*, 5:401–440, 1998.
- [TS03] A. Toselli and C. Schwab. Mixed hp -finite element approximations on geometric edge and boundary layer meshes in three dimensions. *Numer. Math.*, 94:771–801, 2003.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Stokes

Stabilität

Für ein gegebenes Finite-Elemente-Netz bezeichnen X_h und M_h die Finite-Elemente-Räume zur Approximation von Geschwindigkeit und Druck. Die Größe

$$\gamma_h := \inf_{0 \neq p_h \in M_h} \sup_{0 \neq u_h \in X_h} \frac{\int_{\Omega} p_h \operatorname{div} u_h}{\|u_h\|_{1,\Omega} \|p_h\|_{0,\Omega}}$$

bezeichnet die (netzabhängige) Inf-Sup-Konstante, die durch Lösung eines Eigenwertproblems berechnet werden kann. Stabilität der Diskretisierung bedeutet, dass diese netzabhängige Größe für beliebige Finite-Elemente-Netze nach unten von der Null weg beschränkt ist,

$$\exists \gamma > 0 : \quad \gamma_h > \gamma \quad \forall h > 0.$$

Im Folgenden soll dargestellt werden, für welche Elementepaare und Vernetzungsstrategien wir in den letzten drei Jahren Ergebnisse erzielt haben.

Konforme Elemente niedriger Ordnung nach Fortin und Bernardi/Raugel

Das tiefgehendste Stabilitätsresultat während der Bearbeitungsphase wurde von Apel und Nicaise für konforme Elemente niedriger Ordnung erzielt und in [AN03] veröffentlicht. Es soll im Weiteren erläutert werden.

Betrachtet wird ein zweidimensionales Polygonebiet, das zunächst grob mit Vierecken und Dreiecken in Teilgebiete zerlegt wird. In jedem Teilgebiet kann eine aus drei möglichen Vernetzungsstrategien gewählt werden, die man mit (a) *keine Verfeinerung*, (b) *anisotrope Verfeinerung zu einer Kante hin* und (c) *anisotrope Verfeinerung zu zwei Kanten hin* beschreiben kann. Diese Vorgehensweise folgt der Arbeit [SSS99], geht aber insofern darüber hinaus, dass auch (nicht-affine) Trapezelemente zugelassen werden. Für Illustrationen verweisen wir auf die Originalarbeit [AN03].

Der Raum zur Approximation der Geschwindigkeit besteht aus stetigen Vektorfunktionen, die elementweise wie folgt beschrieben werden können. Für Dreieckelemente ist der Raum neundimensional und durch

$$\mathcal{P}_T := \mathcal{P}_1^2 \oplus \operatorname{span} \{n^{(1)} \lambda_2 \lambda_3, n^{(2)} \lambda_3 \lambda_1, n^{(3)} \lambda_1 \lambda_2\}$$

definiert, wobei λ_i die linearen Ansatzfunktionen und $n^{(i)}$ die äußeren Normalen an die Dreiecksseiten bezeichnen, $i = 1, 2, 3$. Der zwölfdimensionale Raum für das Viereckselement ist analog auf der Basis von \mathcal{Q}_1 definiert. Zur Approximation des Drucks werden jeweils elementweise konstante Funktionen verwendet. Die Freiheitsgrade werden in der üblichen Notation in folgender Zeichnung dargestellt.



Diese Räume gehen auf die Arbeiten [For81] und [BR85] zurück, weswegen wir die Elemente auch als Bernardi-Fortin-Raugel-Elemente bezeichnen.

Durch Angabe eines Fortin-Operators wurde zunächst die Stabilität lokal in Teilgebieten mit den Vernetzungsstrategien (a) und (b) gezeigt. Daraus konnte mit Hilfe einer Substrukturtechnik die Stabilität in Teilgebieten mit der Vernetzungsstrategie (c) gefolgert werden. Nochmalige Anwendung der Substrukturtechnik führte dann zum globalen Stabilitätsresultat.

Das Resultat kann nicht mit der gleichen Technik auf den dreidimensionalen Fall verallgemeinert werden, da sich die benötigten Eigenschaften und Gleichungen, die im Zweidimensionalen auf Kanten gelten, im Dreidimensionalen teilweise auf Kanten und teilweise auf Seitenflächen beziehen.

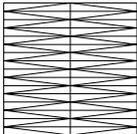
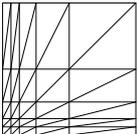
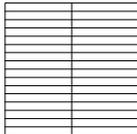
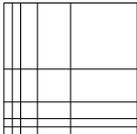
Die Paare $\mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_0$, $\mathcal{Q}_2 - \mathcal{Q}_0$ und $\mathcal{Q}'_2 - \mathcal{Q}_0$

Aus dem von uns gezeigten Stabilitätsresultat folgt die Stabilität aller Elementpaare mit dem gleichen Raum zur Approximation des Drucks und einem umfassenderen Raum für die Geschwindigkeit, wie $\mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_0$, $\mathcal{Q}_2 - \mathcal{Q}_0$ und $\mathcal{Q}'_2 - \mathcal{Q}_0$. Dabei ist festzuhalten, dass die Paare $\mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_0$ und $\mathcal{Q}_2 - \mathcal{Q}_0$ bereits in [SS98, SSS99] untersucht wurden, dort aber keine anisotropen Trapezelemente zugelassen wurden.

Taylor–Hood-Elemente

Die Untersuchung von Taylor–Hood-Elementen wurde von Herrn Randrianarivony im Rahmen seiner Masterarbeit begonnen [Ran01], weitere Ergebnisse sind in [AR03] dokumentiert. Auf einigen Folgen von Finite-Elemente-Netzen (Vernetzungsstrategien) wurden die oben definierten Größen γ_h berechnet. Durch Angabe von Beispielen, in denen γ_h gegen Null konvergierte, konnte gezeigt werden, dass das Paar $\mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_1$ im Allgemeinen nicht stabil ist. Für einige der in oben für das Bernardi-Fortin-Raugel-Element beschriebenen Vernetzungsstrategien konvergierte γ_h jedoch nicht gegen Null. Es ist uns jedoch nicht gelungen, einen theoretischen Beweis dafür zu finden.

Die numerischen Untersuchungen wurden während des Aufenthalts von Herrn Apel an der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg in Zusammenarbeit mit Gunar Matthies auch auf Taylor–Hood-Elemente höherer Ordnung ausgedehnt. Dabei ergab sich ein ähnliches Bild. In den folgenden Tabellen sind Grenzwerte für γ_h bei verschiedenen Netzverfeinerungsstrategien zusammengefasst:

| Paar |  |  | Paar |  |  |
|---------------------------------|---|---|---------------------------------|---|---|
| $\mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_1$ | 0.33 | 0.35 | $\mathcal{Q}_2 - \mathcal{Q}_1$ | 0.46 | 0.44 |
| $\mathcal{P}_3 - \mathcal{P}_2$ | 0.23 | 0.25 | $\mathcal{Q}_3 - \mathcal{Q}_2$ | 0.42 | 0.42 |
| | | | $\mathcal{Q}_4 - \mathcal{Q}_3$ | 0.39 | 0.39 |
| | | | $\mathcal{Q}_5 - \mathcal{Q}_4$ | 0.37 | 0.37 |
| | | | $\mathcal{Q}_6 - \mathcal{Q}_5$ | 0.36 | 0.36 |
| | | | $\mathcal{Q}_7 - \mathcal{Q}_6$ | 0.34 | 0.34 |
| | | | $\mathcal{Q}_8 - \mathcal{Q}_7$ | 0.33 | 0.33 |
| | | | $\mathcal{Q}_9 - \mathcal{Q}_8$ | 0.29 | 0.29 |

Es sei noch bemerkt, dass das Paar $\mathcal{P}_2^+ - \mathcal{P}_1$, bei dem der Geschwindigkeitsraum in jedem Element mit einer Blasenfunktion (bubble) erweitert wird, in allen numerischen Experimenten (einschließlich der Verfeinerungsstrategien, die für das Taylor–Hood-Element Gegenbeispiele liefern) stabil war ($\gamma_h > \gamma > 0$). Eine theoretische Durchdringung steht jedoch weiterhin aus.

Elemente höherer Ordnung mit unstetigem Druck

Abschließend sei noch erwähnt, dass die ebenfalls von Matthies (Magdeburg) getesteten Elementpaare $\mathcal{P}_2^+ - \mathcal{P}_1^{\text{disc}}$, $\mathcal{Q}_2 - \mathcal{P}_1^{\text{disc}}$ und $\mathcal{Q}_3^+ - \mathcal{P}_2^{\text{disc}}$ selbst auf den in den obigen Tabellen angeführten sehr regelmäßigen anisotropen Netzen instabil sind, $\gamma_h \rightarrow 0$.

All diese Ergebnisse wurden auf verschiedenen internationalen Konferenzen vorgestellt (z. B. MAFELAP 2003, ENUMATH 2003) und haben zu interessanten Gesprächen mit international anerkannten Fachkollegen wie Franco Brezzi, Rolf Stenberg und David Silvester geführt.

A posteriori Fehlerschätzer für die Stokes Gleichungen

Die Untersuchungen wurden in Zusammenarbeit mit E. Creuse und S. Nicaise (beide Valenciennes) durchgeführt (2002 bis Anfang 2003). Sie mündeten in der Publikation [CKN03], auf die sich alle weiteren Erläuterungen beziehen. Diese Arbeit bildet auch einen wesentlichen Teil der Habilitation von Herrn Kunert [Kun03]. Insgesamt gestalteten sich die Untersuchungen teilweise schwieriger als zunächst angenommen.

Es stellte sich schnell heraus, dass die Analyse von Fehlerschätzern für *gemischte Formulierungen* andere Verfahren erfordert als für skalare Gleichungen. Da ein Diskretisierungsfehler in den zwei Termen für Geschwindigkeit und Druck vorliegt, musste die Theorie modifiziert werden.

Bei einer *konformen* Diskretisierung waren die nötigen Änderungen relativ gering, so dass die Analyse nahezu wie für skalare Gleichungen erfolgen konnte.

Bei einer *nichtkonformen* Diskretisierung dagegen sind bedeutende Modifikationen erforderlich. Am erfolgversprechendsten erschien es, den Geschwindigkeitsfehler über eine Helmholtz-Zerlegung aufzuspalten (für isotrope Vorbilder siehe [DDP95, CF01]). Diese Helmholtz-Zerlegung ist unabhängig davon, ob isotrope oder anisotrope Elemente verwendet werden. Andererseits wurde sie bisher nur im 2D-Fall verwendet und untersucht.

Deshalb haben wir die Zerlegung auf den 3D-Fall erweitert, was aber zu qualitativ neuen Phänomenen führte: Aus Vektorgrößen im 2D-Fall wurden nun Matrixgrößen im 3D-Fall. Weiterhin unterscheidet sich die Analysis im Detail für die unterschiedlichen Element-Typen (Dreiecke, Vierecke, Tetraeder, Pentaeder, Hexaeder). Im Folgenden sollen die Ergebnisse vorgestellt werden.

Die Diskretisierung muss nur relativ schwache Voraussetzungen erfüllen:

- Der diskrete Geschwindigkeitsraum V_{veloc} muss gross genug sein (effektiv manchmal etwas grösser als sonst üblich).
- Bei *nichtkonformen* Diskretisierungen werden *Crouzeix-Raviart Elemente* betrachtet, bei denen das Integral über den Sprung der diskreten Geschwindigkeit über eine Fläche (in 3D) verschwindet:

$$\int_E [[v_h]]_E = 0.$$

- Die Element-Paare sollten stabil sein für anisotrope Diskretisierungen, d.h. eine diskrete LBB-Bedingung erfüllen. Zu beachten ist allerdings, dass diese Forderung nicht vom Fehlerschätzer kommt, sondern von der Forderung nach einer stabilen Diskretisierung.

Insgesamt deckt unsere Analysis viele Element-Paare ab (sowohl bekannte als auch gegenwärtig untersuchte) bzw. gibt Hinweise, wie sie zu modifizieren sind [CKN03, Abschnitte 5 und 3.4].

Die erhaltenen Fehlerschätzer sind alle vom Residuentyp und beinhalten das Elementresiduum und die Sprünge über eine Kante (2D)/Fläche (3D). Bei nichtkonformen Diskretisierungen kommt noch der Sprung der Tangentialableitung entlang einer Kante/Fläche hinzu. Aufgrund der sehr großen Vielfalt der möglichen Diskretisierungen (2D/3D, konform/nichtkonform, Dreiecke ... Hexaeder) unterscheiden sich sowohl die Fehlerschätzer als auch ihre Analysis mehr oder weniger stark. Deshalb werden hier nicht alle Ergebnisse aufgelistet, sondern nur wesentliche Errungenschaften.

Abschätzung der Fehlers nach unten

Wie auch bei anderen Differentialgleichungen gewohnt, konnten lokale Abschätzungen nach unten gezeigt werden. Die einzigen Ausnahmen sind nichtkonforme 3D Diskretisierungen, die viereckige Flächen haben (also für Pentaeder-/Hexaeder-Elemente). In diesem Fall konnte nur eine schwächere *globale* Fehlerschranke gezeigt werden. Wir vermuten, dass dieses Resultat verbessert werden kann.

Abschätzung der Fehlers nach oben

Die globalen Fehlerabschätzungen nach oben sind alle von der Form

$$\text{Globaler Fehler} \lesssim \text{Alignment Measure} \cdot \text{Fehlerschätzer}$$

Diese *Struktur* der Fehlerschranke war nach den Vorarbeiten zu erwarten, siehe z.B. [Kun99]. Das *Alignment Measure* misst dabei die Ausrichtung des anisotropen Netzes mit der anisotropen Lösung. Für isotrope Netze sowie gut ausgerichtete anisotrope Netze

ist das Alignment Measure in der Größenordnung 1 (in numerischen Experimenten $\approx 1.5 \dots 4$). An dieser Stelle soll darauf nicht weiter eingegangen werden; wir verweisen auf [Kun99] für eine ausführliche Diskussion.

Für die untersuchten Stokes-Gleichungen sind jetzt mehrere Abweichungen von der bisher bekannten Theorie bedeutsam:

- Statt eines Alignment Measures tauchen nun *mehrere* Alignment Measures auf.
- Die Alignment Measures beziehen sich zum Teil auf Funktionen, von denen man nur die Existenz kennt, nicht aber die konkrete Gestalt.

Beide Unterschiede sind Nachteile. Möglicherweise erreicht die bisherig verwendete Methodik zum Herleiten anisotroper Fehlerschätzer ihre Grenzen.

Löser, Implementierungen

Die in den vorherigen Abschnitten dargestellten Untersuchungen zu stabilen Elementen und zu Fehlerschätzern für das Stokes-Problem als Prototyp gemischter FEM erfordern ein Experimentalprogramm, das die wesentlichen Eigenschaften der Fehlerschätzer, der Netzsteuerung und der schnellen Lösung der (hier indefiniten) Gleichungssysteme leicht illustrieren kann. Dies wurde in einer ersten Version als SPC-PM-AdSt („Programm-Modul adaptiv Stokes“) unter Nutzung der im SFB entwickelten Bibliotheken und in Verallgemeinerung von SPC-Ad2D (vgl. Tp. A3) erhalten. Neu ist dabei, dass mehrere Elementmatrizen zu berechnen sind (wegen der zusätzlichen Bilinearform $b(p, u)$) und dass der Löser vom bekannten vorkonditionierten Verfahren der konjugierten Gradienten (PCG) zu einer Verallgemeinerung des Bramble–Pasciak–CG [BP88, MS01] zu ändern ist. Dieses Programm bildet die Grundlage für die folgenden Experimente.

2.4.2 Plattenprobleme

Die Behandlung der Reissner–Mindlin–Plattengleichung wurde in dieses Teilprojekt aufgenommen, weil hier ebenfalls die Stabilität gemischter Finitier Elemente eine große Rolle spielt. Allerdings hat sich bei der Sichtung der Veröffentlichungen der letzten Jahre deutlich gezeigt, dass dies nur für die Beweise von günstigen FE–Formulierungen benutzt wird, nicht aber für die wirkliche numerische Rechnung.

Vielmehr führen die Arbeiten zum richtigen Verständnis der zugrunde liegenden Räume und münden in eine (leicht abgeänderte) positiv definite Bilinearform der Plattengleichung zurück:

$$a(w, \vec{\Theta}, v, \vec{\vartheta}) = t^2 a_1(\vec{\Theta}, \vec{\vartheta}) + \mu \kappa \langle \mathcal{R}_h(\nabla w - \vec{\Theta}), \mathcal{R}_h(\nabla v - \vec{\vartheta}) \rangle$$

mit einem besonderen Projektor \mathcal{R}_h , der das sonst übliche „Locking“ beseitigt.

Aus diesem Grund wurde die Bearbeitung dieses Teilthemas modifiziert fortgeführt. Zum einen hat sich Herr Derezin auf die Randschichtenproblematik aus analytischer Sicht konzentriert. Er hat versucht verschiedene äquivalente Formulierungen zu finden, die besonders geeignet wären ein Randschicht–Verhalten aufzudecken. Gleichzeitig ist in einer Diplomarbeit mit der Implementierung und numerischen Experimenten zu den MITC3 und MITC7–Elementen (für Dreiecke) sowie MITC4/9–Elementen (für Vierecke) begonnen worden. Beide Arbeiten sind noch nicht abgeschlossen.

Randschichten bei Platten

Es wurde das Problem der Randschichten anders als traditionell (Asymptotiken bezüglich Plattendicke) analysiert.

Durch Helmholtz-Zerlegung des Rotationsvektors bzw. der Scherkraft (abhängig von Randbedingungen) erhält man eine Repräsentation durch transversale Verschiebung und lokale Verdrehung

$$\begin{aligned} D\Delta^2 w &= p \\ -\Delta\psi + k^2\psi &= 0 \\ \psi &\sim \frac{1}{2}z \left(\frac{\partial\Theta_1}{\partial x_2} - \frac{\partial\Theta_2}{\partial x_1} \right). \end{aligned}$$

Also die transversale Verschiebung ist durch die biharmonische Gleichung, die lokale Verdrehung durch eine Reaktions-Diffusions-Gleichung bestimmt. Letztere repräsentiert die Randschichten. Die Kopplung beider geschieht durch 3 Randbedingungen.

Nahezu die gleichen Herangehensweisen führten Brezzi/Fortin [BF86] zu 2 elliptischen Gleichungen und einem (gestörten) Stokes-Problem. Unser System ist äquivalent hierzu. Mit Hilfe von konstitutiven Gleichungen für die Spannungen sowie einem Analogon der Beltrami-Michell-Kompatibilität (siehe [DZ98]) erhält man explizite Abhängigkeitsformeln von der Spannung („Primale Größen“ der Lösung) als Funktion des obigen Feldes ψ („Randschichten-Funktion“). Dies könnte zur Steuerung eines adaptiven Algorithmus für Randschichten dienen, da hiermit auf einfache Weise das Auftreten von Randschichten (oder nicht) in den einzelnen Komponenten der Biegemomente und der Scherkräfte aufgedeckt wird.

Weitere Ergebnisse

M. Jung hat in [Jun03] die parallele Lösung von Finite-Elemente-Gleichungssystemen, die bei der Diskretisierung einer gemischten Variationsformulierung des ersten biharmonischen Randwertproblems entstehen, diskutiert. Zur Diskretisierung wurden Dreieckselemente mit stückweise linearen Ansatzfunktionen genutzt. Die Lösung der indefiniten Finite-Elemente-Gleichungssysteme erfolgte mittels vorkonditionierter Schur-Komplement-CG-Verfahren, CG-Verfahren vom Bramble-Pasciak-Typ und Multigrid-Verfahren. In [KNJ03, KNJ04] (am Institut für Wissenschaftliches Rechnen der TU Dresden) wurde die Parallelisierung von direkten und iterativen Lösungsverfahren für verschiedene gemischte Variationsformulierungen von Plattenproblemen untersucht.

Literaturverzeichnis

- [AN03] Th. Apel and S. Nicaise. The inf-sup condition for the Bernardi-Fortin-Raugel element on anisotropic meshes. Preprint SFB393/03-15, TU Chemnitz, 2003. Erscheint 2004 unter dem Titel *The inf-sup condition for some low order elements on anisotropic meshes* bei Calcolo.
- [AR03] Th. Apel and H. M. Randrianarivony. Stability of discretizations of the Stokes problem on anisotropic meshes. *Mathematics and Computers in Simulation*, 61:437–447, 2003.
- [AF90] D.N. Arnold and R.S. Falk. The boundary layer for the Reissner-Mindlin plate model. *SIAM J. Math. Appl.*, 21:281–312, 1990.

- [BR85] C. Bernardi and G. Raugel. Analysis of some finite elements for the Stokes problem. *Math. Comp.*, 44:71–79, 1985.
- [BP88] J. H. Bramble and J. E. Pasciak. A preconditioning technique for indefinite systems resulting from mixed approximations of elliptic problems. *Math. Comput.*, 50:1–17, 1988. Corrections in 51:387–388, 1988.
- [BF86] F. Brezzi and M. Fortin. Numerical approximation of Mindlin–Reissner plates. *Math. Comp.*, 47:151–158, 1986.
- [CF01] C. Carstensen and S. Funken. A posteriori error control in low-order finite element discretisations of incompressible stationary flow problems. *Math. Comp.*, 70:1353–1381, 2001.
- [CKN03] E. Creusé, G. Kunert, and S. Nicaise. A posteriori error estimation for the Stokes problem: Anisotropic and isotropic discretizations. Preprint SFB393/03–01, TU Chemnitz, 2003. Submitted to *Math. Models Methods Appl. Sci.*
- [DDP95] E. Dari, R. Durán, and C. Padra. Error estimators for nonconforming finite element approximations of the Stokes problem. *Math. Comput.*, 64:1017–1033, 1995.
- [DZ98] S.V. Derezin and L.M. Zubov. Dislocations and disclinations in elastic plates. *Proc. of the 4th Conf. on Continuum Mech., Rostv Don*, 128–132, 1998.
- [For81] M. Fortin. Old and new finite elements for incompressible flows. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 1:347–354, 1981.
- [FD61] K.O. Friedrichs, R.F. Dressler. A boundary layer theory for elastic plates. *Comm. Pure and Appl. Math.*, 14:1–33, 1961.
- [Jun03] M. Jung. Fast parallel solvers for fourth-order boundary value problems. In G. R. Joubert, W. E. Nagel, F. J. Peters, and W. V. Walter, eds., *Parallel Computing: Software, Technology, Algorithms, Architectures, and Applications*. Proceedings of the 10th ParCo Conference in Dresden, 2003. (accepted for publication).
- [KNJ03] K. Kulshreshtha, N. Nataraj, and M. Jung. Performance of a parallel mixed finite element implementation for fourth order clamped anisotropic plate bending problems in distributed memory environments. *Applied Mathematics and Computation*, 2003. (accepted for publication).
- [KNJ04] K. Kulshreshtha, N. Nataraj, and M. Jung. A parallel mixed finite element implementation of fourth-order plate bending problems in distributed memory environments. *Applied Mathematics and Computation*, 2004. (accepted for publication).
- [Kun99] G. Kunert. *A posteriori error estimation for anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes*. Logos Verlag, Berlin, 1999. Also PhD thesis, TU Chemnitz, <http://archiv.tu-chemnitz.de/pub/1999/0012/index.html>.
- [Kun03] G. Kunert. *Advances in a posteriori error estimation on anisotropic finite element discretizations*. Logos, Berlin, 2003. Habilitationsschrift.
- [MS01] A. Meyer and T. Steidten. Improvements and experiments on the Bramble-Pasciak type CG for mixed problems in elasticity. Preprint SFB393/01-13, TU Chemnitz, 2001.

- [Ran01] M. Randrianarivony. Stability of mixed finite element methods with anisotropic meshes. Master's thesis, TU Chemnitz, 2001.
- [SS98] D. Schötzau and Ch. Schwab. Mixed hp -FEM on anisotropic meshes. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 8:787–820, 1998.
- [SSS99] D. Schötzau, Ch. Schwab, and R. Stenberg. Mixed hp -FEM on anisotropic meshes II: Hanging nodes and tensor products of boundary layer meshes. *Numer. Math.*, 83:667–697, 1999.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

In der letzten Bearbeitungsphase wurde die Stabilität von mehreren Elementepaaren theoretisch untersucht, ohne zu einem abschließenden Beweis zu kommen. Dabei handelt es sich um das Bernardi–Fortin–Raugel-Element im Dreidimensionalen, die Taylor–Hood-Elemente $\mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_1$ und $\mathcal{Q}_2 - \mathcal{Q}_1$ und das $\mathcal{P}_2^+ - \mathcal{P}_1$ -Element (alle zunächst 2D). Die Hauptursache für den bislang ausgebliebenen Erfolg liegt sicher darin, dass dieses Vorhaben sehr ambitioniert ist. Es bleibt auch weiterhin eine interessante Herausforderung. An allen drei Fragestellungen hat außer Herrn Apel der von der DFG finanzierte Projektbearbeiter Alexander Smuglyakov mitgearbeitet. Der ursprünglich vorgesehene Bearbeiter Maharavo Randrianarivony, der durch Vorarbeiten bestens für das Projekt eingearbeitet war, hat sich kurzfristig wissenschaftlich umorientiert und ist als Bearbeiter im Teilprojekt A7 bei der Informatik eingestiegen.

Daher musste die Stelle kurzfristig ausgeschrieben werden; der neue langfristige Bearbeiter Smuglyakov ab April 2002 benötigte natürlich eine längere Einarbeitungszeit. Die numerischen Untersuchungen zu den Fehlerschätzern beschränken sich momentan auf ein relativ einfaches, akademisches Testproblem. Hier besteht noch großer Forschungsbedarf, der mit den Partnern in Valenciennes (E. Creuse, S. Nicaise) angegangen werden sollte. Insbesondere muss untersucht werden, ob der aus theoretischer Sicht nachteilige Einfluss mehrerer Alignment Measures sich auch in der numerischen Praxis zeigt.

In der Fortführung dieses Teilprojektes können diese Ergebnisse für praxisrelevantere Simulationsrechnungen genutzt werden. So tritt bei Deformationsproblemen mit (fast oder in Teilen) inkompressiblen Materialien ein Sattelpunktsproblem auf, das etwa gleiche Eigenschaften wie das Stokes–Problem hat. Deshalb kann die bisherige Experimentalssoftware (etwa *SPC-PM AdSt* und *SPC-PM AdMix*, vgl. Tp.A3) sofort auf diese Fälle verallgemeinert werden.

Teilprojekt

A12

Finite-Elemente-Methode vom Nitsche-Typ für
nichtkonforme Gebietszerlegungen

2.1 Teilprojekt A12

Finite-Elemente-Methode vom Nitsche-Typ für nichtkonforme Gebietszerlegungen

2.1.1 Antragsteller

| | | |
|--|---------------------------------------|--------------------------|
| Prof. Bernd Heinrich | Prof. Arnd Meyer | Prof. Reinhold Schneider |
| 12.10.1943 | 08.03.1952 | 20.03.1957 |
| Angewandte Mathematik | Numerische Analysis | Numerische Mathematik |
| Fak. für Mathematik | Fak. für Mathematik | Fak. für Mathematik |
| TU Chemnitz | TU Chemnitz | TU Chemnitz |
| 09107 Chemnitz | 09107 Chemnitz | 2002 – September 2003 |
| Tel.: (0371) 531-2659 | (0371) 531-2659 | |
| Fax: (0371) 531-2657 | (0371) 531-2657 | ab Oktober 2003 in Kiel: |
| b.heinrich@mathematik. tu-chemnitz.de | a.meyer@mathematik. tu-chemnitz.de | rs@numerik.uni-kiel.de |

2.1.2 Projektbearbeiter

Mitarbeiter der Grundausrüstung:

| | |
|--------------------------------|--|
| Prof. Bernd Heinrich | (Angewandte Mathematik) |
| Prof. Arnd Meyer | (Numerische Analysis) |
| Prof. Reinhold Schneider | (Numerische Mathematik, 2002 bis Sept. 2003) |
| PD Dr. Thomas Apel | (Numerische Analysis, 2002 bis Dez. 2003) |
| Dipl.-Math. techn. Roman Unger | (Numerische Analysis) |

Mitarbeiter der Ergänzungsausrüstung:

| |
|---|
| Dipl.-Math. techn. Kornelia Pönitz (2002 bis August 2003) |
| Dipl.-Math. techn. Roman Unger |

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Nitsche-Mortaring

Für die effiziente numerische Lösung elliptischer Probleme mittels Finite-Elemente Methode (FEM) auf Parallelrechnern sind Gebietszerlegungsmethoden von besonderem Interesse. Die gleichzeitige Anwendung nichtkonformer Teilgebietstriangulationen sowie einer abgeschwächten und koppelnden Stetigkeitsbedingung an den Teilgebietsrändern wird durch so genannte Mortar-Methoden möglich, die häufig über ein Sattelpunktsproblem für die Lösung u der Randwertaufgabe und einem Lagrange-Parameter λ realisiert werden.

Auf einer Idee von Nitsche (1971, cf. [Nit71, Tho97]) beruhend, wurde u.a. durch Stenberg (1998, vergl. auch [Ste98, Arn82]) ein zur Mortar-Methode verwandter Zugang zur Kopplung nichtkonformer Triangulationen (non-matching meshes) und unstetiger Finite-Elemente-Ansätze vorgeschlagen, das so genannte „Nitsche-type mortaring“. Dieser Zugang behandelt die Kopplung nicht wie bisher über Nebenbedingungen, sondern

vereinfachend mittels eines Kopplungstermes, der die Bilinearform des Ausgangsproblems erweitert. Das Verfahren ist dann als Galerkin-Verfahren für die durch den Kopplungsterm modifizierte Variationsgleichung über dem Raum unstetiger Finite-Elemente-Funktionen interpretierbar. Die Finite-Elemente-Methode vom Nitsche-Typ sollte in drei wesentlichen Linien behandelt werden.

1. Analyse der FE-Schemata nach Nitsche als FE-Approximation auf nichtkonformen Teilgebietstriangulationen, insbesondere bezüglich Stabilität und Konvergenzraten der Näherungslösung, bei schwierigen und anwendungsrelevanten Parametersituationen:
 - komplizierte Geometrie des Randes $\partial\Omega$ (Ecken, Kanten), unstetige Koeffizienten, kleine Diffusionskoeffizienten und daraus resultierende Lösungssingularitäten sowie Anisotropie in der Lösung u des Randwertproblems,
 - nichtkonforme Kopplung unregelmäßiger Netze mit lokal verfeinerten (graduierten) sowie anisotropen Netzen.
2. Behandlung von Aufgaben des elastischen Kontaktes, unter besonderer Berücksichtigung des Koppelterms und der effizienten Auflösung der Diskretisierungsschemata, auch unter Einbeziehung der FE-Methode vom Nitsche-Typ.
3. Verallgemeinerung der Nitsche-Methode auf den Fall der schwachen Kopplung der Näherungslösung auf dem Skelett aller Elementkanten einer gegebenen Gebietstriangulation (Discontinuous Galerkin Method), einschließlich Methoden der effizienten Auflösung der linearen Gleichungssysteme mittels Multiskalenmethoden.

Kontaktsimulation

Die numerische Simulation reibungsfreier Kontaktprobleme zwischen einem elastischen Körper und einem starren Hindernis wird meist durch die Lösung der resultierenden Variationsungleichungen, z.B. mittels Strafmethode, ausgeführt.

Kernpunkt unserer Forschung war die Entwicklung geeigneter Projektionsmethoden zur Lösung des folgenden Problems im 2D-Fall.

Problem 1 *Gesucht ist das Verschiebungsfeld $u(x)$ für einen elastischen Körper Ω , so dass die Lamégleichung mit Lamé-Konstanten λ , μ und dem Spannungstensor σ*

$$\begin{aligned} -\mu\Delta u - (\lambda + \mu)\mathbf{grad\,div}\,u &= f \\ u(x) &= g_D \quad \text{auf } \Gamma_D \\ \sigma(u) \cdot \mathbf{n} &= g_N \quad \text{auf } \Gamma_N \end{aligned}$$

erfüllt wird, und alle Punkte von Ω außerhalb eines vorgegebenen starren Hindernisses verbleiben (siehe Abbildung 2.1)

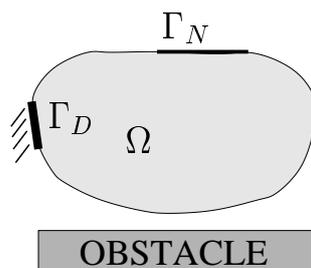


Abbildung 2.1: Das Kontaktproblem

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

2.3.1 Teilaufgabe: Analyse des Nitsche-Mortaring für verschiedene elliptische Randwertaufgaben

Ein wesentliches Ziel dieser Teilaufgabe bestand in der Analyse der Finite-Elemente-Methode nach Nitsche (Nitsche-Mortaring). Für verschiedene Modellaufgaben mit elliptischer Differentialgleichung zweiter Ordnung war das Finite-Elemente-Schema nach Nitsche als nichtkonforme Finite-Elemente-Approximation auf nichtkonsistenten Teilgebietstriangulationen zu entwickeln und aus der Sicht der Numerischen Analysis mathematisch zu behandeln. Dabei waren schwierige und anwendungsrelevante Parametersituationen der Randwertaufgabe, wie Ecken, springende Koeffizienten und kleine Parameter (singuläre Störungen) zu berücksichtigen, die Stabilität sowie die optimale Konvergenz der Näherungslösung zu garantieren. Die Durchführbarkeit und Vorteile sowie die Anwendungsbreite der Methode waren theoretisch und durch die numerische Realisierung relevanter Beispiele aufzuzeigen. Vorarbeiten bestanden u.a. darin, bekannte Aussagen zu den klassischen Mortar-Methoden (vergl. etwa [BD98, BDW99, Bel99, BMP90, LW03, Woh98, Woh99a, Woh99b, Woh00]) sowie zur Regularitätstheorie der betrachteten Randwertaufgaben, einschließlich des besonderen Verhaltens der Lösung in der Umgebung von Ecken, Kanten und Randschichten, in der Literatur zu sichten. Weiter waren die modifizierten Variationsgleichungen nach Nitsche, bisher für die Poissongleichung bzw. verwandte Probleme bekannt (vergl. [ABCM00, Arn82, BH, BH99, BHS03, Ste95, Ste98]), für andere elliptische Probleme mit komplizierteren Parametern passend zu erweitern. Die Hilfsmittel für Fehlerabschätzungen (unter anderem inverse Ungleichungen und Spursätze) waren auf entsprechende Klassen anisotroper und gradierter Netze, in Kopplung mit isotropen Netzen, zu übertragen, die Fehler waren in H^1 -ähnlichen Normen und in der L_2 -Norm abzuschätzen. Weiterhin waren Implementierungen der Nitsche-Mortar-Methode zu realisieren, Testbeispiele zu entwickeln und numerische Experimente durchzuführen.

Die bisher betrachteten Problemklassen umfassten:

- die Poissongleichung mit Dirichlet'schen Randbedingungen,
- die Poissongleichung mit gemischten Randbedingungen über polygonalen Gebieten,
- Interfaceprobleme mit unstetigen Koeffizienten,
- singular gestörte Reaktions-Diffusions-Probleme.

2.3.2 Teilaufgabe: Discontinuous Galerkin Methode

Konstruktion von unstetigen Multiwaveletbasen auf hierarchischen Triangulationen, die geeignet für DG-Methoden sind, einschließlich ihrer Untersuchung und Anwendung auf Randwertaufgaben im Rahmen des nichtkonformen Zugangs nach Nitsche. Die unstetigen Multiwaveletbasen sollen orthogonal oder im wesentlichen orthogonal bezüglich des (gebrochenen) H^1 -Skalarproduktes sein.

Darüber hinaus sind für die Vorkonditionierung Normäquivalenzen für die Spuren auf den Koppelländern zu beweisen, die der Schlüssel für den effizienten Einsatz der Waveletbasen sind. Die Methoden und Resultate zum Nitsche-type mortaring sind auf ihre Verallgemeinerbarkeit für den Fall zu untersuchen, dass eine schwache Stetigkeitsbedingung auf allen Elementkanten möglich ist, so dass damit der Zusammenhang zu DG-Methoden hergestellt werden kann.

2.3.3 Teilaufgabe: Kontaktbehandlung

Projektionsmethoden für hängende Knoten

Die grundlegende Idee zur Nutzung von Projektionsmethoden stammt aus dem Problem, in einem adaptiven FEM-Algorithmus hängende Knoten effektiv zu behandeln.

Für effektive Vorkonditionierer werden hierarchische Netze gebraucht, bei Verwendung von Rot-Grün-Verfeinerungstechniken geht die Hierarchie durch Entfernung grüner Elemente vor der nächsten Verfeinerung jedoch verloren.

Ein Weg, dieses Problem zu umgehen, ist mit den hängenden Knoten zu arbeiten und mittels Projektionstechniken korrekte Lösungen zu erzwingen.

Als ein einfaches Beispiel betrachte man die folgende Abbildung.

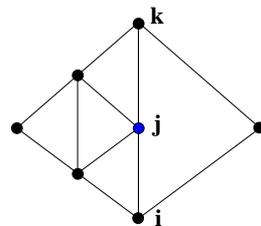


Abbildung 2.2: Ein Beispiel für hängende Knoten

Der Wert im Mittelknoten u_j ist nicht frei, sondern durch die Werte in u_i und u_k festgelegt. Der Einbau dieser Information in den Gleichungssystemlöser wird mit einem geeignet definierten Projektor

$$P = \left[\begin{array}{cccc|c} & & I & & \\ \dots & \frac{1}{2} & \dots & \frac{1}{2} & \dots & 0 \\ & & & & & I \end{array} \right]$$

mit $\frac{1}{2}$ an den Spalten i und k sowie 0 in allen anderen Spalten der Zeile j vorgenommen.

Wird solch ein Projektor in den Vorkonditionierer des CG-Lösers eingebaut, also die Berechnung des Korrekturvektors w von

$$w := C^{-1}r$$

zu

$$w := PC^{-1}P^t r$$

abgeändert [Mey99] und außerdem sichergestellt, dass die Startlösung konform ist ($u^0 \in Im(P)$), so liegen auch alle Iterierten u^k und somit die Lösung u in $Im(P)$.

Zu einer detaillierten Beschreibung dieser Methode zur Behandlung hängender Knoten siehe [Mey99, Mey02].

Im Folgenden soll die Erweiterung dieser Idee zur Behandlung einiger Arten spezieller Randbedingungen und Rückführung des Kontaktproblems auf ein Problem mit derartigen Randbedingungen beschrieben werden.

Projektoren für verschiedene Arten von Randbedingungen

Einige Arten von Randbedingungen sind durch Projektoren behandelbar, so zum Beispiel periodische Randbedingungen mit $u_{left} = u_{right}$ am linken und rechten Randbereich in Abbildung 2.3

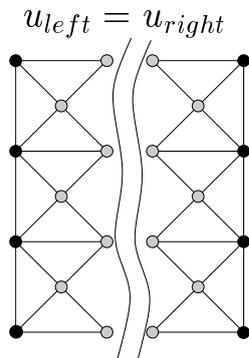


Abbildung 2.3: Periodische Randbedingungen

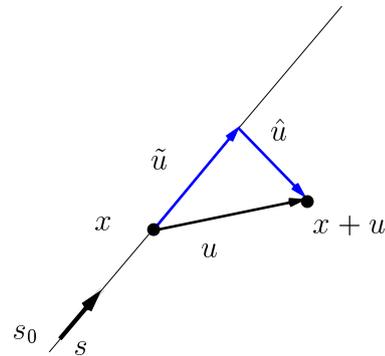


Abbildung 2.4: Rutschrandbedingungen

Eine andere Art von Randbedingungen sind die so genannten „Rutschrandbedingungen“ (slip-boundary-conditions), bei denen im Gegensatz zur Dirichletbedingung $u(x)$ nicht völlig fixiert ist, sondern gefordert wird, dass der zugehörige Knoten in einem ein-dimensionalen Unterraum zu verbleiben hat und dort seine energieminimale Position einnimmt. (Siehe dazu Abbildung 2.4)

Diese Art von Randbedingungen wird zur Behandlung des Kontaktes genutzt. Der Rutschrand ist durch Fixierung eines Punktes s_0 und einer Richtung s wohldefiniert ($\|s\| = 1$). Die Verschiebung u wird in zwei orthogonale Komponenten \tilde{u} entlang des Randes und \hat{u} orthogonal zum Rand zerlegt und die Randbedingung als $\hat{u} = 0$ verstanden.

$$\begin{aligned} u &= \tilde{u} \oplus \hat{u} \\ \tilde{u} &= ss^T u \end{aligned} \quad \implies \quad P = \begin{bmatrix} I & & \\ & ss^T & \\ & & I \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

Somit ist für alle Knoten x_i auf dem Rutschrand der Projektor eine Blockdiagonalmatrix mit 2×2 Blöcken ss^T , wobei s die Rutschrichtung des Knotens x_i ist.

Ebene Halbraumhindernisse

Analog zu den Rutschrandbedingungen lassen sich durch Angabe eines Punktes s_0 und einer Richtung s mit $\|s\| = 1$ Halbraumhindernisse definieren.

Die Behandlung des Kontaktes besteht aus zwei Teilen, dem Erkennen des Eindringens von Knoten in das Hindernis sowie der Korrektur der Verschiebungen für diese Knoten durch gezieltes Einschalten von Projektoren.

Sei x ein kontaktverdächtiger Knoten auf dem Rand von Ω , n die innere Normale des Hindernisses und $a := (x + u) - s_0$.

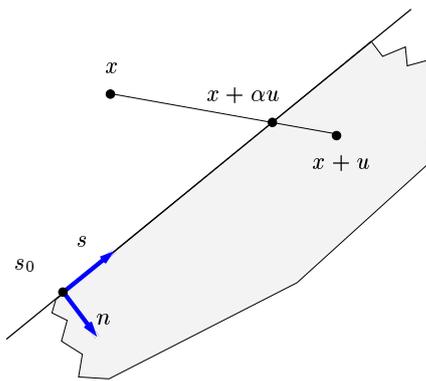


Abbildung 2.5: Halbraumhindernis

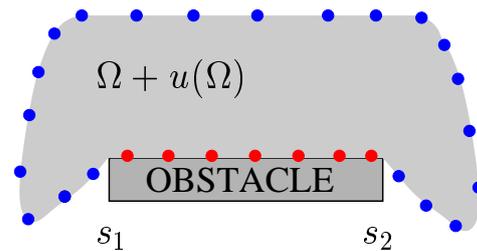


Abbildung 2.6: Endliches ebenes Hindernis

Der Eindringungstest besteht aus der Berechnung von $\langle n, a \rangle$

$$(x + u) \text{ dringt ein} \quad \Leftrightarrow \quad \langle n, a \rangle > 0 \quad (2.2)$$

Ist dieser Test erfüllt, muss einerseits $(x + u)$ zu $(x + \alpha u)$ mit

$$\alpha = \frac{\langle s_0 - x, n \rangle}{\langle u, n \rangle}$$

korrigiert, sowie der entsprechende Projektor analog (2.1) eingeschaltet werden.

Diese beiden Schritte des gesamten Algorithmus erzwingen, dass keine Knoten in das Hindernis eindringen; es kann jedoch passieren, dass an den Enden der (a priori unbekannt) Kontaktzone Knoten „eingefangen“ werden.

Um dies zu verhindern, schließt sich nach dem Lösen des FE-Gleichungssystems mit aktiven Projektoren ein weiterer Test an.

Eine einfache Möglichkeit besteht darin, den Kontaktdruck in der aktuellen Kontaktzone zu berechnen und alle Knoten freizugeben (also die zugehörigen Projektoren auszuschalten), für die sich ein negativer Kontaktdruck ergibt.

Man beachte, dass der PCGM-Löser mit einem zulässigen Startvektor beginnt und durch die Projektionen für die Kontaktknoten nur zulässige Korrekturen bestimmt. Dadurch bleibt auch die Lösung zulässig.

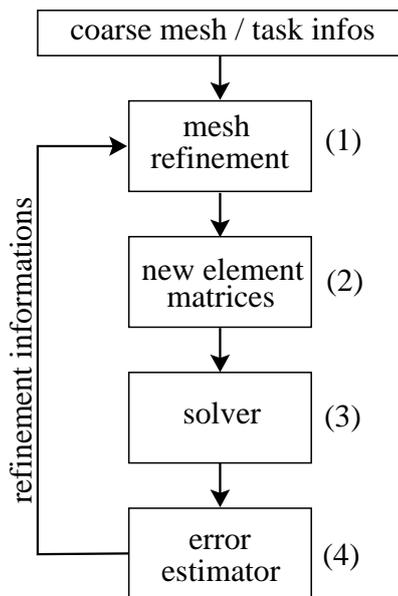


Abbildung 2.7: Normaler Lösungszyklus

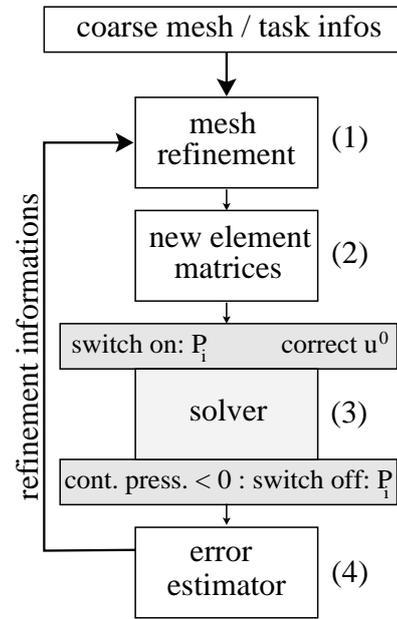


Abbildung 2.8: Der gesamte Zyklus

Der gesamte Algorithmus mit Eindringungstest, Schalten der Projektoren und Testen des Kontaktdruckes ist in Abbildung 2.8 zu sehen, in Abbildung 2.7 ist der normale Zyklus für einen adaptiven FE-Algorithmus aufgeführt.

Endliche ebene Hindernisse

Um neben den Halbraumhindernissen auch endliche ebene Hindernisse behandeln zu können, (siehe Abbildung 2.6) muss der Algorithmus nur ein wenig im Eindringungstest abgeändert werden.

Nur für Knoten zwischen den Enden s_1 und s_2 des Hindernisses darf der Test das Ergebnis „Knoten eingedrungen“ liefern.

Alle anderen Teile des Algorithmus bleiben unverändert.

In Abbildung 2.22 ist ein Beispiel für ein endliches Hindernis zu sehen.

Beschreibung des Hindernisses mit impliziten Funktionen

Eine Beschreibung des Hindernisses mit impliziten Funktionen ermöglicht die Bearbeitung krummlinig berandeter Hindernisse bei gleichzeitig sehr einfachen Eindringungstests.

Sei $F : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ eine gegebene Funktion von $x \in \Omega$. Das Hindernis ist dann definiert durch

$$F(x) \begin{cases} = 0 & \text{auf dem Hindernisrand} \\ < 0 & \text{innerhalb des Hindernisses} \\ > 0 & \text{außerhalb des Hindernisses} \end{cases}$$

Somit kann durch Einsetzen von $x + u$ in F getestet werden, ob ein Eindringen des Knotens vorliegt oder nicht.

Falls der Knoten eindringt, ist durch Lösung einer eindimensionalen, nichtlinearen Gleichung

$$\sigma := F(x + \alpha u) = 0 \tag{2.3}$$

ein Parameter α zu bestimmen, so dass $x + \alpha u$ auf den Rand des Hindernisses kommt. Dies kann z.B. mittels Bisektion erfolgen, gut geeignete Startwerte sind dabei $\alpha = 0$ und $\alpha = 1$, weil diese Werte unterschiedliche Vorzeichen von σ garantieren.

Mit diesem Parameter α wird ein eindimensionaler (affiner) Unterraum für den zugehörigen Knoten definiert und gefordert, dass er auf der Tangente im Punkt $x + \alpha u$ auf dem Hindernisrand verbleibt.

In der Implementierung wird diese Tangente (aus $\nabla F(x + \alpha u)$ berechnet) analog zu einem Halbraumhindernis für diesen einen Knoten behandelt.

Zu berechneten Beispielen siehe Abbildungen 2.23 und 2.24

Hindernisbeschreibung mit Splinekurven

Implizite Funktionen ermöglichen zwar eine einfache Implementierung, sind aber nicht sehr gut geeignet um praktisch relevante Konturen, z.B. von Umformwerkzeugen, zu modellieren. Für diese Zwecke besser geeignet ist eine Beschreibung des Hindernisses durch Splinekurven.

Definition 1 (Splinekurve) Sei $\{(x_1^1, x_2^1), (x_1^2, x_2^2) \dots (x_1^n, x_2^n)\}$ eine Menge gegebener Kontrollpunkte und seien in den Punkten (x_1^1, x_2^1) und (x_1^n, x_2^n) geeignete Randbedingungen festgelegt.

Mit diesen Werten und einem Parameter $t \in [0, 1]$ sind zwei kubische Splines $S_1(t)$ und $S_2(t)$ fixiert.

Somit definiert die Abbildung

$$\Gamma : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^2 \quad \text{mit} \quad \Gamma(t) := \begin{bmatrix} S_1(t) \\ S_2(t) \end{bmatrix} \tag{2.4}$$

in der Ebene eine Splinekurve.

So kann eine Werkzeugkontur mit Angabe einiger Kontrollpunkte und Randbedingungen im ersten und letzten Kontrollpunkt festgelegt werden.

Bei Verwendung von Splinekurven zur Beschreibung des Hindernisses ist, wie auch in den bisherigen Fällen, ein Eindringungstest durchzuführen, wobei die Tangentenrichtung wieder nebenbei abfällt.

Hierzu sei die folgende (nichtlineare) Abbildung $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$

$$\sigma(\alpha, t) := \begin{bmatrix} (x_1 + \alpha u_1) - S_1(t) \\ (x_2 + \alpha u_2) - S_2(t) \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

mit Knotenkoordinaten $x = [x_1, x_2]^T$, Verschiebung $u = [u_1, u_2]^T$ und der Splinekurve $S(t) = [S_1(t), S_2(t)]^T$ definiert.

Somit ist die Berechnung des Schnittpunktes des Hindernisrandes mit der Verschiebungsrichtung des Knotens x ein Nullstellenproblem von σ .

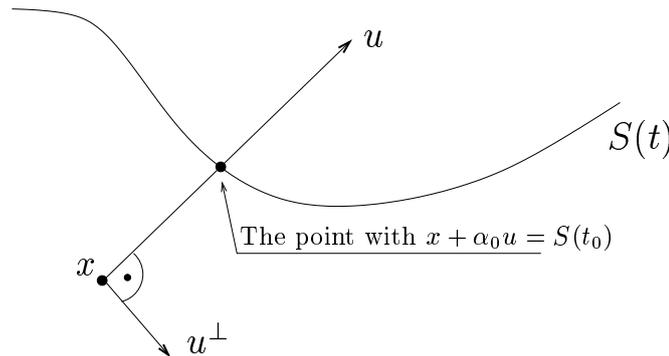


Abbildung 2.9: Eindringungstest und Berechnung des Randpunktes

Mit der Lösung $[\alpha_0, t_0]$ wo $\sigma(\alpha_0, t_0) = 0$ kann die Entscheidung, ob der Knoten eindringt folgendermaßen getroffen werden.

- Für $t_0 < 0$ oder $t_0 > 1$ gibt es keinen Schnitt zwischen der Linie $x + \alpha u$ und dem Hindernis und der Knoten dringt somit nicht ein. In diesem Falle gibt es nichts zu tun, und der Wert von α_0 muss nicht beachtet werden.
- Für $\alpha_0 > 1$ ist der Knoten außerhalb des Hindernisses und muss nicht korrigiert werden
- Für $\alpha_0 < 1$ dringt der Knoten ein, die Verschiebung u muss zu $u := x + \alpha_0 u$ korrigiert und der Projektor eingeschaltet werden. Als zur Definition des Projektors benötigte Normalen- und Tangentenrichtungen am Hindernisrand können dabei die bereits berechneten Ableitungen der Splinekurve verwendet werden. ($s = [\dot{S}_1(t_0), \dot{S}_2(t_0)]^T$)

Prinzipiell ist es möglich, das nichtlineare Nullstellenproblem für die beiden Unbekannten t und α mittels Voriteration durch einige Schritte einer Gradientenmethode und anschließender Newtoniteration zu lösen. Mit einigen Annahmen an den Hindernisrandpunkt kann es jedoch in ein (nichtlineares) 1D-Problem transformiert werden.

Literaturverzeichnis zu 2.3

- [ABCM00] D. N. Arnold, F. Brezzi, B. Cockburn, and D. Marini. Discontinuous Galerkin Methods for Elliptic Problems. In B. Cockburn, G. E. Karniadakis, and C.-W. Shu, editors, *Discontinuous Galerkin Methods*, volume 11 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, pages 89–101. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 2000.
- [Arn82] D. N. Arnold. An interior penalty finite element method with discontinuous elements. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 19(4):742–760, 1982.
- [BD98] D. Braess and W. Dahmen. Stability Estimates of the Mortar Finite Element Method for 3-Dimensional Problems. *East-West J. Numer. Math.*, 6(4):249–264, 1998.
- [BDW99] D. Braess, W. Dahmen, and Ch. Wieners. A Multigrid Algorithm For The Mortar Finite Element Method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 37(1):48–69, 1999.
- [Bel99] F. Ben Belgacem. The Mortar finite element method with Lagrange multipliers. *Numerische Mathematik*, 84:173–197, 1999.
- [BH] R. Becker and P. Hansbo. Discontinuous Galerkin Methods for Convection-Diffusion Problems with Arbitrary Peclet Number. Enumath99.
- [BH99] R. Becker and P. Hansbo. A Finite Element Method for Domain Decomposition with Non-matching Grids. Technical Report INRIA 3613, 1999.
- [BHS03] R. Becker, P. Hansbo and R. Stenberg. A Finite Element Method for Domain Decomposition with Non-matching Grids. *M²AN Math. Model. Numer. Anal.*, 37:209–225, 2003 :287–303, 1999.
- [BMP90] C. Bernardi, Y. Maday, and A. T. Patera. A New Nonconforming Approach to Domain Decomposition: The Mortar Element Method. In H. Brezis and J. L. Lions, editors, *Nonlinear Partial Differential Equations and Their Applications*. Pitman, 1990.
- [LW03] B. B. Lamichhane and B. I. Wohlmuth. Mortar finite elements for interface problems. *Berichte IANS, Univ. Stuttgart*, Preprint 2003/001.
- [Nit71] J. Nitsche. Über ein Variationsprinzip zur Lösung von Dirichlet-Problemen bei Verwendung von Teilräumen, die keinen Randbedingungen unterworfen sind. *Abhandlung aus dem Mathematischen Seminaren der Universität Hamburg*, 36:9–15, 1970/1971.
- [Ste95] R. Stenberg. On some techniques for approximating boundary conditions in the finite element method. *J. Comput. Appl. Math.*, 63(1-3):139–148, 1995.
- [Ste98] R. Stenberg. Mortaring by a method of J.A. Nitsche. In S. Idelsohn, E. Onate, and E. Dvorkin, editors, *Computational Mechanics, New Trends and Applications*. Barcelona, 1998.
- [Tho97] V. Thomeé. *Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems*. Springer Verlag, Berlin, New York, 1997.
- [Woh98] B. I. Wohlmuth. Analysis and Parallel Implementation of Adaptive Mortar Finite Element Methods. *East-West J. of Numer. Math.*, 6:223–248, 1998.
- [Woh99a] B. I. Wohlmuth. Hierarchical A Posteriori Error Estimators for Mortar Finite Element Methods with Lagrange Multipliers. *SIAM J. Numer. Anal.*, 36:1636–1658, 1999.
- [Woh99b] B. I. Wohlmuth. A residual based error estimator for mortar finite element discretizations. *Numer. Mathematik*, 84:143–171, 1999.
- [Woh00] B. I. Wohlmuth. A Mortar Finite Element Method Using Dual Spaces for the Lagrange Multiplier. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 38(3):989–1012, 2000.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe: Analyse des Nitsche-Mortaring für verschiedene elliptische Randwertaufgaben

Einleitend sei bemerkt, dass die Hauptbearbeiterin dieser Teilaufgabe, Frau K. Pönitz, wegen Schwangerschaft/Mutterschaftsurlaub nur im Zeitraum Januar 2002 bis August 2003 an der Projektarbeit teilnehmen konnte. Die Dokumentation der in dieser Zeit erzielten Resultate liegt aus diesem Grund nur partiell vor. Die Resultate zur Teilaufgabe sind in [HP02, HN03, Hei02, Hei03, HP03, Poe04] dargelegt.

Die Herangehensweise sowie einige Resultate werden hier nochmals in skizzierter Form dargelegt. Wir betrachten das Nitsche-Mortaring anhand der Poissongleichung mit gemischten Randbedingungen. Bei den weiteren Aufgabenstellungen wird dann nur noch auf Besonderheiten und Neuerungen eingegangen. Die Resultate zu den gemischten Randbedingungen überdecken den Fall der Randbedingungen 1. Art, der in [HP02] beschrieben ist. Nachfolgend wird die Bezeichnung $H^s(X)$ (X ein Gebiet, $H^0 = L_2$) für Sobolevräume der Ordnung $s \in \mathbb{R}$ benutzt, $\|\cdot\|_{s,X} := \|\cdot\|_{H^s(X)}$ bzw. $|\cdot|_{s,X} := |\cdot|_{H^s(X)}$ bezeichnen die dazugehörigen Normen und Seminormen. Die Konstante C wird generell als generische und von dem Diskretisierungsparameter h unabhängige Konstante verwendet, mit der Symbolik $a \sim b$ die Äquivalenz im Sinne der Ungleichungen $C_1 a \leq b \leq C_2 a$.

Gemischte Randbedingungen

Die Poissongleichung mit gemischten Randbedingungen (homogenen Dirichlet- und inhomogenen Neumannrandbedingungen) wird über beschränkten Gebieten $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ mit polygonalem Rand $\partial\Omega$ betrachtet,

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f && \text{in } \Omega, \\ u &= 0 && \text{auf } \Gamma_D, \\ \frac{\partial u}{\partial n} &= g && \text{auf } \Gamma_N, \end{aligned} \tag{2.6}$$

wobei mit $\Gamma_D \subset \partial\Omega$ der Randabschnitt mit Dirichletrandbedingungen und mit $\Gamma_N \subset \partial\Omega$ entsprechend der Neumanrand bezeichnet wird ($\overline{\Gamma_D} \cup \overline{\Gamma_N} = \partial\Omega$ und $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$). Weiterhin sei $\Gamma_D \neq \emptyset$, $f \in L_2(\Omega)$ und $g \in H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_j)$ für alle geradlinigen Randsegmente $\Gamma_j \subset \Gamma_N$.

Das Gebiet Ω wird entsprechend der nichtüberlappenden Gebietszerlegungsmethode in disjunkte Teilgebiete zerlegt, die selbst wieder polygonal seien. Der Einfachheit halber werden nur zwei Teilgebiete Ω_1 und Ω_2 betrachtet, so dass $\overline{\Omega} = \overline{\Omega_1} \cup \overline{\Omega_2}$ und $\Omega_1 \cap \Omega_2 = \emptyset$ gilt. Der Schnitttrand der beiden Teilgebiete wird mit Γ bezeichnet: $\Gamma = \overline{\Omega_1} \cap \overline{\Omega_2}$.

Es kann nun eine zu Problem (2.6) äquivalente Aufgabe über den einzelnen Teilgebieten formuliert werden, wobei an den Schnittflächen (Interfaces) Kompatibilitätsbedingungen (Interfacebedingungen, Transmissionsbedingungen) zu formulieren sind. Gesucht ist $u = (u^1, u^2)$ (verallgemeinert im 'gebrochenen' H^1), so dass

$$\begin{aligned} -\Delta u^i &= f && \text{in } \Omega_i, && i = 1, 2 \\ u^i &= 0 && \text{auf } \partial\Omega_i \cap \Gamma_D, && i = 1, 2 \\ \frac{\partial u^i}{\partial n_i} &= g && \text{auf } \partial\Omega_i \cap \Gamma_N, && i = 1, 2 \end{aligned} \quad \text{und} \quad \begin{aligned} u^1 &= u^2 && \text{auf } \Gamma, \\ \frac{\partial u^1}{\partial n_1} &= -\frac{\partial u^2}{\partial n_2} && \text{auf } \Gamma, \end{aligned} \tag{2.7}$$

gilt, mit $u^i := u|_{\Omega_i}$ und n_i als äußerer Normale an den Rand $\partial\Omega_i$, $i = 1, 2$.

Mit dieser Aufgabe wird eine diskrete Variationsformulierung assoziiert, die die Stetigkeitsforderung $u^1 = u^2$ auf Γ nur approximativ berücksichtigt und eine Näherung u_h der Lösung u definiert. Dazu sei

$$V_h^i := \{v^i \in H^1(\Omega_i) : v^i|_T \in \mathbb{P}_k(T) \quad \forall T \in \mathcal{T}_h^i, \quad v^i|_{\partial\Omega_i \cap \Gamma_D} = 0\} \quad (2.8)$$

der gewöhnlichen Finite-Elemente-Raum mit Polynomgrad k über der Triangulation $\mathcal{T}_h^i := \mathcal{T}_h(\Omega_i)$ ($i = 1, 2$) bestehend aus Dreiecken T . Der Raum V_h sei definiert durch $V_h = V_h^1 \times V_h^2$. Die Knoten der Dreiecke der Triangulationen \mathcal{T}_h^1 und \mathcal{T}_h^2 auf dem Schnitttrand Γ müssen dabei nicht zusammenpassen, es entstehen für $\mathcal{T}_h := \mathcal{T}_h^1 \cup \mathcal{T}_h^2$ so genannte „non-matching meshes“.

Die FE-Approximation nach Nitsche ist definiert durch $(u_h^1, u_h^2) = u_h \in V_h$, so dass

$$\mathcal{B}_h(u_h, v_h) = \mathcal{F}_h(v_h) \quad \forall v_h \in V_h \quad (2.9)$$

gilt. Die Bilinearform $\mathcal{B}_h(\cdot, \cdot)$ und die Linearform der rechten Seite $\mathcal{F}_h(\cdot)$ sind dabei wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_h(u_h, v_h) &= \sum_{i=1}^2 (\nabla u_h^i, \nabla v_h^i)_{\Omega_i} - \left\langle \alpha_1 \frac{\partial u_h^1}{\partial n_1} - \alpha_2 \frac{\partial u_h^2}{\partial n_2}, v_h^1 - v_h^2 \right\rangle_{\Gamma} \\ &\quad - \left\langle \alpha_1 \frac{\partial v_h^1}{\partial n_1} - \alpha_2 \frac{\partial v_h^2}{\partial n_2}, u_h^1 - u_h^2 \right\rangle_{\Gamma} + \gamma \sum_{E \in \mathcal{E}_h} h_E^{-1} (u_h^1 - u_h^2, v_h^1 - v_h^2)_E \end{aligned} \quad (2.10)$$

und $\mathcal{F}_h(v_h) = \sum_{i=1}^2 ((f, v_h^i)_{\Omega_i} + \langle g, v_h^i \rangle_{\partial\Omega_i \cap \Gamma_N})$. Es bezeichnet $(\cdot, \cdot)_X$ das L_2 -Skalarprodukt für $X \in \{\Omega^i, E\}$ und $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\Gamma}$ das $(H_*^{-\frac{1}{2}}, H_*^{\frac{1}{2}})$ -Dualitätsprodukt auf Γ . Weiterhin sei: \mathcal{E}_h Zerlegung des Interfaces Γ in Intervalle E , h_E die Länge eines Elementes $E \in \mathcal{E}_h$, α_1 und α_2 ($0 \leq \alpha_i \leq 1$, $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$) zwei Parameter, γ eine hinreichend große positive Konstante. Eine Motivation für diesen Ansatz wird bei (2.15)–(2.17) für eine allgemeinere Parameterkonstellation im Hauptteil des Operators gegeben.

Es wurde gezeigt, dass die Variationsformulierung konsistent mit der Lösung u der Randwertaufgabe ist, d.h. es gilt: $\mathcal{B}_h(u, v_h) = 0 \quad \forall v_h \in V_h$. Somit gehört das Nitsche-Mortarverfahren nicht zu den „inneren Penalty-Verfahren“, denen es auf den ersten Blick ähnelt. Die Konstante γ in der Bilinearform (2.10) dient der Stabilisierung des Verfahrens, hängt nicht von h ab, kann aber in Abhängigkeit von der Gestaltsregularität der Netzelemente am Interface abgeschätzt werden.

Für die weiteren Betrachtungen wird eine netzabhängige Norm eingeführt. Diese wird mit $\|\cdot\|_{1,h}$ bezeichnet und ist für $v_h \in V_h$ folgendermaßen definiert:

$$\|v_h\|_{1,h}^2 := \sum_{i=1}^2 \|\nabla v_h^i\|_{0,\Omega_i}^2 + \sum_{E \in \mathcal{E}_h} h_E^{-1} \|v_h^1 - v_h^2\|_{0,E}^2. \quad (2.11)$$

Die Bilinearform ist bezüglich dieser Norm gleichmäßig V_h -elliptisch und V_h -beschränkt, wobei für die Gültigkeit der V_h -Elliptizität der Parameter γ genügend groß gewählt werden muss, genauer gesagt: $\gamma > C_I$, aber unabhängig von h ist. Die Konstante C_I stammt dabei aus der Ungleichung (Typ einer inversen Ungleichung)

$$\sum_{E \in \mathcal{E}_h} h_E \left\| \alpha_1 \frac{\partial v_h^1}{\partial n_1} - \alpha_2 \frac{\partial v_h^2}{\partial n_2} \right\|_{0,E}^2 \leq C_I \sum_{i=1}^2 \|\nabla v_h^i\|_{0,\Omega_i}^2 \quad \forall v_h \in V_h \quad (2.12)$$

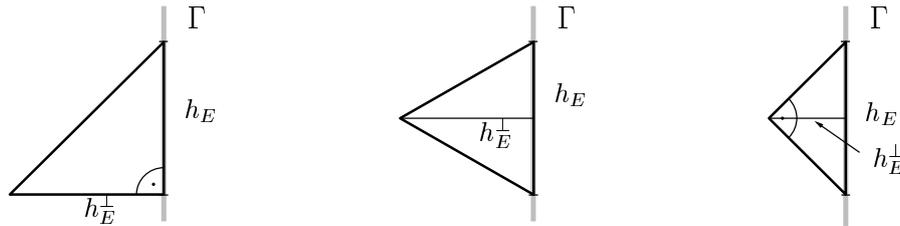


Abbildung 2.10: Beispiele für C_I (links: $C_I = 2$, Mitte: $C_I = \frac{4}{\sqrt{3}}$, rechts: $C_I = 4$)

und kann leicht bestimmt werden. Zum Beispiel gilt für den Fall linearer Ansatzfunktionen und $\mathcal{E}_h = \mathcal{E}_h^i$ (Einschränkung von \mathcal{T}_h^i auf Γ) sowie $\alpha_i = 1$ für $i \in \{1, 2\}$: $C_I = 2 \sup_{h < h_0} \max_{E \in \mathcal{E}_h^i} \left(\frac{h_E}{h_E^\perp} \right)$, wobei h_E die Länge der Dreiecksseite E und h_E^\perp die Höhe des Dreiecks T_E über dieser Seite bezeichnet, siehe Abbildung 2.10.

Für die Gültigkeit der Ungleichung (2.12) sowie der späteren Fehlerabschätzungen wird noch eine lokal wirkende Verträglichkeitsannahme der Triangulationen \mathcal{T}_h^i mit der Zerlegung \mathcal{E}_h von Γ vorausgesetzt (auf die hier nicht eingegangen wird, siehe etwa [HP02, HN03]), die aber noch gewisse nicht quasi-uniforme Netze, wie z.B. graduierte Netze in der Umgebung von Ecken, zulässt.

Es ist bekannt, dass die Lösung von Aufgabe (2.6) über polygonalen Gebieten lokale Singularitäten aufweist. Jedoch kann die Lösung in einen regulären und einen singulären Anteil zerlegt werden, wobei der Grad der Singularität von den Innenwinkeln ω und der Art der anliegenden Randbedingungen an den Ecken P abhängt. Für die Lösung von (2.6) gilt $u = u_{\text{re}} + u_{\text{si}}$ mit dem regulären Anteil $u_{\text{re}} \in H^2(\Omega)$ und dem singulären Lösungsanteil $u_{\text{si}} \in H^{1+\lambda-\delta}(\Omega)$, wobei $\lambda \in (0, 1)$ der Singularitätenexponent ist, $\delta \in (0, \lambda)$.

Für die Fehlerabschätzungen beim Mortaring nach Nitsche sind unter anderem Dualitätsprodukte der Art $\left\langle \frac{\partial u}{\partial x_s}, w_h \right\rangle_E$ (w_h stückweise polynomial, $\frac{\partial u}{\partial x_s}$: Spur der partiellen Ableitung) für Intervalle $E \subset \Omega$ abzuschätzen. Da auf Grund der geringen Regularität der Lösung $u \in H^{1+\lambda-\delta}(\Omega)$ im Allgemeinen $\frac{\partial u}{\partial x_s} \notin L_2(E)$ gilt, werden für Singularitätsexponenten $\lambda \leq \frac{1}{2}$ L_2 -Räume mit Potenzgewichten des Eckenabstandes r verwendet. Für u folgt dann $r^\beta \frac{\partial u}{\partial x_s} \in L_2(E)$, falls $\beta > \frac{1}{2} - \lambda + \delta$ und r der Abstand zur Ecke P ist. Ebenfalls lässt sich $r^{-\beta} w_h \in L_2(E)$ für $\beta < \frac{1}{2}$ zeigen. Damit kann für die beim Mortaring nach Nitsche zu betrachtenden Dualitätsprodukte für $\beta \in (\frac{1}{2} - \lambda, \frac{1}{2})$ die Cauchy-Schwarz-Ungleichung mit gewichteten Normen benutzt werden, also $\left| \left\langle \frac{\partial u}{\partial x_s}, w_h \right\rangle_E \right| \leq \left\| r^\beta \frac{\partial u}{\partial x_s} \right\|_{0,E} \left\| r^{-\beta} w_h \right\|_{0,E}$.

Wie bekannt, vermindert die geringere Regularität der Lösung von Problemen mit Ecken-singularitäten die Konvergenzordnung und vergrößert i.a. auch den lokalen Fehler der Finite-Elemente-Approximation. Zur Kompensation gibt es mehrere Möglichkeiten, von denen hier die Verwendung lokal graduierter Netze betrachtet wird. Diese werden mit Hilfe eines reellen Parameters $\mu \in (0, 1]$ beschrieben, und zwar derart, dass für den

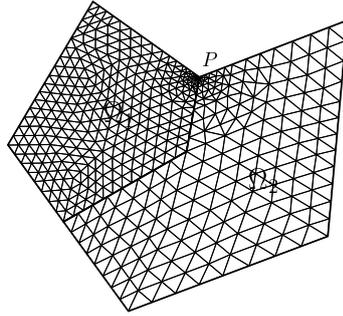


Abbildung 2.11: Graduiertes Netz

Durchmesser h_T der Elemente T der Triangulationen die Beziehung

$$h_T \sim \begin{cases} h^\mu & \text{für } r_T = 0 \\ r_T^{1-\mu} h & \text{für } 0 < r_T < R_J \\ h & \text{für } r_T \geq R_J \end{cases}$$

gilt. Hier bezeichnet r_T den Abstand des Elementes T von der einspringenden Ecke, R_J den Radius des Sektors um die einspringende Ecke, in dem das Netz verfeinert wird. Der Parameter μ gibt den Grad der lokalen Netzverfeinerung an. Für $\mu = 1$ ist das Netz nicht graduiert und quasi-uniform, und für $0 < \mu < 1$ wird die lokale Maschenweite zur einspringenden Ecke hin immer kleiner, siehe Abbildung 2.11, vergl. auch [Ape99, Hei96, HNW00].

Für den Verfahrensfehler $\|u - u_h\|_{1,h}$ der Finite-Elemente-Approximation nach Nitsche $u_h \in V_h$ gemäß (2.9), mit Polynomgrad $k = 1$ auf graduierten Dreiecksnetzen, wurde die Abschätzung

$$\|u - u_h\|_{1,h} \leq C \kappa(h, \mu) \left(\|f\|_{0,\Omega} + \|g\|_{\frac{1}{2},\Gamma_N} \right)$$

unter der Voraussetzung $u \in H^{1+\lambda-\delta}(\Omega)$ bewiesen, mit einer von h unabhängigen Konstante C und der Funktion

$$\kappa(h, \mu) := \begin{cases} h^\lambda & \text{für } \lambda < \mu \leq 1 \\ h |\ln h|^{\frac{1}{2}} & \text{für } \mu = \lambda \\ h & \text{für } 0 < \mu < \lambda < 1. \end{cases} \quad (2.13)$$

Dabei ist h der Diskretisierungsparameter ($h \leq h_0$), λ der Singularitätsexponent und μ der Graduierungsparameter des Netzes.

Somit werden beim Mortaring nach Nitsche dieselben Konvergenzraten wie bei klassischen Finite-Elemente-Methoden auf konformen Triangulationen und bei regulärer Lösung $u \in H^2(\Omega)$ erreicht. Insbesondere ist der Approximationsfehler für Netze ohne Graduierung ($\mu = 1$), wie bei Eckensingularitäten zu erwarten, nur von der Ordnung $\mathcal{O}(h^\lambda)$. Für ausreichend graduierte Netze ($\mu < \lambda$) wird hingegen die optimale Fehlerordnung $\mathcal{O}(h)$ angenommen.

Die Abschätzung des Fehlers $\|u - u_h\|_{1,h}$ kann in mehrere Teilschritte gegliedert werden. Zuerst wird ähnlich wie beim Lemma von Céa der Approximationsfehler gegen den Interpolationsfehler beschränkt, allerdings in einer weiteren netzabhängigen Norm, die

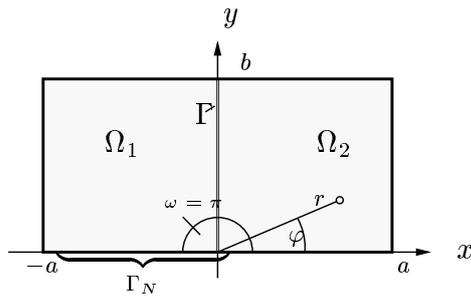


Abbildung 2.12: Berechnungsgebiet

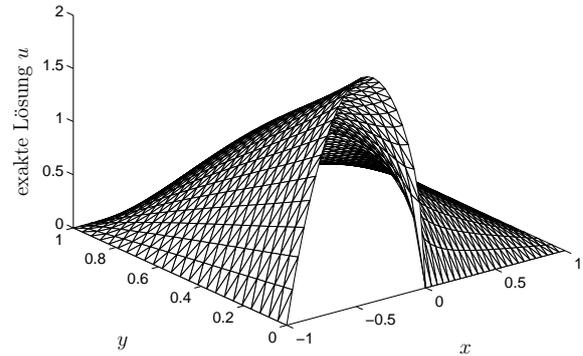


Abbildung 2.13: Lösung u auf nichtgraduiertem h_3 -Netz

die Normalenableitung des Interpolationsfehlers längs Γ enthält. Diese Norm wird dann jeweils für den regulären und den singulären Lösungsanteil (u_{re} und u_{si}) abgeschätzt und schließlich gegen die Daten beschränkt. In den Beweisen wurden noch einige Hilfssätze für den Umgang mit gewichteten Normen benötigt, wie sie beispielweise auch in [HN03] gezeigt wurden.

Der Fehler $u - u_h$ wurde ebenfalls in der L_2 -Norm abgeschätzt; es gilt hier

$$\|u - u_h\|_{0,\Omega} \leq C \kappa^2(h, \mu) \left(\|f\|_{0,\Omega} + \|g\|_{\frac{1}{2},\Gamma_N} \right),$$

mit $\kappa(h, \mu)$ wie in (2.13) gegeben. Der Fehler in der L_2 -Norm konvergiert also, wie erwartet und auch in numerischen Experimenten beobachtet, doppelt so rasch wie der Fehler in der $\|\cdot\|_{1,h}$ -Norm.

Das Berechnen der Systemsteifigkeitsmatrix erfordert die Berechnung von Gebietsintegralen wie beim klassischen Galerkin-Verfahren, wegen der Mortar-Terme in der Bilinearform zusätzlich auch von Kurvenintegralen längs Γ . Die entstehende Matrix ist aber ebenfalls symmetrisch und positiv definit, und die Konditionszahl ist von der Ordnung $O(h^{-2})$, auch für die hier betrachteten nichtkonsistenten und gradierten Netze.

Die Ergebnisse von experimentellen Tests werden hier am Beispiel der Aufgabe (2.6) über dem Gebiet $\Omega = (-a, a) \times (0, b) \subset \mathbb{R}^2$ ($a = b = 1$) mit Neumannrandbedingungen auf $\Gamma_N = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : y = 0, x \in (-a, 0)\}$ und homogenen Dirichletrandbedingungen auf dem übrigen Rand, also auf $\Gamma_D = \partial\Omega \setminus \Gamma_N$, dargestellt. Dabei seien die rechte Seite f und die Randdaten g so gewählt, dass für die exakte Lösung

$$u = 4(x^2 - a^2)(y - b)r^\lambda \sin(\lambda\varphi)$$

gilt, wobei (r, φ) die Polarkoordinaten an dem singulären Punkt $P = (0, 0)$ sind und $\lambda = \frac{\pi}{2\omega} = \frac{1}{2}$ gelte, siehe Abbildung 2.12 und 2.13.

Für die Mortar-Methode nach Nitsche wird das Gebiet Ω in zwei Teilgebiete $\Omega_1 = (-a, 0) \times (0, b)$ und $\Omega_2 = (0, a) \times (0, b)$ zerlegt, die unabhängig voneinander vernetzt werden, so dass Anfangsnetze mit dem Diskretisierungsparameter h_0 , wie in Abbildung 2.14 dargestellt, entstehen, deren Knoten auf der Schnittkante Γ nicht zusammenfallen. Für die durchgeführten Berechnungen werden diese Anfangsnetze verfeinert, in dem der Diskretisierungsparameter h jeweils halbiert wird. Bei den Netzen mit lokaler Graduierung

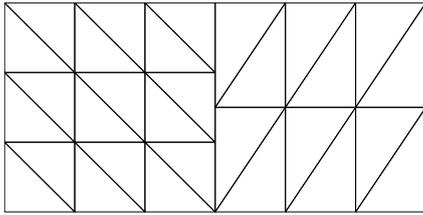


Abbildung 2.14: Anfangsnetz (h_0 -Level)

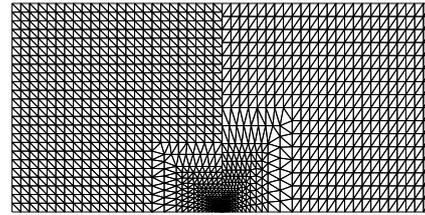


Abbildung 2.15: Netz mit Graduierung (h_3 -Level)

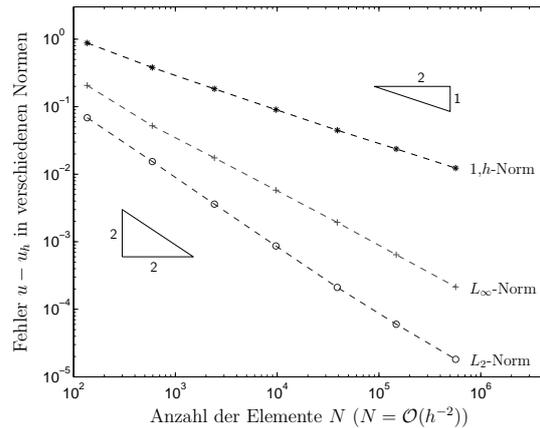
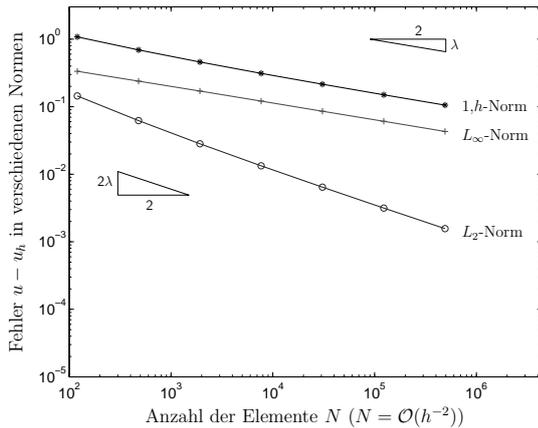


Abbildung 2.16: Fehler in verschiedenen Normen auf Netzen ohne Graduierung (links) und mit Graduierung (rechts) ($\gamma = 7, \alpha_1 = 1, \mathcal{E}_h = \mathcal{E}_h^1$)

wird neben der gewöhnlichen Viertelung der Dreiecke außerhalb des Graduierungsgebietes, innerhalb mit $\mu = 0.9\lambda = 0.45$ graduell verfeinert (siehe Abbildung 2.15).

Da die Lösung u explizit bekannt ist, können der Fehler $u - u_h$ der Näherung u_h in verschiedenen Normen angegeben und die Konvergenzrate bezüglich h näherungsweise berechnet werden. In Abbildung 2.16 ist der Fehler $u - u_h$ in der Norm $\|\cdot\|_{1,h}$ sowie auch in der L_2 - und L_∞ -Norm über der Anzahl N der Dreieckselemente $T \in \mathcal{T}_h$ abgetragen. Die eingezeichneten Dreiecke sollen die Anstiege der Fehlerkurven verdeutlichen und ermöglichen das Ablesen der Konvergenzordnung bezüglich h . Man erkennt, dass die im Experiment beobachteten Konvergenzraten in der Norm $\|\cdot\|_{1,h}$ und der L_2 -Norm gut mit den theoretisch bewiesenen übereinstimmen. Das heißt, für nicht graduierte Netze und in der Norm $\|\cdot\|_{1,h}$ hat der Exponent β der Konvergenzrate $\mathcal{O}(h^\beta)$ ungefähr den Wert $\beta \approx \lambda = 0.5$ und für Netze mit Graduierung gilt $\beta \approx 1$. Die Konvergenzraten $\mathcal{O}(h^\beta)$ in der L_2 -Norm sind jeweils doppelt so groß, also $\beta \approx 2\lambda = 1$ (ohne Graduierung) und $\beta \approx 2$ (mit Graduierung).

In Abbildung 2.17 wird der Einfluss der Singularität und die Verringerung des absoluten Fehlers bei Verwendung von graduierten gegenüber quasiuniformen Netzen ebenfalls gut sichtbar.

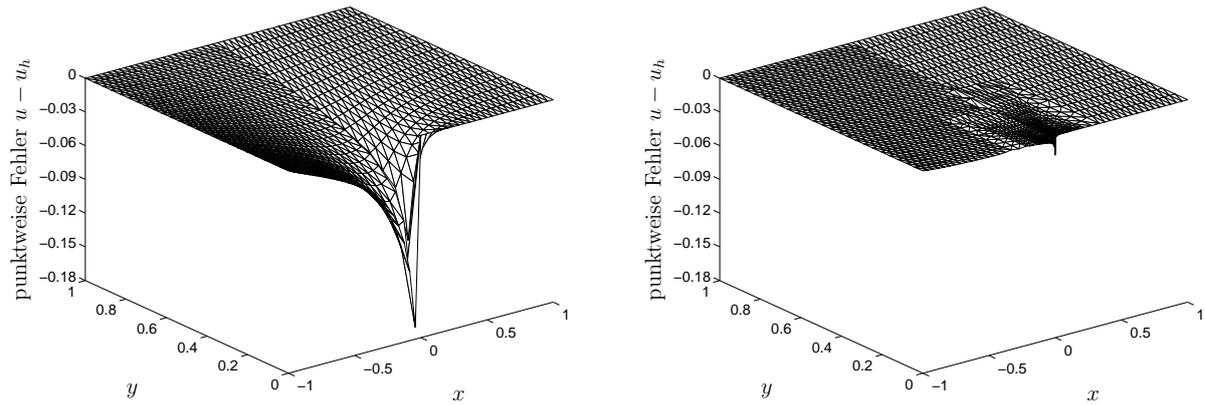


Abbildung 2.17: Punktweise Fehler auf dreimal verfeinerten Netzen (links ohne und rechts mit Graduierung)

Singulär gestörte Reaktions-Diffusions-Probleme

In [HP03] wird das Nitsche Mortaring für singulär gestörte Diffusions-Reaktionsprobleme vom Typ $-\varepsilon^2 \Delta u + cu = f$ in Ω , $u = 0$ auf $\partial\Omega$, entwickelt, wobei Ω ein Rechteckgebiet ist. Das bei kleinem Parameter ε ($0 < \varepsilon \ll 1$) entstehende Randschichtgebiet R der Breite $\mathcal{O}(\varepsilon|\ln\varepsilon|)$ wird mit anisotropen Dreiecken vernetzt, das Restgebiet $\Omega \setminus R$ mit isotropen Dreiecken. Am Interface Γ der Gebietszerlegung, das den inneren Teil $\Omega \setminus R$ des Gebietes vom Randschichtbereich R trennt, stoßen isotrope und anisotrope Dreiecke aneinander. Für diese Kombinationen nichtkonsistenter isotroper und anisotroper Netze werden Finite-Elemente-Näherungen der RWA vom Nitsche-Typ aus der Sicht der Numerischen Analysis begründet. Die Resultate und der Zugang zum Nitsche-Mortaring, die im Folgenden skizziert werden, sind in [HP03] für Rechtecke Ω sowie reguläre Lösungen $u \in H^2(\Omega)$ dargelegt und werden durch numerische Beispiele illustriert.

Betrachtet wird das Modellproblem einer Reaktions-Diffusions Gleichung auf einem Rechteck Ω wie folgt:

$$\begin{aligned} Lu := -\varepsilon^2 \Delta u + cu &= f \quad \text{in } \Omega \subset \mathbb{R}^2 \\ u &= 0 \quad \text{on } \partial\Omega. \end{aligned} \tag{2.14}$$

Dabei wird angenommen, dass $0 < \varepsilon < 1$ and $0 < c_0 \leq c(x)$ ($x \in \Omega$) gelten, f hinreichend glatt sei, mindestens $f \in L_2(\Omega)$. Für kleine Werte von ε , $0 < \varepsilon \ll 1$, zeigt die Lösung u i.a. Randschichtverhalten. Das Gebiet Ω wird wieder in nichtüberlappende Teilgebiete Ω_1 und Ω_2 zerlegt, so dass die RWA äquivalent zu folgender Aufgabe ist. Finde $u = (u^1, u^2)$ derart, dass die Gleichungen

$$\begin{aligned} -\varepsilon^2 \Delta u^i + cu^i &= f^i \quad \text{in } \Omega_i, \quad u^i = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega_i \cap \partial\Omega, \quad \text{für } i = 1, 2, \\ \frac{\partial u^1}{\partial n_1} + \frac{\partial u^2}{\partial n_2} &= 0 \quad \text{auf } \Gamma, \quad u^1 = u^2 \quad \text{auf } \Gamma, \end{aligned} \tag{2.15}$$

erfüllt sind, wobei n_i die Außennormale an $\partial\Omega_i \cap \Gamma$ ($i = 1, 2$) ist. Wir verwenden nachfolgend $V := V^1 \times V^2$, wobei $V^i := \{v^i : v^i \in H^1(\Omega_i), v^i|_{\partial\Omega \cap \partial\Omega_i} = 0\}$ für $\partial\Omega \cap \partial\Omega_i \neq \emptyset$, $V^i := H^1(\Omega_i)$ für $\partial\Omega \cap \partial\Omega_i = \emptyset$ definiert ist. Dann kann die folgende Variationsgleichung

notiert werden,

$$\sum_{i=1}^2 \left(\int_{\Omega_i} \varepsilon^2 (\nabla u^i, \nabla v^i) dx + \int_{\Omega_i} cuv dx - \left\langle \varepsilon^2 \frac{\partial u^i}{\partial n_i}, v^i \right\rangle_{\Gamma} \right) = \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega_i} f^i v^i dx \quad \forall v \in V. \quad (2.16)$$

Wegen $\frac{\partial u^1}{\partial n_1} = \alpha_1 \frac{\partial u^1}{\partial n_1} - \alpha_2 \frac{\partial u^2}{\partial n_2} = -\frac{\partial u^2}{\partial n_2}$ für beliebiges $\alpha_i \geq 0$ ($i = 1, 2$) mit $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ ist die folgende Gleichung äquivalent zur vorangegangenen:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^2 \left(\int_{\Omega_i} \varepsilon^2 (\nabla u^i, \nabla v^i) dx + \int_{\Omega_i} cuv dx \right) - \left\langle \alpha_1 \varepsilon^2 \frac{\partial u^1}{\partial n_1} - \alpha_2 \varepsilon^2 \frac{\partial u^2}{\partial n_2}, v^1 - v^2 \right\rangle_{\Gamma} \\ & - \left\langle \alpha_1 \varepsilon^2 \frac{\partial v^1}{\partial n_1} - \alpha_2 \varepsilon^2 \frac{\partial v^2}{\partial n_2}, u^1 - u^2 \right\rangle_{\Gamma} + \int_{\Gamma} \sigma (u^1 - u^2) (v^1 - v^2) ds = \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega_i} f^i v^i dx. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Es sei bemerkt, dass die zwei zusätzlichen Terme, die $u^1 - u^2$ enthalten, hier beide gleich Null sind, in der Approximation nicht verschwinden und künstlich aus folgendem Grund eingeführt worden sind. Der erste bewirkt die Symmetrie, der zweite penalisiert (nach der Diskretisierung) den Sprung der Näherungslösung und garantiert die Stabilität im Fall einer geeignet gewählten Gewichtsfunktion $\sigma > 0$. Die Finite-Elemente-Methode nach Nitsche ist durch die Diskretisierung der obigen Gleichung gegeben. Dabei wird ein Finite-Elemente-Unterraum V_h von V benutzt, der nichtkonforme Triangulationen und Unstetigkeiten der finiten Elemente längs Γ zulässt. Die Funktion σ wird mit $\gamma \varepsilon^2 h^{-1}(x)$ angesetzt, wobei $\gamma > 0$ eine hinreichend große Konstante ist, $h(x)$ eine Maschenparameterfunktion auf Γ .

Der Finite-Elemente-Raum V_h^i (Unterraum von V^i) von Funktionen v^i auf Ω_i wird wie folgt eingeführt: $V_h^i := \{v^i \in H^1(\Omega_i) : v^i|_T \in \mathbb{P}_k(T) \quad \forall T \in \mathcal{T}_h^i, v^i|_{\partial\Omega_i \cap \partial\Omega} = 0\}$, der Raum V_h durch $V_h := V_h^1 \times V_h^2 = \{v_h = (v_h^1, v_h^2) : v_h^1 \in V_h^1, v_h^2 \in V_h^2\}$ definiert. Für die Approximation von u auf V_h fixieren wir eine positive Konstante γ sowie reelle Parameter α_1, α_2 und führen die Bilinearform $\mathcal{B}_h(\cdot, \cdot)$ auf $V_h \times V_h$ und die Linearform $\mathcal{F}_h(\cdot)$ auf V_h wie folgt ein:

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_h(u_h, v_h) & := \sum_{i=1}^2 \left(\varepsilon^2 (\nabla u_h^i, \nabla v_h^i)_{\Omega_i} + (cu_h^i, v_h^i)_{\Omega_i} \right) - \left\langle \alpha_1 \varepsilon^2 \frac{\partial u_h^1}{\partial n_1} - \alpha_2 \varepsilon^2 \frac{\partial u_h^2}{\partial n_2}, v_h^1 - v_h^2 \right\rangle_{\Gamma} \\ & - \left\langle \alpha_1 \varepsilon^2 \frac{\partial v_h^1}{\partial n_1} - \alpha_2 \varepsilon^2 \frac{\partial v_h^2}{\partial n_2}, u_h^1 - u_h^2 \right\rangle_{\Gamma} + \varepsilon^2 \gamma \sum_{E \in \mathcal{E}_h} h_E^{-1} (u_h^1 - u_h^2, v_h^1 - v_h^2)_E, \\ \mathcal{F}_h(v_h) & := \sum_{i=1}^2 (f, v_h^i)_{\Omega_i}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Die Gewichte im vierten Term von \mathcal{B}_h approximieren die Funktion $\sigma = \gamma \varepsilon^2 h^{-1}(x)$ und garantieren die Stabilität der Methode, falls γ hinreichend groß gewählt wird ($\gamma > C_I$). Die Nitsche-Finite-Elemente-Approximation u_h der Lösung u ist definiert durch $u_h = (u_h^1, u_h^2) \in V_h^1 \times V_h^2$ als Lösung von

$$\mathcal{B}_h(u_h, v_h) = \mathcal{F}_h(v_h) \quad \forall v_h \in V_h. \quad (2.19)$$

Zur optimalen Approximation der Lösung in der Randschicht werden anisotrope Dreiecke benutzt ([AN98, Ape99]). Die Gebietszerlegung kann so gewählt sein, dass anisotrope und isotrope (gestaltsreguläre) Dreiecke nichtkonsistent aneinander stoßen. Die Ungleichung (2.12) gilt im Fall isotroper Netze unverändert. Im Fall anisotroper Netze bleibt diese Ungleichung ebenfalls gültig, falls die Voraussetzung $h_F/h_F^\perp \leq C < \infty$ für alle Dreiecksseiten F mit Kontakt zum Interface Γ erfüllt ist. Für Details siehe [HP03]. Zur Herleitung der Stabilität der Bilinearform $\mathcal{B}_h(\cdot, \cdot)$ führen wir die diskrete Energie-ähnliche Norm $\|\cdot\|_{1,h}$ ein, die von ε^2 , $c(x)$ und vom Netz abhängt:

$$\|v_h\|_{1,h}^2 = \sum_{i=1}^2 \left(\varepsilon^2 \|\nabla v_h^i\|_{0,\Omega_i}^2 + \|\sqrt{c}v_h^i\|_{0,\Omega_i}^2 \right) + \varepsilon^2 \sum_{E \in \mathcal{E}_h} h_E^{-1} \|v_h^1 - v_h^2\|_{0,E}^2. \quad (2.20)$$

In dieser Norm können Stabilität und Beschränktheit der Bilinearform gleichmäßig bezüglich ε und h bewiesen werden. Die Fehlerabschätzungen basieren auf der in [HP03] bewiesenen Ungleichung

$$\|u - u_h\|_{1,h} \leq C \|u - I_h u\|_{h,\Omega}, \quad (2.21)$$

mit C unabhängig von $h \in (0, h_0]$ und $\varepsilon \in (0, 1)$. Hier wird eine zweite diskrete Norm $\|\cdot\|_{h,\Omega}$ verwendet, die von der Bilinearform $\mathcal{B}_h(\cdot, \cdot)$ abgeleitet ist:

$$\|v\|_{h,\Omega}^2 = \sum_{i=1}^2 \left(\varepsilon^2 \|\nabla v^i\|_{0,\Omega_i}^2 + \|\sqrt{c}v^i\|_{0,\Omega_i}^2 + \varepsilon^2 \sum_{E \in \mathcal{E}_h} h_E \left\| \alpha_i \frac{\partial v^i}{\partial n_i} \right\|_{0,E}^2 \right) + \varepsilon^2 \sum_{E \in \mathcal{E}_h} h_E^{-1} \|v^1 - v^2\|_{0,E}^2. \quad (2.22)$$

Unter der Annahme realistischer Glattheitsvoraussetzungen über die Lösung u in Abhängigkeit von ε , vergl. etwa [Ape99], kann die folgende Abschätzung für den Fehler $u - u_h$ (u_h von (2.19)) bewiesen werden, die zugleich die Konvergenz gleichmäßig bezüglich des Parameters ε ausweist:

$$\|u - u_h\|_{1,h}^2 \leq C (\varepsilon |\ln \varepsilon|^3 h^2 + h^4).$$

Die Konstante C ist unabhängig von $h \in (0, h_0]$ und $\varepsilon \in (0, 1)$.

Zur Illustration der theoretischen Resultate zur Konvergenz wird in [HP03] folgendes Randwertproblem betrachtet:

$$-\varepsilon^2 \Delta u + u = 0 \quad \text{in } \Omega, \quad u = -e^{-\frac{x}{\varepsilon}} - e^{-\frac{y}{\varepsilon}} \quad \text{on } \partial\Omega, \quad (2.23)$$

wobei Ω durch $\Omega = (0, 1)^2 \subset \mathbb{R}^2$ gegeben ist. Das Gebiet wird wie in der Abbildung ersichtlich vernetzt. Die Experimente zeigen, dass selbst für sehr kleine Werte von ε die theoretisch bewiesenen Konvergenzraten erreicht werden, wenn die Breite der Randschicht adäquat gewählt wird.

Interface Probleme

In [HN03] (siehe auch [Hei03] für eine kurze Übersicht) wird die Mortar-Methode nach Nitsche für Interfaceprobleme mit unstetigen Koeffizienten und Transmissionsbedingungen betrachtet. Die Interfaces für Gebietsdekomposition und die Transmissionsbedingungen dürfen hier zusammenfallen. Die Transmissionsbedingungen lassen im Allgemeinen

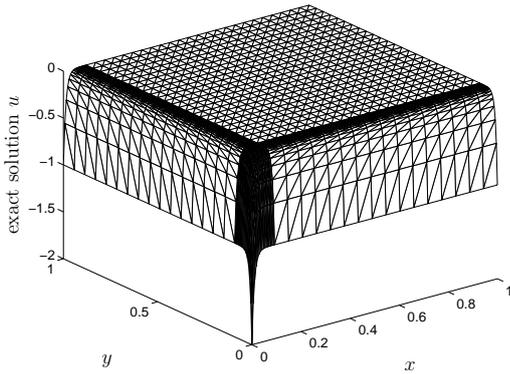


Abb. 2.18: Lösung u auf dem h_3 -Netz für $\varepsilon = 10^{-2}$

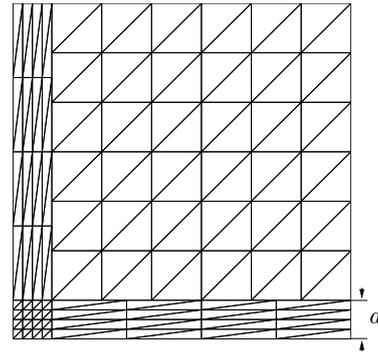


Abb. 2.19: h_1 -Netz, Randschichtbreite a

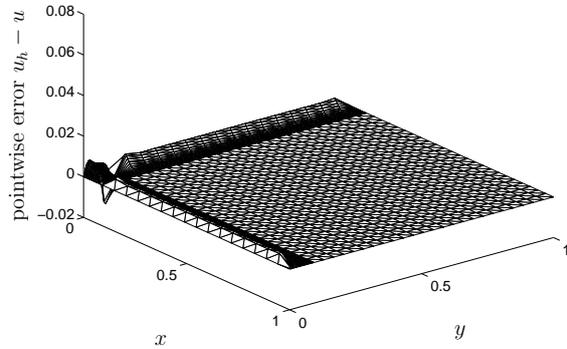
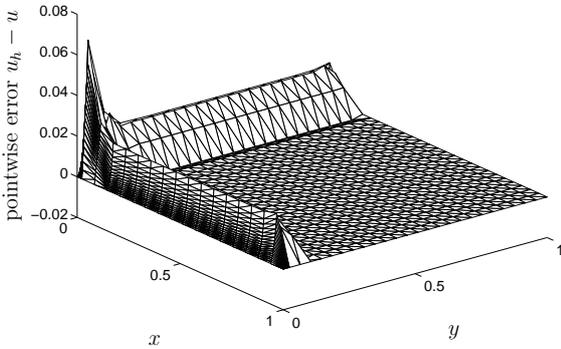


Abb. 2.20: Punktweiser Fehler $u_h - u$ für $\varepsilon = 10^{-2}$ und für $\mathcal{E}_h = \mathcal{E}_h^2$ ($\alpha_2 = 1$) auf Netzen mit $a = \varepsilon |\ln \varepsilon|$ (links) und $a = 2\varepsilon |\ln \varepsilon|$ (rechts)

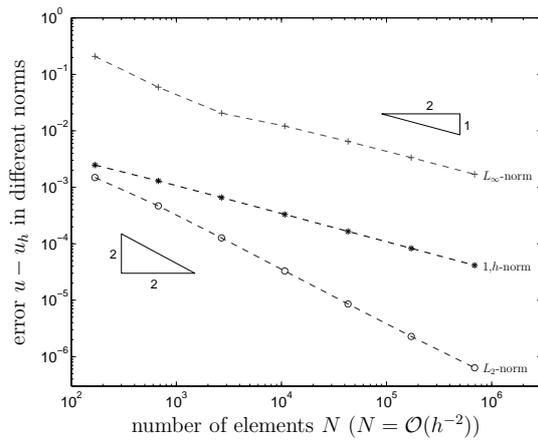
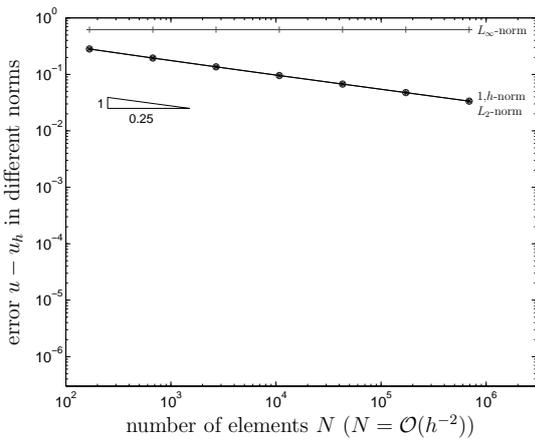


Abbildung 2.21: Beobachteter Fehler $u - u_h$ in der L_2 -, L_∞ - und $\|\cdot\|_{1,h}$ -Norm für $\varepsilon = 10^{-5}$, $a = 0.5$ (links) und $a = \varepsilon |\ln \varepsilon|$ (rechts)

nur Lösungen u des Randwertproblems zu, für die gilt: $u \in H^{1+\delta}(\Omega)$, $\delta > 0$, δ beliebig. In [HN03] werden für die Behandlung der Normalenableitung $(\frac{\partial u}{\partial n}|_{\Gamma} \notin L_2(\Gamma))$, Γ Interface) Sobolevräume mit Potenzgewichten r^β (β reell) angewendet und neue Werkzeuge (Fehlerfunktionale, Spursätze) für die Fehlerabschätzung entwickelt. Diese führen auch bei verminderter Glattheit der Lösung zu optimalen Fehlerabschätzungen in einer diskreten H^1 -ähnlichen und der L_2 -Norm. So können für stückweise lineare Ansätze, die unstetig auf polygonalem Interface Γ sind, die Konvergenzraten $\mathcal{O}(h)$ bzw. $\mathcal{O}(h^2)$ nachgewiesen werden. Im Ergebnis numerischer Experimente werden Aussagen zu den Konvergenzraten gemacht, die in guter Übereinstimmung mit den theoretischen Resultaten liegen. Die Methode reagiert auf die Wahl von γ (oberhalb des theoretischen Minimalwertes: $\gamma > C_I$) nicht sensitiv, der Verfahrensfehler ist für sehr große Bereiche von γ fast konstant.

2.4.2 Teilproblem: Discontinuous–Galerkin Methode

Der betreuende Bearbeiter dieses Teilthemas, Prof. Schneider, konnte wegen Rufannahme in Kiel nur im Zeitraum 2002 – September 2003 in Chemnitz im SFB mitarbeiten. Im Berichtszeitraum ist eine Diplomarbeit entstanden, die sich mit der Realisierung der im Antrag vorgeschlagenen Multiwavelets beschäftigte. Gemeinsam mit den Gästen Prof. Aihui Zhou und Dr. Li von der Chinesischen Akademie der Wissenschaften in Peking wurde im Berichtszeitraum in der Arbeitsgruppe Schneider ebenfalls an Discontinuous Galerkin und geeigneten Multiwaveletbasen gearbeitet. Die Diplomandin Claudia Franken hat in ihrer Diplomarbeit [Fra03] anstelle eines Discontinuous-Galerkin-Ansatzes mit stückweise linearen Ansatzfunktionen eine schwache Kopplung zwischen den Elementen analog zu den Mortarmethoden verwendet. In diesem Fall ist es im Prinzip sogar möglich die Kopplungsnebenbedingung zu eliminieren, man endet dann bei Crouzieux-Raviart-Elementen, wovon aber kein Gebrauch gemacht wurde. Von den vorgeschlagenen Multiskalenbasen sind unter Weglassen eines Types alle Basisfunktionen orthogonal bezüglich der durch den gebrochenen Laplace-Operator definierten Bilinearform, d.h. innerhalb der Elemente. Die Kopplungsnebenbedingungen bestimmen jedoch die Kondition des Systems. Diese Kopplungsnebenbedingungen mussten explizit auch über eine Multiskalenbasis über dem Skelett der Elementkanten realisiert werden. So konnte eine Vorkonditionierung realisiert werden, die noch (wie die numerischen Ergebnisse belegen) auf ein logarithmisches Wachsen hindeutet. Diese Vorkonditionierung hat sich jedoch bislang noch nicht auf das Discontinuous Galerkin übertragen lassen. Auch hinsichtlich der Theorie konnte die Situation bislang nicht geklärt werden. Das Weglassen des einen Basistyps erfordert erneut den Nachweise einer diskreten LBB-Bedingung für die verwendeten Ansatzräume. Hier liegt nun aufgrund der Multiskalenbasis eine vollkommen neuartige Situation vor, die bislang noch nicht behandelt ist. Für Multiwaveletbasen gibt es bis dato keine der Normäquivalenz entsprechenden Aussagen, so dass die Behandlung elliptischer Randwertprobleme, insbesondere die Vorkonditionierung mit unstetigen Multiwavelets im Zusammenhang mit Discontinuous Galerkin, bislang noch nicht geklärt ist. Erfahrungen und Ergebnisse hinsichtlich Multigridlösern von Kamschat zeigen, dass die Situation hier durchaus schwieriger ist. Zusammenfassend muss gesagt werden, dass erste Resultate erzielt wurden, es aber hierbei noch nicht ganz gelungen ist, alle grundlegenden Probleme zu lösen.

Während eines Gastaufenthaltes von Prof. Aihui Zhou wurde mit der Frage der a poste-

riori Fehlerschätzer begonnen. A priori Fehlerschranken für Discontinuous Galerkin sind hinlänglich bekannt. Auch die Entwicklung von a posteriori Fehlerschätzern ist relativ klar vorgezeichnet, als Summe lokaler Residuen plus Kantensprünge der Normalableitung, und das ist die Besonderheit bei Discontinuous Galerkin, Sprünge der Lösung selbst. Die wesentliche Schwierigkeit ist aber nun das explizite Auftreten der Normalableitung, die in $H^{-1/2}$ abgeschätzt werden müsste. Unter einer kleinen Zusatzannahme konnte dann Effizienz und Verlässlichkeit des Fehlerschätzers gezeigt werden. Diese Arbeit schließt Lücken einer Arbeit von Becker und Hansbo. Zusätzlich wurden lokale Abschätzungen gezeigt. Für die Resultate siehe [SXZ04].

2.4.3 Teilproblem: Kontakt

Die folgenden Grafiken sollen die Ergebnisse der Vorgehensweise aus Abschnitt 2.3.3 illustrieren.

Ebene Hindernisse

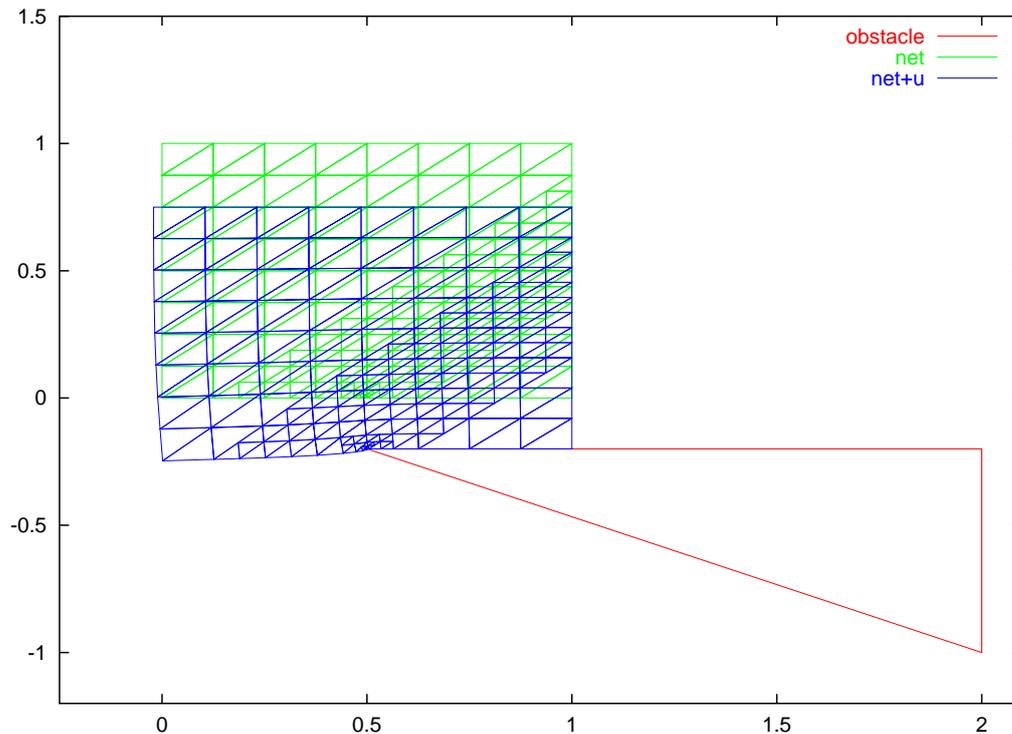


Abbildung 2.22: Beispiel für ein endliches Hindernis

Hindernisse mit impliziten Funktionen

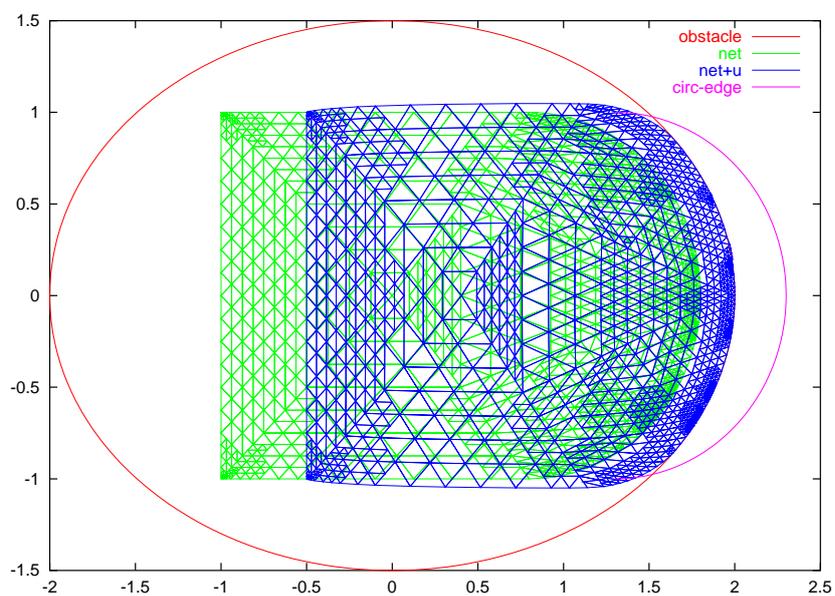


Abbildung 2.23: Hindernisbeschreibung mit impliziten Funktionen 1

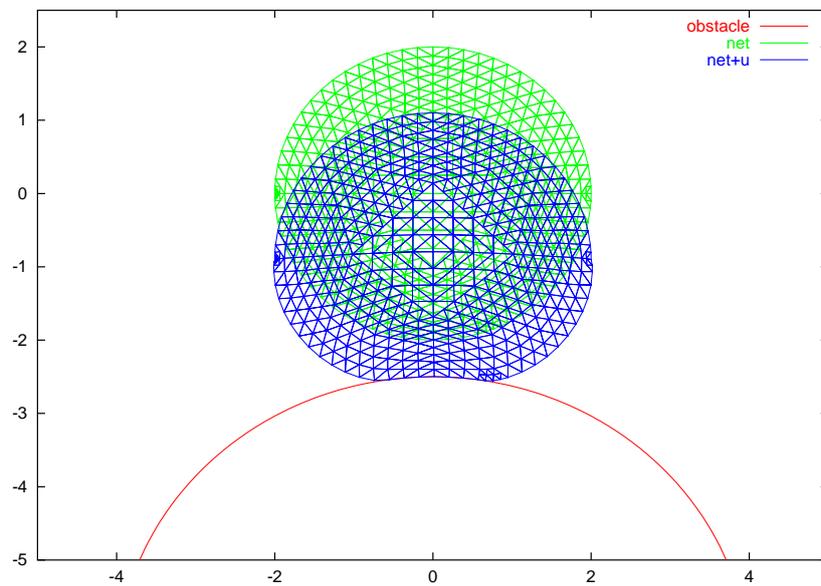
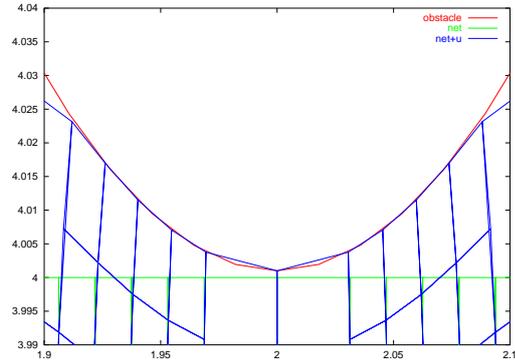
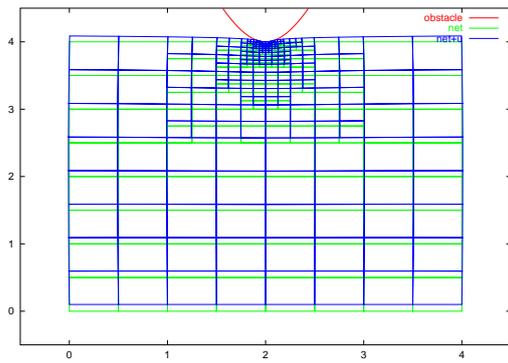
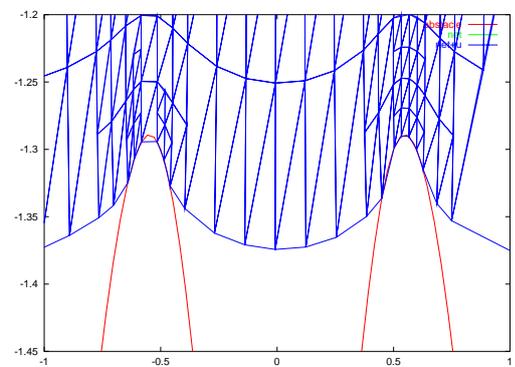
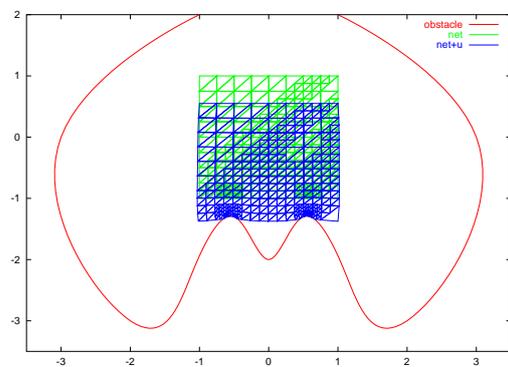


Abbildung 2.24: Hindernisbeschreibung mit impliziten Funktionen 2

Hindernisse mit Splinekurven

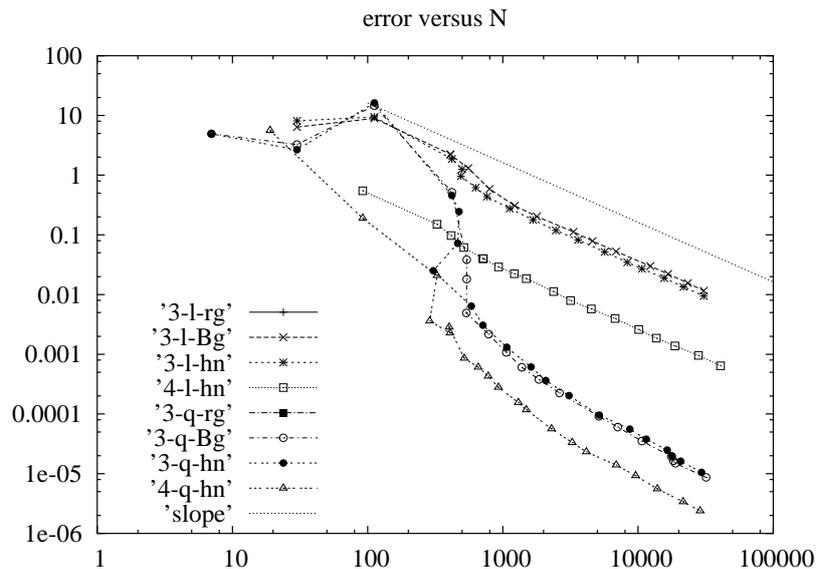


Hindernis mit Splinekurven 1



Hindernis mit Splinekurven 2

Insgesamt muss bemerkt werden, dass die Einbettung des Kontaktalgorithmus in die adaptive Finite Elemente Technik einen sehr robusten Gesamtalgorithmus liefert. Wie folgender Plot des Fehlerschätzers über die Freiheitsgrade zeigt, entsteht insgesamt ein Aufwand, der kaum größer ist als bei einem einfachen linear elastischen Deformationsproblem ohne Kontakt.



Literaturverzeichnis

- [AN98] Th. Apel and S. Nicaise. The finite element method with anisotropic mesh grading for elliptic problems in domains with corners and edges. *Math.MethodsAppl.Sci.*, 21:519–549, 1998.
- [Ape99] Th. Apel. *Anisotropic finite elements: Local estimates and applications*. Advances in Numerical Mathematics. Teubner, Stuttgart, 1999. Habilitationsschrift.
- [Hei96] B. Heinrich. The Fourier–finite–element–method for Poisson’s equation in axisymmetric domains with edges. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 33(5):1885–1911, 1996.
- [Hei02] B. Heinrich. Nitsche-type finite element method for elliptic problems with singularities. *PAMM*, 1: 522–523, 2002.
- [Hei03] B. Heinrich. Nitsche-type finite element method for elliptic problems with singularities. *Numerical Mathematics and Applications*, pp. 837– 845, Springer Verlag 2003.
- [HN03] B. Heinrich and S. Nicaise. Nitsche mortar finite element method for transmission problems with singularities. *IMA J. Numer. Anal.*, 23:331–358, 2003.
- [HNW97] B. Heinrich, S. Nicaise, and B. Weber. Elliptic interface problems in axisymmetric domains. Part I: Singular functions of non-tensorial type. *Math. Nachr.*, 186:147–165, 1997.
- [HNW00] B. Heinrich, S. Nicaise, and B. Weber. Elliptic interface problems in axisymmetric domains. Part II: The fourier-finite-element approximation of non-tensorial singularities. *Adv. Math. Sci. Appl.*, 10(2):571–600, 2000.
- [HP02] B. Heinrich and K. Pietsch. Nitsche type mortaring for some elliptic problem with corner singularities. *Computing*, 68: 217–238, 2002.
- [HW96] B. Heinrich and B. Weber. Fourier-finite-element Approximation of Elliptic Interface in Axisymmetric Domains. *Math. Methods in the Applied Sciences*, 19:909–931, 1996.
- [Mel02] J.M. Melenk. *hp-Finite Element Methods for Singular Perturbations*, Springer-Verlag, 2002.
- [Mey99] A. Meyer. Projected PCGM for Handling Hanging Nodes in Adaptive Finite Element Procedures. Preprint SFB393 99-25 TU Chemnitz.
- [Mey02] A. Meyer. Projection Techniques embedded in the PCGM for Handling Hanging Nodes and Boundary Restrictions. in: *Engineering Computational Technology*, B.H.V.Topping and Z.Bittnar,(Eds.) Saxe-Coburg Publ., Stirling, Scotland, 147-165.
- [MeUn04] A. Meyer and R. Unger. Projection methods for contact problems in elasticity. Preprint SFB393 04-04 TU Chemnitz.
- [HN99] B. Heinrich and B. Nkemzi. The Fourier-Finite-Element Method for Lamé Equations in Axisymmetric Domains. Preprint SFB393/99-36, TU Chemnitz, 1999.

- [HP03] B. Heinrich and K. Pönitz. Nitsche type mortaring for singularly perturbed reaction-diffusion problems. Preprint SFB393 03-17 TU Chemnitz, 2003.
- [Fra03] C. Franken. Multi-Wavelet-Basen für nicht-konforme Finite-Elemente. Diplomarbeit, Fakultät für Mathematik, TU Chemnitz, 2003.
- [Pie00] K. Pietsch. Finite-Elemente-Mortaring nach einer Methode von Nitsche für elliptische Probleme der Ebene. Diplomarbeit, Fakultät für Mathematik, TU Chemnitz, 2000.
- [Poe04] K. Pönitz. Nitsche-Finite-Elemente-Methode für die Poissongleichung mit gemischten Randbedingungen Preprint SFB393, TU Chemnitz, 2004, in Vorbereitung.
- [SXZ04] R. Schneider, Y. Xu und A. Zhou. On A Posteriori Error Estimates for Discontinuous Galerkin methods Advances in Computational Analysis, to appear 2004.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Kontaktsimulation

Die guten Ergebnisse der 2D-Simulation legen die Verallgemeinerung ins 3-Dimensionale nahe, was auch bei Anwendungen im Ingenieurbereich die eigentliche Herausforderung darstellt. Technisch erfordert dies keine wesentlichen Änderungen, weil die Projektionsoperatoren analog als $I - nn^T$ definiert werden können (mit n der lokalen Normalen am Hindernis).

Wesentlich komplizierter stellt sich der 2-Körperkontakt (also deformierbares Hindernis) dar. Während die Projektoren relativ leicht verallgemeinerbar sind, ist insbesondere der Durchdringungstest von wesentlich höherem Aufwand. Dies sollte in Fortsetzung dieses Projektes aufgenommen werden.

Nitsche-Mortaring

a) Für singular gestörte Diffusions-Reaktionsprobleme vom Typ $-\varepsilon^2 \Delta u + cu = f$ in Ω , $u = 0$ auf $\partial\Omega$, bisher auf Rechtecken betrachtet, wären Finite-Elemente-Methoden vom Nitsche-Typ für Gebietszerlegungen im Fall allgemeiner polygonaler Gebiete Ω aus der Sicht der Numerischen Analysis zu begründen, etwa unter Nutzung von Regularitätsergebnissen aus [Mel02]. Hier sind dann Eckensingularitäten und zugleich Randschichten der Lösung zugelassen. Dazu wären Kombinationen von nichtkonsistenten isotropen und anisotropen Netzen zu betrachten, mit lokal verfeinerten Netzen in der Umgebung der Ecken. Unter diesen sehr schwachen und anwendungsrelevanten Voraussetzungen interessiert der Nachweis von Konvergenzraten, wie diese von regulären Lösungen und konformen finiten Elemente her bekannt sind.

b) Für die Lamé'schen Gleichungen mit gemischten Randbedingungen über allgemeinen polygonalen Gebieten $\Omega \subset R^2$ wäre die Finite-Elemente-Methode vom Nitsche-Typ (Nitsche-Mortaring) aus der Sicht der Numerischen Analysis zu begründen (erste Ansätze dazu liegen vor) und auf ihre Eignung für Kontaktaufgaben zu untersuchen. Die wesentlichen Ungleichungen/Abschätzungen, die für den Fall der Poissongleichung bekannt sind, müssten auf den Fall der Lamé'schen Gleichungen übertragen werden, auch

unter der Voraussetzung, dass die verwendeten Netze am Interface Γ der Gebietszerlegung nicht quasi-uniform sind. Gleichzeitig wären Lösungssingularitäten, bedingt durch Knickpunkte des Randes bzw. durch gemischte Randbedingungen, mittels graduierter Netze so zu behandeln, dass Konvergenzraten – wie von regulären Lösungen und konformen finiten Elementen her bekannt – nachgewiesen werden können.

Teilprojekt

A13

Randkonzentrierte Finite-Elemente-Methoden

2.1 Teilprojekt A13

Randkonzentrierte Finite-Elemente-Methoden

2.1.1 Antragsteller

| | | |
|--|---|---|
| Prof. Dr. W. Hackbusch 24.10.1948 Direktor am MPI für Mathematik i. d. Naturwissenschaften Inselstr. 22–26 04103 Leipzig Tel.: (0341) 9959-750 Fax: (0341) 9959-999 wh@mis.mpg.de | PD Dr. J.M. Melenk 19.8.1967 Department of Mathematics The University of Reading PO Box 220 Reading, RG6 6AX, UK Tel.: +44 (118) 378 6028 Fax: +44 (118) 931 3423 j.m.melenk@reading.ac.uk | Prof. Dr. R. Schneider 20.03.1957 Professur Scientific Computing Universität Kiel Christian-Albrechts-Platz 4 D-24118 Kiel Tel.: (0431) 880-7470 Fax: (0431) 880-4464 rs@numerik.uni-kiel.de |
|--|---|---|

2.1.2 Projektbearbeiter

Dipl.-Math. techn. Tino Eibner (seit September 2002)

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Eine Vielzahl von Problemen in den Naturwissenschaften und der Technik werden als elliptische Randwertaufgaben formuliert. Ihre effiziente numerische Lösung ist deshalb ein wichtiges Forschungsgebiet. Die wichtigsten Vertreter von Lösungsmethoden sind die Finite-Elemente-Methode (FEM) und die Randelementmethode (BEM) [Hac95, Ste03]. Während bei erster eine Diskretisierung des gesamten betrachteten Gebietes $\Omega \subset \mathbf{R}^d$ benötigt wird, genügt bei zweiter eine Diskretisierung des Randes $\partial\Omega$. Da daher bei der BEM nur Mannigfaltigkeiten der Dimension $d - 1$ diskretisiert werden müssen, kann die BEM effizienter als die klassische FEM sein. Ein weiterer Vorzug der BEM ist die Möglichkeit, Außenraumprobleme zu behandeln. Ein klassischer Nachteil der BEM besteht darin, dass die Steifigkeitsmatrix a priori voll besetzt ist, so dass Kompressions-techniken (*Wavelets* [Sch98a], *Panel Clustering* [HN89], *multipole expansions* [GR97] und neuerdings \mathcal{H} - und \mathcal{H}^2 -Matrizen [Hac99, GH03, HKS00]) zum Einsatz gebracht werden müssen. Weiterhin baut die BEM auf einer Umformulierung eines Randwertproblems auf eine auf dem Rand $\partial\Omega$ gestellten Integralgleichung auf. Für diese Umformulierung wird die Fundamentallösung/Singulärfunktion der Differentialgleichung explizit benötigt; da in der Praxis diese nur für Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten bekannt ist, ist die BEM nicht bei bei Differentialgleichung mit variablen Koeffizienten einsetzbar. Die randkonzentrierte FEM, [KM03] verbindet die Flexibilität der klassischen FEM mit den guten Eigenschaften bzgl. Komplexität der BEM. Ziel des Teilprojekts A13 ist, diese neue Methode genauer zu untersuchen. Insbesondere soll zum einen ein besseres Verständnis der Approximationseigenschaften der Methode erarbeitet werden und zum anderen sollen Fragen ihrer effizienten Implementierung beantwortet werden.

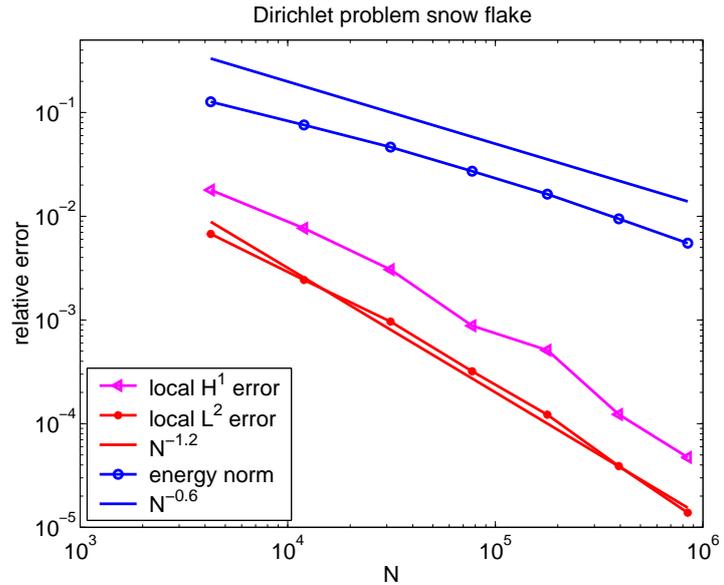
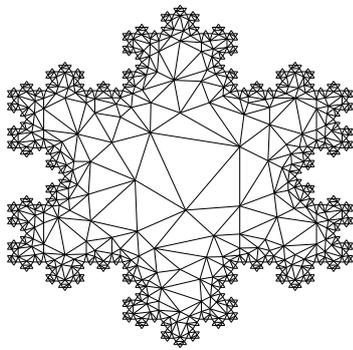


Abbildung 2.1: Beispiel eines randkonzentrierten Gitters und des Fehlerverhaltens.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

Konvergenz der FEM kann prinzipiell auf mehrere Arten erzielt werden: Man kann die Approximationsordnung festhalten und Konvergenz durch Gitterverfeinerung erreichen (h -FEM); andererseits kann man die Approximationsordnung erhöhen und das Gitter festhalten (p -FEM). Wird sowohl das Gitter (zumindest lokal) verfeinert als auch die Approximationsordnung erhöht, so spricht man von der hp -FEM, [Sch98b, KS99]. Bei der randkonzentrierten FEM liegt eine Variante der hp -FEM vor: Es wird in Randnähe das Gitter verfeinert und die Approximationsordnung niedrig gehalten; im Inneren des Rechengebietes wird das Gitter festgehalten und Konvergenz durch Erhöhen der Approximationsordnung erzielt. Im Fall von Differentialgleichungen mit analytischen Koeffizienten konnte in [KM03] gezeigt werden, dass die geeignete Gitterwahl und Verteilung der Approximationsordnung folgende, einfache Bedingungen erfüllen müssen:

$$h_K \sim h + \text{dist}(K, \partial\Omega), \quad (2.1)$$

$$p_K \approx \alpha \log(h_K/h). \quad (2.2)$$

Hier steht K für ein Element des Gitters, h_K für seinen Durchmesser und p_K für die Approximationsordnung, die auf Element K verwendet wird. Für ein typisches Gitter verweisen wir auf Abb. 2.1; man beachte, dass die Bedingung (2.1) dazu führt, dass ein quasi-uniformes Gitter mit Maschenweite h in Randnähe vorliegt. Der Parameter $\alpha > 0$, der in (2.2) auftritt, muss problemabhängig geeignet gewählt werden. Bezeichnet man mit V_N den hp -FEM Raum, der auf solchen Gittern und Polynomgradverteilungen basiert, so konnte in der Arbeit [KM03] für elliptische Probleme (mit analytischen Koeffizienten) in 2D gezeigt werden, dass gilt:

$$N = \dim V_N \sim h^{-1} \sim \text{Gitterpunkte auf } \partial\Omega, \quad (2.3)$$

$$\|u - u_N\|_{H^1(\Omega)} \leq CN^{-\delta}, \quad (2.4)$$

wobei die Lösung $u \in H^{1+\delta}(\Omega)$, $\delta > 0$, angenommen wird. Drückt man die Konvergenz als ‘Fehler gegen Problemgröße’ aus, so sieht man ein Konvergenzverhalten, wie man

es von einer BEM kennt. Als FEM hat die randkonzentrierte FEM z.B. die Eigenschaft geerbt, dünn besetzt zu sein: da der maximale Polynomgrad $p_{max} = O(|\ln h|) = O(\ln N)$ ist (vgl. 2.2), ergibt sich in 2D, dass jede Zeile der Steifigkeitsmatrix höchstens $O(\ln^2 N)$ Einträge hat.

2.3.1 Implementierung, schnelle Löser, *hp*-Adaptivität

Wie im Antrag [Ant01] für die Periode 2002–2004 beschrieben, sollte in einem ersten Schritt die Methode vorerst in 2D implementiert werden. Dabei sollte nicht nur der Frage nachgegangen werden, wie die Gitter zu erzeugen seien, sondern es sollte auch untersucht werden, wie effiziente Quadraturen auf Dreiecken (mit der Möglichkeit der Erweiterung auf Tetraeder) zu bewerkstelligen sind. Dies ist von Interesse, da bei der *hp*-FEM typischerweise die Quadraturen beim Aufstellen der Steifigkeitsmatrix einen erheblichen Anteil an den Gesamtkosten haben. Für Referenzelemente, die Tensorproduktstruktur haben (z.B. das Quadrat in 2D und den Würfel in 3D), wurde bereits in [MGS01] ein Algorithmus vorgestellt, mit dem in optimaler Komplexität die Steifigkeitsmatrix (hinreichend genau) bestimmt werden kann. Ein analoger Algorithmus für Dreiecke und Tetraeder sollte im Rahmen dieses Projekts entwickelt und untersucht werden.

Die “Formel” (2.2) mit dem geeignet zu wählenden Parameter α stellt das optimale Konvergenzverhalten $O(N^{-\delta})$ in (2.4) sicher. Eine adaptive Strategie zur Wahl der Gitter und der Polynomgradverteilung ist dennoch von Interesse: Zum einen ist die genaue Wahl des Parameters α a priori nicht bekannt, zum anderen ist die optimale Wahl des Gitters und der Polynomgradverteilung problemabhängig. Die Frage nach *hp*-Adaptivität sollte deshalb in Betracht gezogen werden.

Weiter sollte in dem Zeitraum 2002–2004 die Frage effizienter Löser angegangen werden. Hier können sowohl direkte wie auch iterative Verfahren zum Zuge kommen. Es konnte bereits in [Yse99, KM03] gezeigt werden, dass bei Dirichletproblemen die Konditionszahl der Steifigkeitsmatrix nur polylogarithmisch von der Problemgröße abhängt. Das Gleichungssystem ist somit gut konditioniert und einfache Iterationsverfahren wie das CG-Verfahren reichen aus. Bei anderen Randbedingungen wird jedoch Vorkonditionierung bzw. ein Multilevelansatz benötigt.

2.3.2 Lokale Fehleranalyse

Im Rahmen des Projektziels, die Eigenschaften der randkonzentrierten FEM besser zu verstehen, steht eine Analyse ihres lokalen Verhaltens. Als Motivation für solche Fragestellungen möge noch einmal der oben gemachte Vergleich mit der Galerkin-BEM dienen. Bei der Galerkin-BEM ist bekannt, dass Einsetzen der BEM-Lösung in die Greensche Darstellungsformel zu punktwisen Approximationen im Gebiet führt, die im Wesentlichen doppelt so schnell konvergieren wie die BEM in der Energienorm (siehe z.B. Abb. 2.1, 2.5). Eine solche Verdopplung der Konvergenzgeschwindigkeit in inneren Punkten beobachtet man auch bei der randkonzentrierten FEM, und sowohl die numerische als auch theoretische Untersuchung dieses Phänomens war Teil der Forschung im Antragszeitraum.

Literaturverzeichnis zu 2.3 (eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

- [Ant01] SFB 393 - Numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern. Finanzierungsantrag 2002–2003–2004, TU Chemnitz, 2001.
- [GH03] L. Grasedyck and W. Hackbusch. Construction and arithmetics of \mathcal{H} -matrices. *Computing*, 70:295–334, 2003.
- [GR97] L. Greengard and V. Rokhlin. A new version of the fast multipole method for the Laplace in three dimensions. In *Acta Numerica 1997*, pages 229–269. Cambridge University Press, 1997.
- [Hac95] W. Hackbusch. *Integral Equations. Theory and Numerical Treatment*. Birkhäuser, 1995.
- [Hac99] W. Hackbusch. A sparse matrix arithmetic based on \mathcal{H} -matrices. Part I: Introduction to \mathcal{H} -matrices. *Computing*, 62:89–108, 1999.
- [HKS00] W. Hackbusch, B. Khoromskij, and S.A. Sauter. On \mathcal{H}^2 -matrices. In H. Bungartz, R. Hoppe, and C. Zenger, editors, *Proceedings of the symposium organized by the SFB 438 on the occasion of Karl-Heinz Hoffmann's 60th birthday*, pages 9–29. Springer-Verlag, 2000.
- [HN89] W. Hackbusch and Z.P. Nowak. On the fast matrix multiplication in the boundary element method by panel clustering. *Numer. Math.*, 54:463–491, 1989.
- [KM03] B.N. Khoromskij and J.M. Melenk. Boundary concentrated finite element methods. *SIAM J. Numer. Anal.*, 41(1):1–36, 2003.
- [KS99] G.E. Karniadakis and S.J. Sherwin. *Spectral/hp Element Methods for CFD*. Oxford University Press, 1999.
- [MGS01] J.M. Melenk, K. Gerdes, and C. Schwab. Fully discrete hp -FEM: fast quadrature. *Comput. Meths. Appl. Mech. Eng.*, 190:4339–4364, 2001.
- [Sch98a] R. Schneider. *Multiskalen- und Wavelet-Matrixkompression: Analysisbasierte Methoden zur effizienten Lösung großer vollbesetzter Gleichungssysteme*. Advances in Numerical Mathematics. Teubner, 1998.
- [Sch98b] C. Schwab. *p- and hp-Finite Element Methods*. Oxford University Press, 1998.
- [Ste03] O. Steinbach. *Numerische Näherungsverfahren für elliptische Randwertprobleme: Finite Elemente und Randelemente*. Teubner, 2003.
- [Yse99] H. Yserentant. Coarse grids spaces for domains with a complicated boundary. *Numerical Algorithms*, 21:387–392, 1999.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Implementierung, schnelle Löser, hp -Adaptivität

Implementierung

Die Implementierung der randkonzentrierten FEM in 2D wurde in dem Paket BC-FEM2D realisiert.

In einem ersten Schritt wurde die Erzeugung geeigneter Gitter in Angriff genommen. Im Prinzip gibt es mehrere Zugangsmöglichkeiten, z.B. Verfahren, die auf *Quadrees* basieren und Verfahren vom *advancing front* Typ. Implementiert und untersucht wurden zwei verschiedene Techniken: zum einen wurden mit einem *advancing front* Algorithmus Gitter ausgehend von einer Triangulierung des Randes erzeugt, wobei die gewünschte Größe der zu generierenden Elemente in der *front* mit Hilfe von (2.1) gesteuert wird; zum anderen wurden Gitter durch Verfeinerung eines Grobgitters erzeugt. Letztere, schnellere Technik, führt zudem in natürlicher Weise auf Hierarchien von Gittern, die (2.1) erfüllen.

In einem zweiten Schritt wurde dann die *hp*-FEM variabler Ordnung realisiert; variable Ordnung bedeutet hier, dass jedem Element K sein individueller Polynomgrad zugewiesen werden kann und die Erzeugung von H^1 -konformen Formfunktionen im Rahmen der Assemblierung sichergestellt wird. Verschiedene Wahlen von Polynombasen wurden zugelassen, insbesondere solche, die auf integrierten Legendrepolyomen und solche, die auf Lagrangeschen Interpolationspolynomen (z.B. in Gauß-Lobatto-Punkten) basieren.

Einer der Gründe, warum Basisfunktionen, die auf Lagrangeschen Interpolationspolynomen beruhen, berücksichtigt wurden, war die dadurch gegebene Möglichkeit, die numerische Quadratur wesentlich zu beschleunigen. In [MGS01] wurde diese Option für Referenzelemente mit Tensorproduktstruktur untersucht. Dort wurde gezeigt, dass man, falls die Formfunktionen als Lagrangeinterpolationspolynome in den Quadraturpunkten gewählt werden, optimale Komplexität für das Aufstellen der Steifigkeitsmatrix erhält. Es wurde für skalare elliptische Probleme zweiter Ordnung gezeigt, dass exponentielle Konvergenz, die bei exakter Auswertung aller Integrale erzielt werden kann, auch hier gewährleistet ist. Im Rahmen des TP A13 wurden diese Ideen auf Dreiecke übertragen. Die Grundidee ist dabei folgende: Die Quadratur auf einem Dreieck wird mit Hilfe der sog. Duffy-Transformation auf eine gewichtete Quadratur auf einem Viereck überführt; für diese Quadratur auf dem Viereck werden dann Tensorproduktquadraturformeln vom Typ Gauß-Lobatto/Gauß-Jacobi-Lobatto (aufgrund des Gewichtes) eingesetzt. Die Verwendung von Lagrangeinterpolationspolynomen in den zugehörigen Quadraturpunkten liefert dann wieder eine Methode optimaler Komplexität. Für einen effizienten Einsatz in einem *hp*-FEM-Code mit variablem Polynomgrad sind noch weitere Techniken wie z.B. die *sum factorization* von Karniadakis/Sherwin [KS99] vonnöten. Abb. 2.2 zeigt erste Ergebnisse dieser Implementierung. Verglichen wird die "Standardquadratur", welche in 2D Komplexität $O(p^6)$ hat, mit der Beschleunigungstechnik der *sum factorization*, die Komplexität $O(p^5)$ hat, sowie mit der neuen Routine, die die optimale Komplexität $O(p^4)$ erreicht. An dieser Stelle sollte erwähnt werden, dass der neue Algorithmus einen Ansatzraum verwendet, der mehr "innere Formfunktionen" benutzt (im Wesentlichen werden so viele Formfunktionen verwendet wie auf einem Viereck). Da diese inneren Freiheitsgrade typischerweise mit Hilfe von statischer Kondensation bereits auf Elementebene entfernt werden, wurde die Rechenzeit für die statische Kondensation in Abb. 2.2 zu Vergleichszwecken ebenfalls aufgeführt. Die Erweiterung des vorgeschlagenen Algorithmus auf Tetraeder ist prinzipiell möglich. Diese Erweiterung sowie genauere Untersuchungen werden Bestandteil der Dissertation von Tino Eibner [Eibit] sein. Weiterhin wurden inzwischen die Datenstrukturen des Codes so angelegt, dass Experimente zu *hp*-Adaptivität im Verlauf des Jahres 2004 durchgeführt werden können.

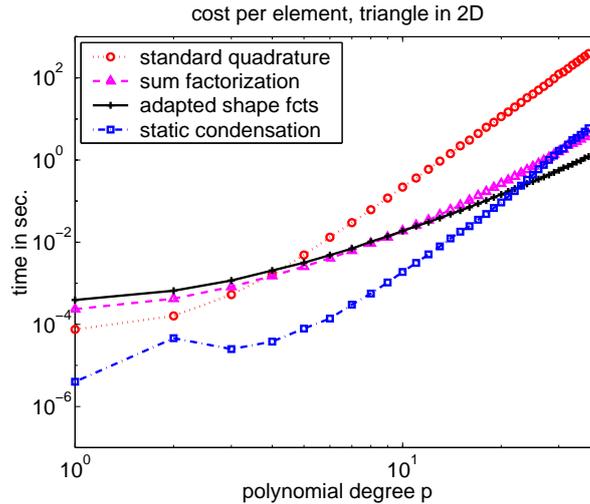


Abbildung 2.2: Verschiedene Quadraturverfahren im Vergleich.

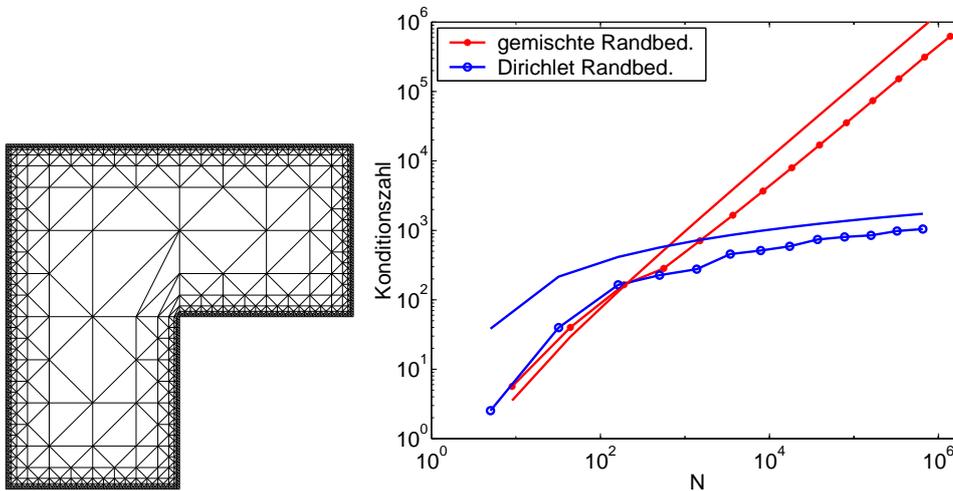


Abbildung 2.3: Links: Gebiet. Rechts: Konditionszahlen in Abhängigkeit von Randbedingungen.

Löser

Wie bereits in [Yse99, KM03] bemerkt, wächst bei Dirichletproblemen die Konditionszahl κ nur polylogarithmisch, d.h. $\kappa = O(\log^\beta N)$, wobei $\beta \geq 0$ von der genauen Wahl der Polynombasis abhängt. Für andere Randbedingungen muss mit einem $O(N \log^\beta N)$ gerechnet werden. Das verschiedene Verhalten wird in Abb. 2.3 illustriert.

Im Rahmen des Projektes wurde in [KM02] für zweidimensionale Probleme ein direkter Löser vorgestellt. Das wesentliche Element des vorgeschlagenen Profillöser ist ein Algorithmus zur Nummerierung der Unbekannten mit der Eigenschaft, dass der Speicherbedarf $O(N \log^4 N)$ und die Rechenzeit für die Cholesky- bzw. die LU-Faktorisierung $O(N \log^8 N)$ beträgt. Für den speziellen Fall $p = 1$ vereinfachen sich die Aufwandsabschätzungen zu $O(N \log^2 N)$ und $O(n \log^4 N)$; diese wurden numerisch in [KM02] getestet; ein Beispiel findet sich in Abb. 2.4.

Es ist geplant, die Möglichkeiten eines effizienten Multilevel-Löser zu untersuchen. We-

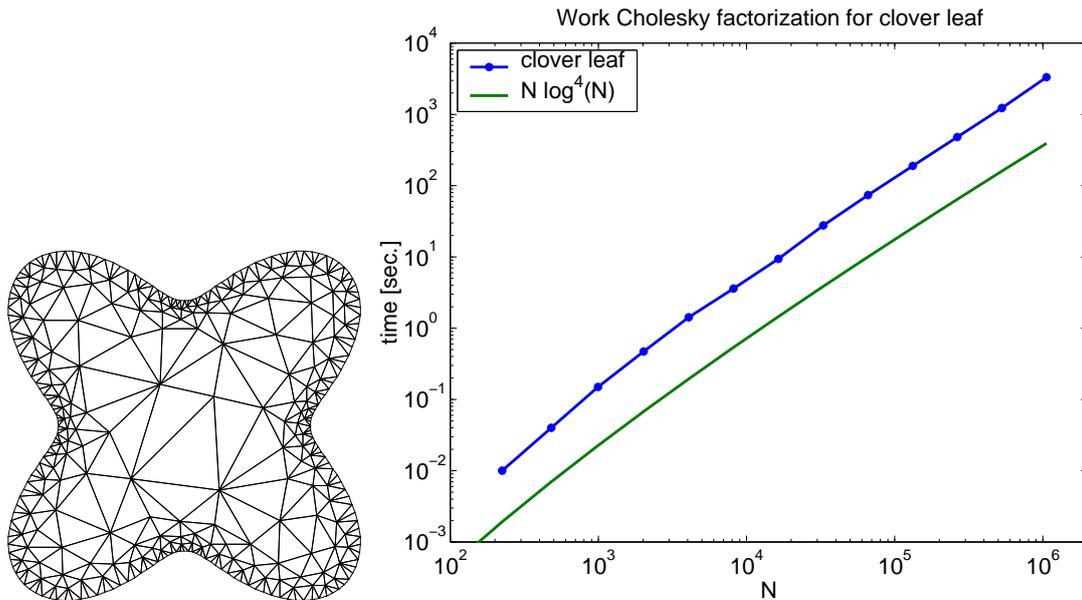


Abbildung 2.4: CPU-Zeit in Sekunden gegen Problemgröße für Faktorisieren nach geeigneter Nummerierung der Unbekannten.

sentliche Vorarbeiten sind hierfür bereits getätigt: Wie oben beschrieben kann eine geschichtete Gitterhierarchie von randkonzentrierten Gittern erzeugt werden, welche die Möglichkeit bietet, effiziente Löser für den Fall stückweise linearer Approximationen zu konstruieren. Hier bestehen enge fachliche Anknüpfungspunkte an TP A12. Ein einfacher möglicher Glätter im Kontext von hp -FEM könnte im Lösen von lokalen Problemen auf überlappenden *Patches* (d.h. der Vereinigung von Elementen, die sich einen gemeinsamen Knoten teilen) sein. Zumindest im zweidimensionalen Fall (mit Elementen variabler Ordnung) konnte in [EM04] das wesentliche Werkzeug für die Analyse dieser Glätters, die Existenz von stabilen Zerlegungen, bereitgestellt werden.

Weiterhin wurden erste Erfahrungen mit der Verwendung von \mathcal{H} -Matrizen zum Lösen der bei der randkonzentrierten FEM entstehenden Gleichungssysteme gemacht. Numerische Experimente zeigen, dass die berechnete \mathcal{H} -Matrix-Inverse sehr schnell mit dem Blockrang k gegen die exakte Inverse konvergiert. Die Erweiterung des Resultats von Bebendorf/Hackbusch [BH03], welches dieses Verhalten für den Fall der klassischen FEM (stückweise lineare Ansatzfunktionen, quasiuniforme Gitter) erklärt, auf den vorliegenden Fall hoher Approximationsordnung und nicht quasiuniformer Gitter ist beabsichtigt.

2.4.2 Lokale Fehleranalyse

Bei der Galerkin-BEM ist bekannt, dass durch Auswertung von linearen Funktionalen wie Punktauswertungen oder Auswertungen von Ableitungen im Inneren des Gebietes eine Verdopplung der Konvergenzgeschwindigkeit erhofft werden kann. Erste numerische Ergebnisse zeigen ein ähnliches Verhalten der randkonzentrierten FEM (vgl. Abb. 2.1 und Abb. 2.5). In den theoretischen Untersuchungen in [EM04] konnte dann für Dirichletprobleme auf kompakten Teilmengen $\tilde{\Omega} \subset\subset \Omega$ tatsächlich eine verbesserte Konvergenzordnung gezeigt werden. Genauer: Es existiert ein $\beta > 0$ und ein $C_{\tilde{\Omega},k}^- > 0$, so dass

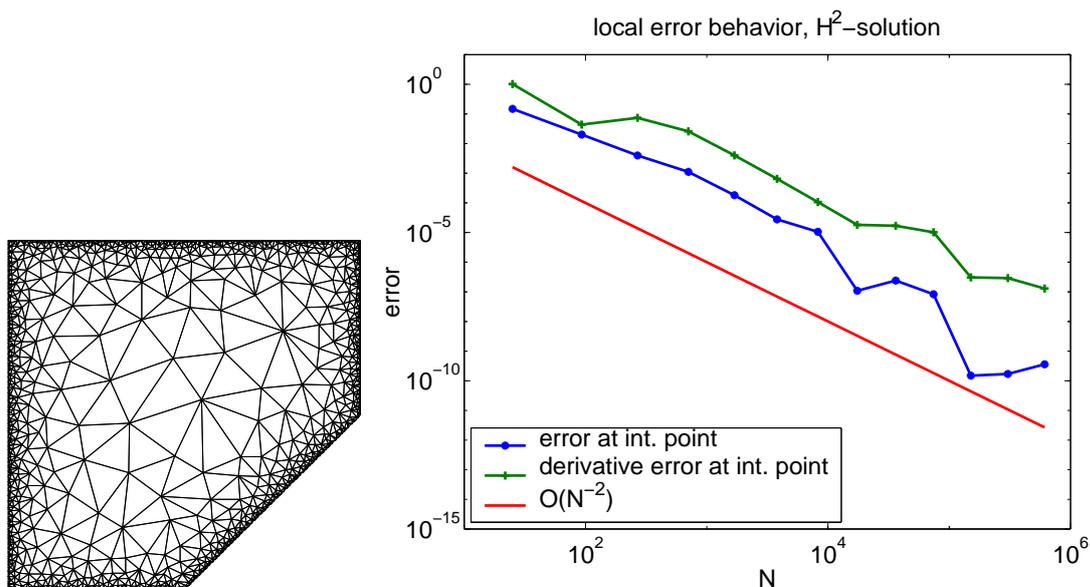


Abbildung 2.5: lokales Konvergenzverhalten einer Lösung mit H^2 -Reglarität.

im Falle von Energienormkonvergenz $\|u - u_N\|_{H^1(\Omega)} \leq CN^{-\delta}$ gilt:

$$\max_{K \subset \tilde{\Omega}} \|u - u_N\|_{W^{k,\infty}(K)} \leq C_{k,\tilde{\Omega}} (\log N)^{2k+2} N^{-\delta-\beta}. \quad (2.5)$$

Numerisch beobachtet man in den Abbildungen 2.1, 2.5 sogar $\beta = \delta$. Zum Beweis dieses Resultates sei angemerkt, dass die klassischen dualitätsbasierten Argumente, die auf H^2 -Regularität und (lokalen) Approximationseigenschaften des Ansatzraumes basieren, nicht ausreichen, denn im vorliegenden Fall liegt zwar H^2 -Regularität im Inneren des Gebietes vor, jedoch haben nach (2.1), (2.2) die Elemente $K \subset \tilde{\Omega}$ die Größe $h_K = O(1)$ und einen Polynomgrad $p_K = O(\log N)$. Damit ist ein Faktor $N^{-\beta}$ nicht zu erreichen. Um dieses Problem zu umgehen, wurde in [EM04] mit geeigneten Gewichtsfunktionen gearbeitet, was jedoch den Einsatz von Hardyungleichungen erforderlich machte. Die Verwendung letzterer ist der Grund für die Restriktion auf Dirichletprobleme.

Literaturverzeichnis

- [Ant01] Sfb 393 - numerische simulation auf massiv parallelen rechnern. Finanzierungsantrag 2002–2003–2004, TU Chemnitz, 2001.
- [Ber01] Sfb 393 - numerische simulation auf massiv parallelen rechnern. Arbeits- und ergebnisbericht 1999–2000–2001, TU Chemnitz, 2001.
- [BH03] M. Bebendorf and W. Hackbusch. Existence of \mathcal{H} -matrix approximants to the inverse FE-matrix of elliptic operators with L^∞ -coefficients. *Numer. Math.*, 95(1):1–28, 2003.
- [Eibit] T. Eibner. *Algorithmik der randkonzentrierten FEM*. PhD thesis, TU Chemnitz, (in Arbeit).
- [EM04] T. Eibner and J.M. Melenk. Local error analysis of the boundary concentrated fem. Technical Report 04-05, SFB 393, 2004.

- [KM02] B.N. Khoromskij and J.M. Melenk. An efficient direct solver for the boundary concentrated FEM in 2D. *Computing*, 69:91–117, 2002.
- [KM03] B.N. Khoromskij and J.M. Melenk. Boundary concentrated finite element methods. *SIAM J. Numer. Anal.*, 41(1):1–36, 2003.
- [KS99] G.E. Karniadakis and S.J. Sherwin. *Spectral/hp Element Methods for CFD*. Oxford University Press, 1999.
- [MGS01] J.M. Melenk, K. Gerdes, and C. Schwab. Fully discrete *hp*-FEM: fast quadrature. *Comput. Meths. Appl. Mech. Eng.*, 190:4339–4364, 2001.
- [Yse99] H. Yserentant. Coarse grids spaces for domains with a complicated boundary. *Numerical Algorithms*, 21:387–392, 1999.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Verschiedene Aspekte der randkonzentrierten FEM, wie z.B. ihre effiziente Implementierung und das Lösen der entstandenen Gleichungssysteme, wurden in Angriff genommen. Erkenntnisse, die insbesondere der Projektbearbeiter Tino Eibner beim Entwickeln und Untersuchen der Methode gewonnen hat, können sehr gut in andere Teilprojekte einfließen. Z.B. können Varianten der randkonzentrierten FEM für die in TP A12 betrachteten Kontaktprobleme eingesetzt werden. Bei Kontaktproblemen (linear) elastischer Körper ist eine relativ hohe Auflösung der Lösung in Randnähe hilfreich, um die genaue Kontaktfläche zu finden; im Inneren der elastischen Körper ist die Lösung typischerweise glatt, so dass hohe Approximationsordnungen sehr effizient sind. Man kann also erwarten, dass die randkonzentrierte FEM hier gut funktioniert. Wenn die genaue Kontaktfläche im Laufe der Iteration gefunden wird, reicht natürlich eine lokale Verfeinerung. Hier gliedern sich die Fragestellungen der *hp*-Adaptivität gut ein. In Hinblick auf eine verstärkte Anwendung der randkonzentrierten FEM in Bereichen wie Kontaktproblemen wäre ein Ausbau der vorhandenen Implementierung auf 3D sehr wünschenswert. Dies betrifft sowohl die Erzeugung der Gitter als auch das effiziente Aufstellen der Steifigkeitsmatrizen.

Wie in Abschnitt 2.4.1.2 erwähnt, ist die Erfahrung mit Multilevellösern aus TP A3 wichtig für die Entwicklung von schnellen Lösern für die randkonzentrierte FEM.

Weitere Problemstellungen, in die die gewonnenen Erkenntnisse der randkonzentrierten FEM einfließen können, sind Kontrollprobleme mit Randkontrolle; hier gibt es natürliche Anknüpfungspunkte an TP A15.

Teilprojekt

A14

Feinstruktur der Resonanzen im
Bernoulli–Anderson–Modell

2.1 Teilprojekt A14

Feinstruktur der Resonanzen im Bernoulli–Anderson–Modell

2.1.1 Antragsteller

| | |
|---|---|
| PD Dr. Rudolf A. Römer | Prof. Dr. Peter Stollmann |
| 22.02.1966 | 10.01.1961 |
| Professur Theoretische Physik III (Theorie ungeordneter Systeme) | Professur Analysis |
| Institut für Physik | Fakultät für Mathematik |
| Technische Universität Chemnitz | Technische Universität Chemnitz |
| D-09107 Chemnitz | D-09107 Chemnitz |
| Tel.: (0371) 531-3146 | Tel.: (0371) 531-4126 |
| Fax: (0371) 531-3151 | Fax: (0371) 531-2141 |
| r.roemer@physik.tu-chemnitz.de | peter.stollmann@mathematik.tu-chemnitz.de |

2.1.2 Projektbearbeiter

Dipl.-Math. Steffen Klassert

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Der Effekt von Verunreinigungen in Festkörpern ist von fundamentaler Bedeutung für die Physik, sowohl in praktischer als auch in theoretischer Hinsicht. Die bahnbrechenden Arbeiten von P.W. Anderson [And58] sowie N.F. Mott und W.D. Twose [MT61] wurden aufgrund ihrer prinzipiellen Einsicht in diesen Themenkreis mit dem Nobelpreis gewürdigt.

Abhängig von der Dimension d des Systems erwartet man durch Unordnung eine mehr oder weniger drastische Verringerung der Mobilität, d.h. eine Unterdrückung der makroskopischen Transporteigenschaften [KM93]. Dabei geht man bei $d = 1, 2$ von Lokalisierung (kein Transport) und für $d \geq 3$ von einem Metall-Isolator-Übergang (MIÜ) aus. Letzteres bedeutet, dass es sowohl Energiebereiche mit lokalisierten als auch solche mit ausgedehnten Zuständen gibt.

Die rigorose analytische Behandlung dieses Phänomens ist sehr schwierig. Für das Auftreten von Energiebereichen mit gutem Transport gibt es noch keinen mathematischen Anhaltspunkt, obwohl sowohl die experimentellen als auch die numerischen Daten [KM93] überwältigende Hinweise darauf geben. Die ersten Lokalisierungsbeweise gehen auf Goldsheidt, Molchanov und Pastur [GMP77] in einer Dimension und Fröhlich und Spencer in $d \geq 2$ [FS83] zurück. Dabei muss man in letzterer Situation eine äußerst schwierige Multi-Skalen-Analyse bemühen. Für viele wichtige Modelle steht der Beweis für Lokalisierung noch aus. Für den aktuellen, mathematischen Kenntnisstand verweisen wir auf [Sto01].

Die Beschreibung ungeordneter Festkörper erfolgt typischerweise im Rahmen der Quantenmechanik unter Verwendung von Hamiltonoperatoren der Form

$$H(\omega) = H_0 + V_\omega, \quad (2.1)$$

die in $L^2(\mathbb{R}^d)$ (kontinuierlich) bzw. $l^2(\mathbb{Z}^d)$ (diskret) wirken. Der Einfachheit halber beschränken wir uns in der folgenden kurzen Beschreibung auf letzteren Fall. Dabei ist H_0 der diskrete Laplaceoperator,

$$H_0 u(n) = \sum_{|k-n|=1} u(k), \quad u \in l^2(\mathbb{Z}^d), \quad (2.2)$$

bei dem an jedem Punkt nur der Einfluss der nächsten Nachbarn eine Rolle spielt. Das zufällige Potential V_ω repräsentiert die Verunreinigung bzw. die Unordnung. Der Zufallsparameter ω durchläuft dabei einen Wahrscheinlichkeitsraum Ω , dessen Maß wir mit P bezeichnen. In der Zuordnung $\omega \mapsto V_\omega$ wird das spezielle Modell der Unordnung kodiert. Es handelt sich also in Wirklichkeit um eine ganze Klasse von Modellen, denn die Wahrscheinlichkeitsverteilung von $V_\omega(0)$ kann durch ein beliebiges Maß gegeben sein. Ein besonders wichtiges Modell ist das Anderson-Modell, bei dem die Werte von V_ω an den einzelnen Gitterpunkten unabhängig und identisch verteilt sind. Gebräuchlich ist hier die Gleichverteilung auf dem Intervall $[-W/2, W/2]$, wobei W die Stärke der Unordnung parametrisiert. Wir bezeichnen dieses Modell im Folgenden als gleichverteiltes Anderson-Modell (GAM).

Ein besonders attraktives Modell zur Beschreibung von Kristallen mit Defekten oder von metallischen Legierungen ergibt sich, wenn man für $V_\omega(0)$ nur zwei Werte annimmt, o.E. -1 und 0 , mit jeweils Wahrscheinlichkeit $1/2$. Dabei bedeutet $V_\omega(k) = 0$ gerade, dass z.B. am Gitterpunkt k kein Defekt-Ion sitzt. Da die Folge der $V_\omega(k)$, $k \in \mathbb{Z}^d$ in diesem Fall einen Bernoulli-Prozess darstellt, spricht man vom BAM, welches in der physikalischen Literatur auch unter den Stichworten *binäres Anderson-Modell* und *binäre Unordnung* zu finden ist.

Ein wichtiger Schritt in Lokalisierungs-Beweisen ist unter dem Namen *Wegner-Ungleichung* bekannt [Weg81] und bedeutet eine Abschätzung, dass in gewissen Energie-Intervallen die zufälligen Eigenwerte nur moderate Resonanzen aufweisen. Dies ist eng mit einer gewissen Glattheit der Zustandsdichte verbunden. Solche Ungleichungen sind für das GAM leicht zu zeigen [Sto00], für das BAM in $d = 1$ aber sehr schwer [CKM87, SVW98]. Für $d \geq 2$ war kein solcher Beweis bekannt. Dies war der Ausgangspunkt des vorliegenden Antrags, bei dem durch numerische Simulation die Grundlage für einen rigorosen Beweis geschaffen werden soll.

Da beim erst kürzlich gelungenen Beweis von Lokalisierung für das kontinuierliche BAM in einer Dimension [DSS04] festgestellt wurde, dass resonante Ausnahmeenergien mit ausgedehnten Zuständen auftreten können, bestand die Frage, ob solche Resonanzen der integrierten Zustandsdichte auch in höheren Dimensionen auftreten können.

Diese Frage sollte unter Einsatz numerischer Simulationen in Verbindung mit analytischen Techniken geklärt werden.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

Es sollten im Rahmen des vorliegenden Teilprojekts durch eine Abschätzung von Spitzen in der Zustandsdichte die numerischen Grundlagenuntersuchungen für einen mathe-

matisch rigorosen Beweis von Lokalisierung (oder eben Delokalisierung in bestimmten Energiebereichen) mit Hilfe der Wegner-Ungleichung durchgeführt werden.

Das haben wir im Antrag in folgende Einzelziele gegliedert:

- Numerische Überprüfung der Grundlagen zu einem analytischen Beweis für die Gültigkeit der Wegner-Ungleichung (und damit von Lokalisierung) im diskreten BAM in $d = 2, 3$.
- Entwicklung und Parallelisierung eines neuen Verfahrens zur Berechnung der Eigenwertverteilung des BAM und Vergleich mit den bereits für das GAM verwendeten parallelen Algorithmen.
- Gibt es in $d = 2, 3$ resonante Ausnahmeenergien und/oder ausgedehnte Zustände?
- Falls es solche ausgedehnten Zustände gibt, können diese ein Spektrum tragen, d.h., kann man Wellenpakete konstruieren, die zu einem endlichen Transport von Ladung führen?
- Welche Unterschiede ergeben sich zwischen diskretem und kontinuierlichem BAM? Führen diese zu anderen Aussagen bzgl. der Lokalisierungseigenschaften?

Hierbei sind in den verschiedenen Punkten analytische und numerische Fragen kombiniert. Ausgehend von bekannten und bewährten Verfahren sollte eine neue Methode zur effizienten parallelen Berechnung der Eigenwerte im BAM entwickelt werden, die, wie im Antrag beschrieben, die spezielle Struktur des BAM nutzt. Gleichzeitig war es das Traumziel, aus den so gewonnenen Einsichten über die Struktur der Eigenwertverteilung im BAM einen rigorosen Beweis für Lokalisierung zu erhalten.

Literaturverzeichnis (eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

- [And58] P.W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, 109:1492–1505, 1958.
- [CKM87] R. Carmona, A. Klein, and F. Martinelli. Anderson localization for Bernoulli and other singular potentials. *Commun. Math. Phys.*, 108:41–55, 1987.
- [DSS04] D. Damanik, R. Sims, and G. Stolz. Localization for one dimensional, continuum, Bernoulli–Anderson models. *J. Funct. Anal.*, 208:423–445, 2004.
- [FS83] J. Fröhlich and T. Spencer. Absence of diffusion in the Anderson tight binding model for large disorder or low energy. *Commun. Math. Phys.*, 88:151–184, 1983.
- [GMP77] I.Ya. Goldsheidt, S.A. Molchanov, and L.A. Pastur. Typical one-dimensional Schrödinger operator has pure point spectrum. *Funktsional. Anal. i Prilozhen*, 11:1–10, 1977.
- [KM93] B. Kramer and A. MacKinnon. Localization: theory and experiment. *Rep. Prog. Phys.*, 56:1469–1564, 1993.
- [MT61] N.F. Mott and W.D. Twose. The theory of impurity conduction. *Adv. Phys.*, 10:107–163, 1961.

- [Sto00] P. Stollmann. A short proof of a Wegner estimate and localization. *Arch. Math.*, 75:307–311, 2000.
- [Sto01] P. Stollmann. *Caught by disorder: bound states in random media*. Birkhäuser, Boston, 2001.
- [SVW98] C. Shubin, R. Vakilian, and T. Wolff. Some harmonic analysis questions suggested by Anderson–Bernoulli models. *Geom. Funct. Anal.*, 8:932–964, 1998.
- [Weg81] F. Wegner. Bounds on the density of states in disordered systems. *Z. Phys. B*, 44:9–15, 1981.

2.4 Ergebnisse

Bereits im ersten Jahr des Berichtszeitraumes, Oktober 2002, hat PD R. Römer einen Ruf an die University of Warwick angenommen, was die Schwerpunkte im vorliegenden Teilprojekt erheblich verschoben hat. Er hat, wie im Antrag ausgeführt, maßgeblich die numerische Kompetenz eingebracht und sein Fehlen hat die Arbeit an diesem Teil stark verzögert.

Numerische Ergebnisse

Zu untersuchen ist die Eigenwertverteilung (Zustandsdichte) des Bernoulli-Anderson-Modells in Dimensionen $d = 1, 2, 3$. Es sind die Eigenwerte einer Matrix zu berechnen, die durch Einschränkung eines zufälligen diskreten Schrödingeroperators auf einen Würfel mit Kantenlänge L entsteht. Zur Anwendung sollten iterative Verfahren wie z.B. Lanczos, Arnoldi kommen. Hierfür wurde die numerische Funktionsbibliothek Arpack eingesetzt. Desweiteren wurden direkte Löser benötigt. Hierfür wurde SuperLU eingesetzt. Zur Verringerung der effektiven Matrixgrößen sollte ein diskretes Birmann-Schwinger-Prinzip zur Anwendung kommen.

Das Programmierproblem ist in 3 Schritte unterteilt:

- Berechnung der Eigenwerte des BAM-Modells mit Hilfe der implicitly restarted Arnoldi Method (Arpack standard mode)
- Berechnung der Eigenwerte des BAM-Modells mit Hilfe der implicitly restarted Arnoldi Method (Arpack shift and invert mode)
- Berechnung der Eigenwerte des BAM-Modells mit Hilfe der oben genannten Verfahren und des Birmann-Schwinger-Prinzips

Die Programmierarbeiten für den ersten Schritt sind weitgehend abgeschlossen. Das Programm ist lauffähig auf den HP-UX und Linux Rechnern (PIII 500MHz) der Physik sowie auf dem Itanium IA64 basierten 4 Prozessorsystem der Fakultät für Mathematik. Die maximale Matrixgröße, für die das Programm Ergebnisse liefert, liegt in Abhängigkeit von der gewählten Anzahl der zu berechnenden Eigenwerte und der Anzahl der verwendeten Lanczos-Basisvektoren bei ca. 8000×8000 . Dies entspricht einem BAM-Modell mit Kantenlänge $L = 20$.

Da die implicitly restarted Arnoldi Method nur an den Rändern des Spektrums effizient rechnet, wurde im zweiten Schritt die implicitly restarted Arnoldi Method im shift and invert mode verwendet. Hier werden beliebige Portionen des Spektrums an den

Rand geshiftet, berechnet und wieder zurück transformiert. Für diese Methode werden Funktionen benötigt, die Matrix-Vektor-Multiplikationen durchführen und Gleichungssysteme lösen. Hierfür wurde die Funktionsbibliothek SuperLU benutzt. Als Grundlage diente hier das Programm aus Schritt 1.

Wir können mit dieser Methode Ergebnisse erzielen für Matrixgrößen 36000×36000 . Dies entspricht etwa einem dreidimensionalen Modell mit Kantenlänge $L = 33$. Hier ist jedoch zu erwarten, dass man durch einige systematische Änderungen im Programm und durch den Austausch der Funktionsbibliothek SuperLU gegen UMFPACK auch größere Modelle berechnen kann.

Für die Realisierung des dritten Programmierschrittes wurden die Programme aus Schritt 1 und 2 benötigt. Hier wurden grundlegende numerische und analytische Überlegungen zur numerischen Realisierung des diskreten Birmann-Schinger Prinzips angestellt. Durch anfänglich massive Probleme mit der Funktionsbibliothek SuperLU und durch den Wechsel von PD R. Römer an die University of Warwick im Oktober 2002 hat sich der Zeitplan verschoben. Daher ist dieser Programmteil zur Zeit noch nicht einsetzbar.

Es waren umfangreiche Programmieraufgaben zu erledigen, die sich in einigen tausend Zeilen Code substantieren. Zur Illustration mögen einige Beispielsamples dienen, die in den Abbildungen graphisch dargestellt sind. Hierbei sind verschiedene Realisierungen des Zufallspotentials gerechnet worden. Die Berechnungen sowie die Auswertung der Ergebnisse werden gemäß dem ursprünglichen Antrag weitergeführt und in die Dissertation [Klang] von S. Klassert einfließen.

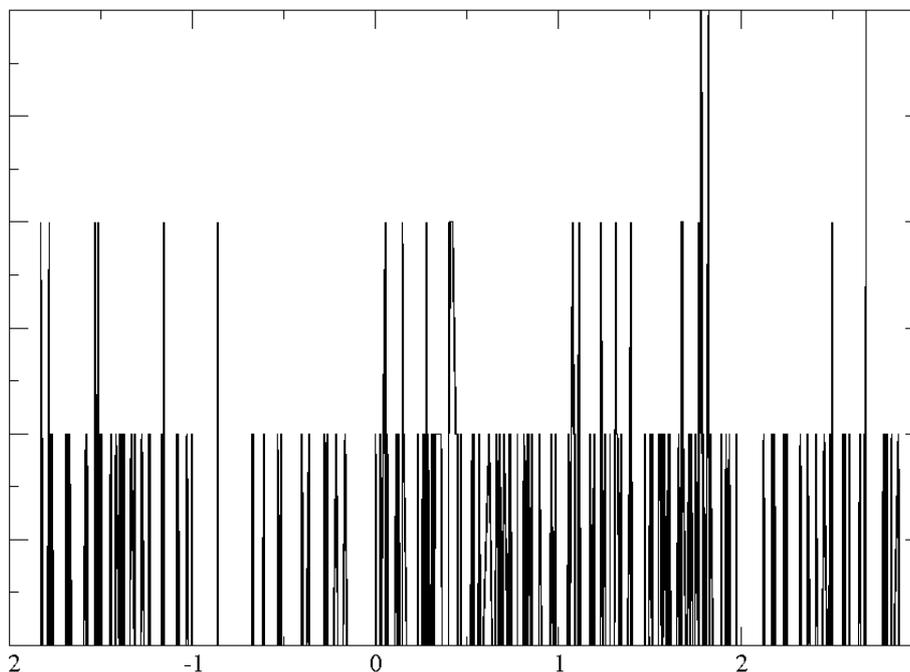


Abbildung 2.1: Eine Dimension, Kantenlänge 1000

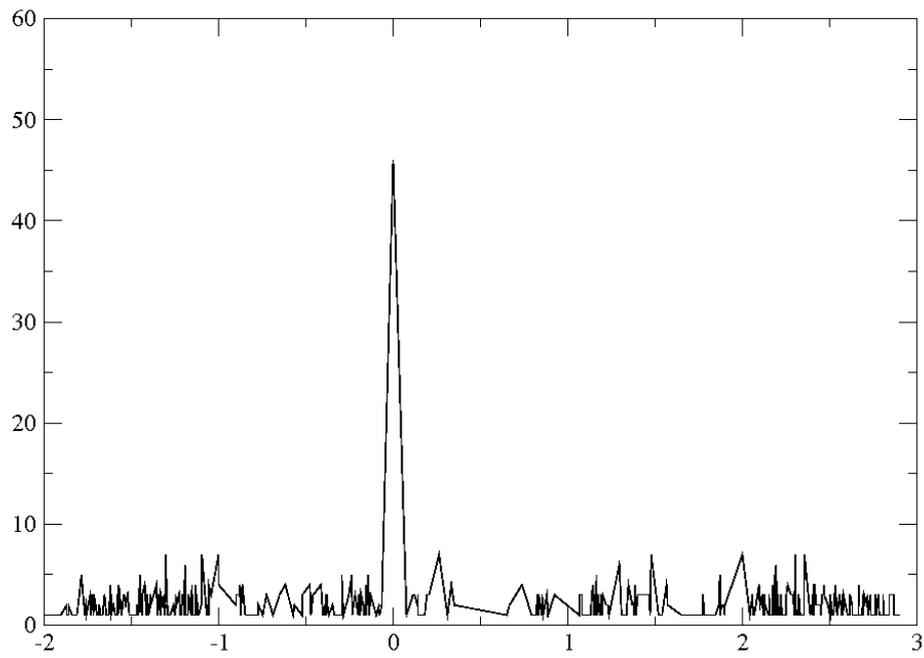


Abbildung 2.2: Drei Dimensionen, Kantenlänge 10, Realisierung 1

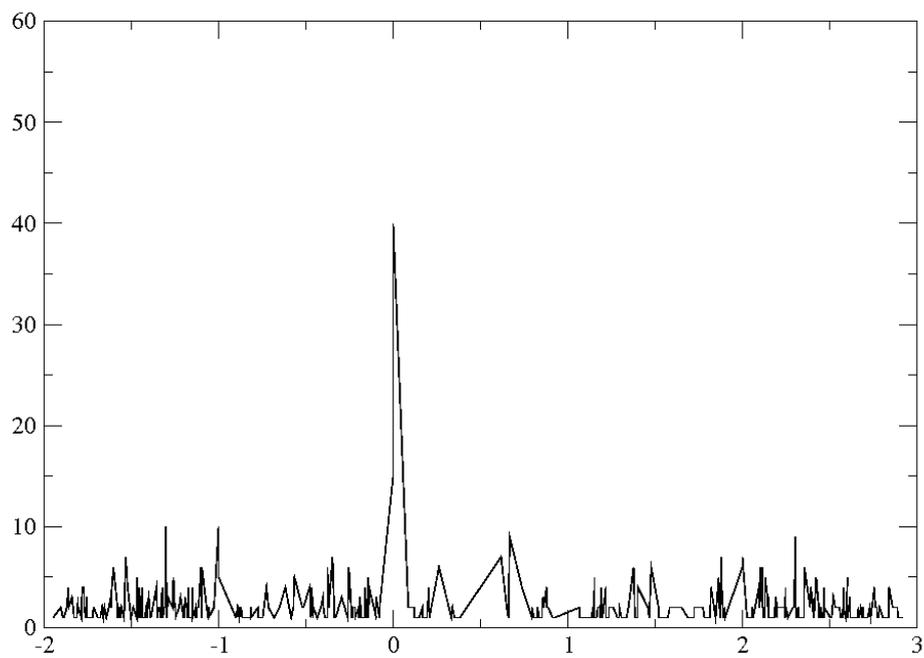


Abbildung 2.3: Drei Dimensionen, Kantenlänge 10, Realisierung 2

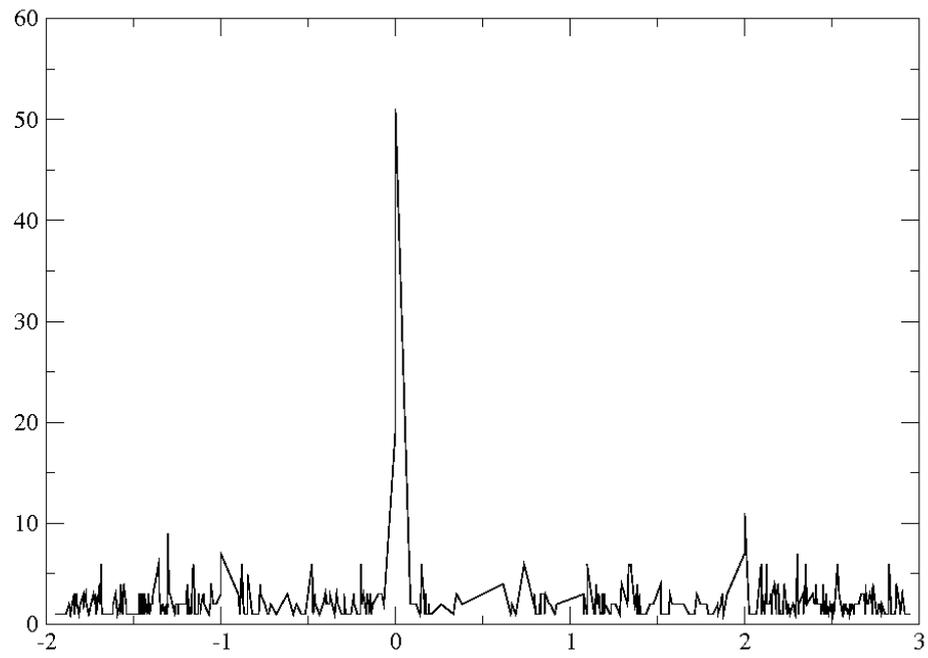


Abbildung 2.4: Drei Dimensionen, Kantenlänge 10, Realisierung 3

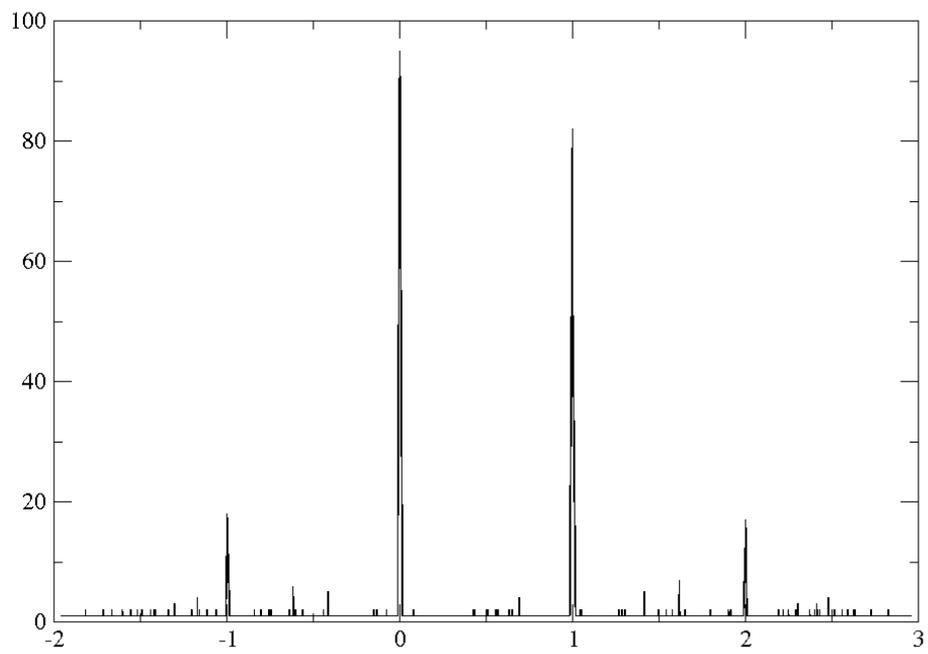


Abbildung 2.5: Drei Dimensionen, Kantenlänge 20

Weitere Ergebnisse sind in [PRS03] veröffentlicht. Mit den analytischen Grundlagen zu Wegner-Ungleichungen und Lokalisierung sind die Arbeiten [dMS03a, dMS03b, dMSS04, BKS03, Stont] befasst. Die Kooperation, die zum Teil diesen Arbeiten zugrunde liegt, wurde innerhalb des SFB gefördert.

Ein Schritt in die Richtung, geeignete Stetigkeitsaussagen der integrierten Zustandsdichte für singuläre Maße zu erhalten, wurde in der Arbeit [HKN⁺04] geleistet.

Das spektakulärste Ergebnis im Zusammenhang mit dem hier vorliegenden Teilprojekt wurde aber außerhalb des SFB erzielt. Mit J. Bourgain (Träger der Fields-Medaille) und C. Kenig haben zwei herausragende Mathematiker die positive Lösung des Problems angekündigt, [BK04]: Auch in $d \geq 2$ liegt im kontinuierlichen Bernoulli-Anderson-Modell Lokalisierung für kleine Energien vor.

Literaturverzeichnis

- [BK04] J. Bourgain and C. Kenig. On localization in the continuous Anderson-Bernoulli model in higher dimensions. *submitted*, 2004.
- [BKS03] S. Böcker, W. Kirsch, and P. Stollmann. Spectral theory for nonstationary random models. *Preprint*, 2003.
- [dMS03a] A. Boutet de Monvel and P. Stollmann. Dynamical localization for continuum random surface models. *Arch. Math.*, 80:87 – 97, 2003.
- [dMS03b] A. Boutet de Monvel and P. Stollmann. Eigenfunction expansions for generators of dirichlet forms. *J. Reine Angew. Math.*, 561:131 – 144, 2003.
- [dMSS04] A. Boutet de Monvel, P. Stollmann, and G. Stolz. Absence of continuous spectral types for certain nonstationary random models. *Preprint*, 2004.
- [HKN⁺04] D. Hundertmark, R. Killip, S. Nakamura, P. Stollmann, and I. Veselic. Bounds on the spectral shift function and the density of states. *Preprint*, 2004.
- [Klang] S. Klassert. Spektraleigenschaften diskreter Schrödinger-Operatoren mit zufälligem Potential. Doktorarbeit, TU Chemnitz, in Vorbereitung.
- [PRS03] I. Plyushchay, R. A. Römer, and M. Schreiber. The three-dimensional Anderson model of localization with binary random potential. *Phys. Rev. B* 68, 064201, 2003.
- [Stont] P. Stollmann. Localization and delocalization for nonstationary models. In P. Blanchard and G. Dell’Antonio, editors, *Multiscale Methods in Quantum Mechanics: Theory and Experiment*, Boston, in print. Birkhäuser.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Es stehen noch Antworten auf einige der Fragen aus dem zugrunde liegenden Antrag aus. Nach Beheben der Probleme im Zusammenhang mit der Programmierung sollen nun die geplanten Produktionsläufe stattfinden. Auch nach der Lösung des Ausgangsproblems durch Bourgain und Kenig bleiben wichtige Fragen offen, da dort ausschließlich das kontinuierliche Modell behandelt wurde.

Projektbereich

B

Hard- und Softwarearchitekturen

Teilprojekt

B8

Parallelisierung irregulärer numerischer Algorithmen

2.1 Teilprojekt B8

Parallelisierung irregulerer numerischer Algorithmen

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Gudula Runger
08.08.1959
Professur Praktische Informatik
Fakultat fur Informatik
Technische Universitat Chemnitz
09107 Chemnitz
Tel.: (0371) 531-1794
Fax: (0371) 531-1803
ruenger@informatik.tu-chemnitz.de

2.1.2 Projektbearbeiter

Dipl. Inf. Judith Hippold, Professur Praktische Informatik, Projektstelle seit 01/2002
Dipl. Inf. Robert Reilein-Ru, Professur Praktische Informatik, Grundausrustung
Dr. Klaus Hering, Professur Praktische Informatik, Grundausrustung bis 10/2002

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Gegenstand des Teilprojektes ist die effiziente parallele Realisierung irregulerer Algorithmen auf Rechnern mit verteiltem Speicher, Clustern oder Clustern von SMPs (symmetric multiprocessor). Die Klasse der irreguleren Algorithmen umfasst dabei Probleme mit unregelmaigen oder laufzeitabhangigen Berechnungs- und Kontrollstrukturen, fur die Standardparallelisierungstechniken, wie datenparallele oder SPMD-Abarbeitung, nicht die gewunschte Effizienz und Skalierbarkeit aufweisen oder die sich einer solchen regelmaigen Parallelisierung ganz entziehen. Grunde fur irreguleres Verhalten sind vielfaltig und umfassen dunn-besetzte, blockstrukturierte, adaptive oder hierarchische Anwendungsprobleme und Algorithmen mit sehr unterschiedlichen dynamischen Eigenschaften der zu Grunde liegenden Daten- und Berechnungsstrukturen. Entsprechend der Auspragung der Irregularitat variieren auch die Parallelisierungsmethoden fur die jeweilige Anwendungsklasse, die vom Einsatz alternativer Programmiermodelle mit planbaren Eigenschaften bis hin zu vollstandig dynamischen Abarbeitungskonzepten zur Laufzeit reichen.

Ziel des Projektes war es, die Parallelisierung irregulerer Algorithmen insbesondere hinsichtlich der Moglichkeiten zur effizienten Realisierung der laufzeitabhangigen Komponenten auf Rechnern mit verteiltem Adressraum zu untersuchen und hierbei die Aspekte geeigneter Datenstrukturen und Analysefunktionen, den Einsatz von Task Pools fur das Scheduling und Lastverteilung sowie Kommunikationsoptimierung schwerpunktmaig zu berucksichtigen. Neben der Entwicklung dieser Konzepte und ihrer Einbettung in die jeweilige Anwendung sollten Methoden entwickelt werden, die Eigenschaften eines speziellen Anwendungsalgorithmus zur Effizienzverbesserung in die parallele Softwareerstellung erganzend einbringen konnen. Als Anwendungsalgorithmen sollten das hierar-

chische Radiosity-Verfahren, adaptive gitterbasierte Losungsverfahren fur partielle Differentialgleichungen, strukturiert irregulare Probleme sowie Berechnungen im Zusammenhang mit nichtlinearen dynamischen Systemen untersucht werden, wobei letztere als Kooperationen mit anderen Teilprojekten angesiedelt sind. Die Untersuchung dieser Anwendungsklassen mundet in die Teilaufgaben:

- Task Pool Teams zur Parallelisierung hierarchischer Algorithmen,
- Daten- und Kommunikationsschicht fur adaptive Algorithmen,
- Kommunikationsbibliothek fur orthogonale Prozessorgruppen,
- Bibliotheksunterstutzung fur hierarchische Multi-Prozessor Tasks,
- Parallelisierung im Bereich nichtlinearer dynamischer Systeme.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

2.3.1 Task Pool Teams zur Parallelisierung hierarchischer Algorithmen

Zur Parallelisierung hierarchischer Algorithmen oder baumartiger Branch & Bound Algorithmen wurde das Konzept der Task Pool Teams entwickelt, modular realisiert und auf verschiedene Anwendungsalgorithmen und parallele Plattformen angewendet. Als konkretes Beispiel wurde insbesondere der hierarchische Radiosity Algorithmus, ein globales Beleuchtungsverfahren der Computergrafik zur Simulation der Beleuchtung 3-dimensionaler Szenen in geschlossenen Rumen, betrachtet. Aufgrund des hierarchischen Berechnungsansatzes erfolgt eine unregelmaige Verfeinerung der zu Grunde liegenden Datenstrukturen, die stark von der Eingabeszene des Algorithmus abhangt und eine parallele Umsetzung erschwert. Fur Architekturen mit gemeinsamem Speicher sind bereits parallele Implementierungen erfolgt [WOT⁺95, KR02, PRR98, KR04]. Dabei wurde der Algorithmus in Berechnungsaufgaben, so genannte Tasks, unterteilt und diese mit Task Pools [But97, RR00c, SHT⁺95] abgearbeitet. Task Pools werden zur dynamischen Rebalancierung der Last eingesetzt. Die Task Pool Datenstruktur dient hierbei zum Speichern und Verwalten der Tasks. Eine feste Anzahl von Threads kann aus dem Pool Tasks entnehmen und dynamisch neue Tasks einstellen. Bei entsprechendem Scheduling der Tasks auf die Prozessoren erfolgt eine effiziente Auslastung, da nach Abarbeitung eines Tasks automatisch ein neuer Task aus dem Pool entnommen wird. Je nach Anwendungsproblem konnen verschiedene interne Umsetzungen der Task Pools von Nutzen sein. Gangig sind Pools mit einer zentralen Taskqueue aber auch mit mehreren Taskqueues. Vorteilhaft beim Einsatz mehrerer Taskqueues sind die fehlenden Zugriffskonflikte durch gleichzeitig zugreifende Threads. Um hier jedoch Lastbalancierung zu erreichen, sind zusatzliche Mechanismen, z. B. Task Stealing, bei dem nach dem Leerlaufen der eigenen Taskqueue ein Thread versucht aus anderen Taskqueues Tasks zu stehlen, notwendig. Ein detaillierter Leistungsvergleich verschiedener Implementierungen ist in [KR02, KR04] zu finden.

Eine Implementierung fur Rechner mit verteiltem Speicher gestaltet sich komplexer, da die dynamischen Datenzugriffsmuster variieren und auch Zugriffe auf Daten im Speicherbereich anderer Prozessoren nach sich ziehen konnen, was zu irregularen Kommunikationsmustern fuhrt. Fur hybride Architekturen, wie z. B. SMP-Cluster, erscheint daher ein hybrides Programmiermodell geeignet, bei dem die Kommunikation mittels Message-Passing nur zwischen den Clusterknoten erfolgt, SMP-intern jedoch mehrere Threads

verschiedene Tasks uber derselben Datenmenge bearbeiten. Damit ergibt sich die Anforderung der Realisierung von multi-threaded, asynchronen Kommunikationsroutinen und zusatzlichen, geeigneten, verteilten Verwaltungsdatenstrukturen fur die effiziente Identifikation von Daten in entfernten (remoten) Speicherbereichen.

2.3.2 Daten- und Kommunikationsschicht fur adaptive Algorithmen

Adaptive Probleme zeichnen sich durch sich dynamisch verfeinernde, unregelmaige Gitterstrukturen aus, auf denen Berechnungen ausgefuhrt werden, die die dynamische Verfeinerung hervorrufen. Ein typisches Anwendungsbeispiel sind adaptive Finite Elemente Methoden (FEM). Eine Haupt-Herausforderung der parallelen Realisierung adaptiver gitterbasierter Losungsverfahren fur partielle Differentialgleichungen bildet die durch eine Verteilung der adaptiven Gitterstrukturen auf die Prozessoren notwendige Organisation eines effizienten Datentransfers. Datenstrukturbestandteile des Gitters, die sich (bzw. deren uber- oder untergeordnete Strukturen) nach einer Verteilung im Speicherbereich verschiedener Prozessoren befinden, erfordern zumeist eine global einheitliche Sicht, variieren aber gleichzeitig durch die adaptive Anpassung des Gitters in den lokalen Speichern. Als besonders kostenintensiv haben sich hierbei komplex strukturierte Gitter in drei Dimensionen mit hangenden Knoten herausgestellt. Hier sind fur die resultierende unregelmaige Kommunikation geeignete Kommunikationsprotokolle und geeignete verteilte Verwaltungsdatenstrukturen notwendig, die die aufkommenden Kommunikationsanforderungen realisieren, verringern und optimieren. Darauf aufbauend werden Mechanismen zur Lastbalancierung benotigt, die eine Umverteilung der Daten berechnen und vornehmen. Ersteres kann auf das NP-vollstandige Graphpartitionierungsproblem zuruckgefuhrt werden, fur das eine Reihe von Algorithmen [KL70, PSW93, PSL90, KK99, KK98, HL93a, SKK00] und Werkzeuge [KK95, HL93b, KSK02] existieren. Die tatsachliche effiziente Umverteilung anhand der neu berechneten Partitionen liegt dann meist in der Verantwortung des Anwendungsprogrammierers.

Mit Hinblick auf die variable Einsetzbarkeit adaptiver gitterbasierter Losungsverfahren bietet ein gekapselt implementierter Losungsansatz oben genannter Probleme erhebliche Vorteile. So konnen Erweiterungen und Optimierungen leichter eingebracht, Plattformunabhangigkeit erzielt und der Anwendungsprogrammierer von der Realisierung effizienter Kommunikationsmechanismen und verteilter Datenstrukturen entlastet werden. Systeme mit Unterstutzung irregularer Anwendungen durch Aufsetzen eines globalen Adressraummodells sind beispielsweise Titanium [YSP⁺98] oder TreadMarks [ACD⁺96]. Die Sicht auf einen verteilten Adressraum fur den Anwender zu erhalten, bietet jedoch durchaus Vorteile, da vom Anwendungsprogrammierer anwendungs-spezifische Details und Optimierungen speziell fur verteilte Berechnungen eingebracht werden konnen. Zudem existiert meist bereits eine sequentielle Programmversion, die mit nicht zu umfangreichen Modifizierungen auf verteilten Speicher portiert werden kann.

2.3.3 Kommunikationsbibliothek fur orthogonale Prozessorgruppen

Obwohl die parallele Programmierung im SPMD-Stil mit Standardkommunikationsbibliotheken wie MPI oder PVM fur unregelmaige Anwendungsprobleme haufig zu guten Parallelisierungsergebnissen auf Rechnern mit verteiltem Speicher fuhrt, kann dies auf

Maschinen mit sehr groer Prozessoranzahl Skalierbarkeits- und Effizienzprobleme verursachen, insbesondere wenn kollektive Kommunikationsoperationen eingesetzt werden, etwa fur Konvergenztests oder zur Akkumulation lokaler Teilergebnisse. Ein Grund ist die Ausfuhrungszeit kollektiver Kommunikationsoperationen, die logarithmisch oder linear in der Anzahl der teilnehmenden Prozesse steigt, so dass Kommunikation auf kleineren Teilgruppen von Prozessoren ausgefuhrt werden sollte, wenn dies aus algorithmischen Grunden moglich ist. Eine solche algorithmische Eigenschaft weisen Algorithmen mit zwei- oder hoher-dimensionalen Taskgittern auf, in denen Berechnungs- und Kommunikationsphasen der Abarbeitung so strukturiert sind, dass Tasks jeweils nur mit Tasks innerhalb eines (oder weniger) Teilgitters kooperieren und kommunizieren. Hier kann es zu erheblichen Effizienzgewinnen kommen, wenn die Zuordnung von Tasks zu Prozessoren diese Eigenschaft durch Kommunikation auf Teilgruppen von Prozessoren widerspiegelt [RR00b]. Das Programmiermodell der Orthogonalen Prozessorgruppen stellt ein zwei- oder hoher-dimensionales Prozessorgitter bereit, fur das eine feste Anzahl von Prozessorpartitionen betrachtet wird, die jeweils disjunkten mehrdimensionalen Teilgittern entsprechen. Ein entsprechendes Mapping von Tasks zu Prozessoren fuhrt so zu Berechnungs- und Kommunikationsphasen auf den alternativ zur Verfugung stehenden Partitionen im Gruppen-SPMD-Stil. Zur Programmierung solcher Programmstrukturen wird eine komfortable Programmierumgebung benotigt, die einerseits eine leichte Spezifikation der Task-, Partitions- und Mappingstruktur erlaubt und andererseits die benotigten Gruppen, Kommunikatoren und Zuordnungen im Hintergrund effizient aufbaut und verwaltet.

2.3.4 Bibliotheksunterstutzung fur hierarchische Multi-Prozessor Tasks

Multi-Prozessor-Tasks (M-Task) bezeichnen Teilaufgaben eines Anwendungsalgorithmus, die jeweils auf mehreren Prozessoren ausgefuhrt werden konnen. Der gesamte Algorithmus kann aus einer Menge von solchen Multi-Prozessor-Tasks bestehen, die miteinander kooperieren und so die Gesamtstruktur des Programms bestimmen. Die M-Task-Struktur kann gewisse unregelmaige Strukturen aufweisen und spiegelt modulare Eigenschaften der Anwendung wieder, die in einen M-Task-Graphen mit Abhangigkeiten dargestellt werden konnen. Solche, auch als strukturiert irregular bezeichnete, Strukturen finden sich in groen gekoppelten Anwendungsalgorithmen, aber auch in neuen parallelen Losungsverfahren fur gewohnliche Differentialgleichungssysteme oder in grobkornigen hierarchischen Algorithmen wie der Strassen-Multiplikation. Je nach Anwendung liegt eine M-Task-Struktur statisch fest und kann durch Scheduling und Laufzeitvorhersagemechanismen zur Planung einer effizienten Realisierung genutzt werden, wobei auch hier Skalierbarkeit und Effizienz durch Prozessorteilgruppen erreicht werden konnen. Zur Programmierung werden eine Reihe von Ansatzen vorgestellt, u. a. Fx [SSOG93, SY97], Paradigm [BCG⁺95, RSB97], Braid, Opus und Orca [BH98]. Einen Uberblick gibt [BH98]. Die Ansatze haben spezifische integrierte Kostenmodelle mit deren Hilfe geeignete Implementierungen gewahlt werden konnen. Dabei konnen Schedulingalgorithmen fur Multiprozessor-Task-Scheduling genutzt werden [TWY92, TLW⁺94, RR96, RR00a].

Eine weitere Herausforderung ist die dynamische Entstehung von M-Task-Strukturen, beispielsweise bei hierarchischen Algorithmen. Hierfur muss die Kreierung und Abarbei-

tung von M-Tasks mit Abhangigkeiten zur Laufzeit moglich sein, was die dynamische Kreierung von Prozessorteilgruppen und Kommunikationsstrukturen einschliet.

2.3.5 Parallelisierung im Bereich nichtlinearer dynamischer Systeme

In Kooperation mit Teilprojekt C8 wurde die Parallelisierung eines sequentiell vorliegenden Programms zur Bestimmung von Lyapunovexponenten und -vektoren in groen nichtlinearen dynamischen Systemen betrachtet. Die grobe Struktur des Anwendungsprogramms besteht in der simultanen Integration zweier groer Systeme von linearen bzw. nichtlinearen gewohnlichen Differentialgleichungen, deren Integrationszeitschritte periodisch durch notwendige Reorthogonalisierungen der Vektoren unterbrochen wird. Genau dieser Reorthogonalisierungsschritt stellt im sequentiellen Programm den zeitaufwendigsten Anteil dar, so dass die Ausnutzung paralleler Abarbeitung insbesondere im Hinblick der Losung groerer Probleme wesentlich ist. Die Aufgaben der Uberfuhrung in eine effiziente parallele Bearbeitung umfassen die programmtechnische Analyse des sequentiellen Algorithmus sowie die darauf aufbauende modulare Parallelisierung, was die Reorthogonalisierung selber als auch die parallele Schnittstelle zum Integrationsteil, also die periodisch wiederkehrende Kopplung verschiedener Programmierparadigmen, beinhaltet. Wichtiger Aspekt ist hierbei die Lastbalancierung im Integrationsteil, die Parallelisierungsstrategie der Reorthogonalisierung und die moglicherweise mit Kommunikation verbundene Gestaltung der Schnittstelle gegeneinander abzuwagen, um zu einer persistenten Leistung zu gelangen.

Literaturverzeichnis zu 2.3 (eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

- [ACD⁺96] C. Amza, A. L. Cox, S. Dwarkadas, P. Keleher, H. Lu, R. Rajamony, W. Yu, and W. Zwaenepoel. TreadMarks: Shared Memory Computing on Networks of Workstations. *IEEE Computer*, 29(2):18–28, 1996.
- [BCG⁺95] P. Banerjee, J. Chandy, M. Gupta, E. Hodge, J. Holm, A. Lain, D. Palermo, S. Ramaswamy, and E. Su. The Paradigm Compiler for Distributed-Memory Multicomputers. *IEEE Computer*, 28(10):37–47, 1995.
- [BH98] H. Bal and M. Haines. Approaches for Integrating Task and Data Parallelism. *IEEE Concurrency*, 6(3):74–84, 1998.
- [But97] D. R. Butenhof. *Programming with POSIX Threads*. Addison-Wesley, 1997.
- [HL93a] B. Hendrickson and R. Leland. A Multilevel Algorithm for Partitioning Graphs. Technical Report 93-1301, Sandia National Lab, Albuquerque, NM, 1993.
- [HL93b] B. Hendrickson and R. Leland. The CHACO User’s Guide. Technical Report 93-2339, Sandia National Lab, Albuquerque, NM, 1993.
- [KK95] G. Karypis and V. Kumar. METIS Unstructured Graph Partitioning and Sparse Matrix Ordering System. Technical Report <http://www.cs.umn.edu/metis>, Department of Computer Science, University of Minnesota, Minneapolis, MN, 1995.
- [KK98] G. Karypis and V. Kumar. Multilevel k-way Partitioning Scheme for Irregular Graphs. *Journal of Parallel & Distributed Computing*, 48:96–129, 1998.

- [KK99] G. Karypis and V. Kumar. A Fast and Highly Quality Multilevel Scheme for Partitioning Irregular Graphs. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 20(1):359–392, 1999.
- [KL70] B. Kernighan and S. Lin. An Efficient Heuristic Procedure for Partitioning Graphs. *Bell System Technical Journal*, 29:291–307, 1970.
- [KR02] M. Korch and T. Rauber. Evaluation of Task Pools for the Implementation of Parallel Irregular Algorithms. In *Proc. of ICPP: Workshop on Compile & Runtime Techniques for Parallel Computing (CRTPC02)*, pages 597–604, Vancouver, Canada, 2002.
- [KR04] M. Korch and T. Rauber. A Comparison of Task Pools for Dynamic Load Balancing of Irregular Algorithms. *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, 16(1):1–47, 2004.
- [KSK02] G. Karypis, K. Schloegel, and V. Kumar. ParMetis, Parallel Graph Partitioning and Sparse Matrix Ordering Library, Version 3.0. Technical report, University of Minnesota, Department of Computer Science and Engineering, Army HPC Research Center, Minneapolis, MN, 2002.
- [PRR98] A. Podehl, T. Rauber, and G. Runger. A Shared-Memory Implementation of the Hierarchical Radiosity Method. *Theoretical Computer Science*, 196(1-2):215–240, 1998.
- [PSL90] A. Pothen, H. D. Simon, and K. P. Liou. Partitioning Sparse Matrices with Eigenvectors of Graphs. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 11:430–452, 1990.
- [PSW93] A. Pothen, H. D. Simon, and L. Wang. Spectral Nested Dissection. Technical Report CS-92-01, Computer Science, Pennsylvania State University, University Park, PA, 1993.
- [RR96] T. Rauber and G. Runger. The Compiler TwoL for the Design of Parallel Implementations. In *Proc. of the 4th Int. Conf. on Parallel Architectures & Compilation Techniques (PACT96)*, pages 292–301, Boston, MA, 1996.
- [RR00a] T. Rauber and G. Runger. A Transformation Approach to Derive Efficient Parallel Implementations. *IEEE Transactions on Software Engineering*, 26(4):315–339, 2000.
- [RR00b] T. Rauber and G. Runger. Deriving Array Distributions by Optimization Techniques. *Journal of Supercomputing*, 15(3):271–293, 2000.
- [RR00c] T. Rauber and G. Runger. *Parallele und Verteilte Programmierung*. Springer, 2000.
- [RSB97] S. Ramaswamy, S. Sapatnekar, and P. Banerjee. A Framework for Exploiting Task and Data Parallelism on Distributed-Memory Multicomputers. *IEEE Transactions on Parallel & Distributed Systems*, 8(11):1098–1116, 1997.
- [SHT⁺95] J. P. Singh, C. Holt, T. Totsuka, A. Gupta, and J. Hennessy. Load Balancing and Data Locality in Adaptive Hierarchical N-body Methods: Barnes-Hut, Fast Multipole, and Radiosity. *Journal of Parallel & Distributed Computing*, 27(2):118–141, 1995.

- [SKK00] K. Schloegel, G. Karypis, and V. Kumar. A Unified Algorithm for Load-balancing Adaptive Scientific Simulation. Technical Report 00-033, Department of Computer Science, University of Minnesota, Minneapolis, MN, 2000.
- [SSOG93] J. Subhlok, J. Stichnoth, D. O'Hallaron, and T. Gross. Exploiting Task and Data Parallelism on a Multicomputer. In *Proc. of the 4th ACM SIGPLAN Symposium on Principles & Practice of Parallel Programming (PPOPP93)*, pages 13–22, San Diego, CA, 1993.
- [SY97] J. Subhlok and B. Yang. A New Model for Integrating Nested Task and Data Parallel Programming. In *Proc. of the 6th ACM SIGPLAN Symposium on Principles & Practice of Parallel Programming (PPOPP97)*, pages 1–12, Las Vegas, Nevada, 1997.
- [TLW⁺94] J. Turek, W. Ludwig, J. Wolf, L. Fleischer, P. Tiwari, J. Glasgow, U. Schwiegels-hohn, and P. Yu. Scheduling Parallelizable Tasks to Minimize Average Response Time. In *Proc. of the 6th ACM Symposium on Parallel Algorithms & Architecture (SPAA94)*, pages 200–209, Cape May, New Jersey, 1994.
- [TWY92] J. Turek, J. L. Wolf, and P. S. Yu. Approximate Algorithms for Scheduling Parallelizable Tasks. In *Proc. of the 4th ACM Symposium on Parallel Algorithms & Architecture (SPAA92)*, pages 323–332, San Diego, CA, 1992.
- [WOT⁺95] S. C. Woo, M. Ohara, E. Torrie, J. P. Singh, and A. Gupta. The SPLASH-2 Programs: Characterization and Methodological Considerations. In *Proc. of the 22nd Annual Int. Symposium on Computer Architecture*, pages 24–36, 1995.
- [YSP⁺98] K. A. Yelick, L. Semenzato, G. Pike, C. Miyamoto, B. Liblit, A. Krishnamurthy, P. Hilfinger, S. L. Graham, D. Gay, P. Colella, and A. Aiken. Titanium: A High-Performance Java Dialect. *Concurrency: Practice and Experience*, 10(11–13):873–877, 1998.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Task Pool Teams zur Parallelisierung hierarchischer Algorithmen

Zur parallelen Abarbeitung des hierarchischen Radiosity Verfahrens und ahnlicher Algorithmen wurde das hybride Programmiermodell der Task Pool Teams entwickelt. Task Pool Teams [HR03a, Hip01] stellen ein Programmierkonzept fur verteilten Adressraum bzw. hybriden Adressraum dar und konnen als eine Erweiterung und Verallgemeinerung des Task Pool Konzeptes verstanden werden. Dem Nutzer werden Task Pool Teams uber eine einfache Schnittstelle zur Verfugung gestellt. Das hybride Programmiermodell [HR] kombiniert Shared-Memory Programmierung mittels von mit Pthreads realisierten Task Pools und Message-Passing Programmierung durch bereitgestellte asynchrone Kommunikationsroutinen. Das Konzept der Task Pools wird fur Plattformen mit gemeinsamem Speicher zur dynamischen Rebalancierung der Last eingesetzt werden. Task Pool Teams stellen verschiedene Task Pool Realisierungen (zentrale, verteilte Task-Schlangen, LI-FO/FIFO Zugriffsprinzip fur die Task-Schlangen, Taskstealingmechanismen) zur Auswahl, die je nach Anwendungsproblem ausgewahlt werden konnen.

Da an die Kommunikation in Task Pool Teams Anforderungen wie multi-threaded und asynchron gestellt werden und diese durch die meisten Implementierungen des MPI bzw. MPI-2 Standards nicht unterstutzt werden, Plattformunabhangigkeit aber erzielt werden soll, wurde durch den Einsatz eines expliziten Kommunikationsthreads die benotigte Funktionalitat hergestellt und uber entsprechende Schnittstellenfunktionen an den Nutzer weitergegeben. Als Implementierungsbasis dient eine Kombination aus Pthreads und MPI. Durch den expliziten Aufruf der Kommunikationsroutinen konnen die task-verarbeitenden Threads Datenanforderungen oder Informationen an Task Pools auf anderen Clusterknoten senden. Diese werden von den Kommunikationsthreads nach Nutzervorgaben ermittelt und ruckgesendet bzw. verarbeitet. Es stehen verschiedene Kommunikationsprotokolle zur Auswahl, die den Anforderungen der unterschiedlichen Anwendungen gerecht werden sollen [HR03b].

Task Pool Teams wurden bereits fur eine Umsetzung des hierarchischen Radiosity Algorithmus und eines baumartigen globalen Optimierungsverfahren auf verteilten Speicher eingesetzt [HR02]. Zur Erfassung der dynamisch variierenden Kommunikationsmuster wurden zusatzlich verteilte Verwaltungsdatenstrukturen entwickelt und in den Radiosity Algorithmus eingebracht. Dadurch konnten die durch Task Pool Teams bereitgestellten Kommunikationsroutinen, z.B. durch vorgezogenes Laden von spater benotigten Informationen oder die Zusammenfassung von Datenanforderungen, effizient ausgenutzt werden. Als weitere anwendungs-spezifische Optimierung wurde ein Software-Cache implementiert, der entfernte Daten mit hohen Zugriffsraten im lokalen Speicher dupliziert und in festgelegten Abstanden aktualisiert.

2.4.2 Kommunikations- und Datenverteilungsschicht fur adaptive Algorithmen

Im Teilprojekt wurde eine Datenverteilungs- und Kommunikationsschicht entwickelt, die die verteilte Adressraumsicht fur den Anwender erhalt, und in Zusammenarbeit mit Projektbereich A an einer adaptiven FEM mit hexaedrischen Elementen getestet [HMR04]. Die software-technischen Prinzipien der Datenverteilungsschicht [HR04a] zur Erzeugung so genannter Koharenzlisten basieren auf den bereits bei den verteilten Verwaltungsdatenstrukturen des hierarchischen Radiosity Algorithmus eingesetzten Methoden. Die Koharenzlisten spiegeln die Interaktion zwischen denen im Speicherbereich verschiedener Prozessoren befindlichen duplizierten Datenstrukturen wider und ermoglichen eine effiziente remote Identifikation dieser Datenstrukturen. Die interne Realisierung der Listen ist vollstandig gekapselt, durch den Nutzer aber uber eine Schnittstelle zugreifbar. Die dynamische Anpassung aufgrund adaptiver Verfeinerung erfolgt aus Sicht des Anwenders automatisch und wird durch Schnittstellenaufrufe des Nutzers ausgelost. Intern werden durch die Schnittstellenaufrufe korrektkeiterhaltende Veranderungen der Datenstrukturen vorgenommen. Die Koharenzlisten enthalten weitere Informationen uber die sich dynamisch andernden Hierarchien zwischen den Datenstrukturen.

Der Austausch von Daten ist in eine gekapselte Kommunikationsschicht eingebettet. Durch die bereitgestellten Schnittstellenfunktionen zum Senden und Empfangen von Daten kann der Nutzer Daten zwischen den verschiedenen Prozessen austauschen, ohne sich um deren Verteilung auf die Prozessoren und ihre Identifikation kummern zu mussen. Die benotigten Informationen fur Datentransfers werden aus den Koharenzlisten innerhalb der Kommunikationsschicht ermittelt.

Die gesamte Kommunikations- und Datenverteilungsschicht wurde hinsichtlich der Funktionalitat so gestaltet, dass eventuelle, zur Lastverteilung notwendige Umverteilungen moglich sind. Die parallele Abarbeitung der FEM Implementierung wird insbesondere auf SMP Clustern durch eine Vielzahl von Hardware und anwendungs-spezifischen Faktoren beeinflusst. Zur effizienten Ausfuhrung und fur dynamische Rebalancierungsentscheidungen wurden diese Faktoren und ihre Abhangigkeiten ermittelt [HR04b].

2.4.3 Kommunikationsbibliothek fur orthogonale Prozessorgruppen

Zur effizienten Implementierung von Algorithmen, die in Form eines zwei- oder mehrdimensionalen Taskgitters spezifiziert werden konnen, wurde das Programmiermodell Orthogonale Prozessorgruppen entwickelt [RRR01a, RRR04] und als Bibliothek umgesetzt [RRR01b]. Algorithmen konnen unter Verwendung der Bibliotheksfunktionen in Abschnitte mit orthogonaler Taskstruktur zerlegt werden, in denen jeweils ausgewahlte Teilgitter des zu Grunde liegenden Taskgitters aktiv sind. Die Abschnitte werden zur Ausfuhrung auf Hyperebenen eines Prozessorgitters abgebildet, wobei die Auswahl der Hyperebenen durch ein entsprechendes Schnittstellendesign unterstutzt wird. Die Bibliothek beinhaltet dafur Funktionen zum Aufbau von orthogonalen Zerlegungen des Prozessorgitters und fur die Zuordnung von Tasks zu Prozessoren. Die Schnittstelle der ORT Bibliothek ist an den Pthread Standard angelehnt. Sie bietet so dem Benutzer die Moglichkeit der Strukturierung des Algorithmus durch die Spezifikation von Abschnitten mit orthogonaler Taskstruktur als separate Funktionen.

Anhand einer Variante der LU-Zerlegung und eines explizit-iterierten Runge-Kutta Verfahrens zur Losung von gewohnlichen Differentialgleichungssystemen wurden die Einsatzmoglichkeiten der Bibliothek untersucht und fur verschiedene parallele Plattformen mit verteiltem Speicher getestet [RRR01c]. Fur beide Beispiele konnte eine deutliche Verbesserung der Laufzeit gegenuber Implementierungen erreicht werden, welche auf herkommlichen parallelen Implementierungen beruhen.

2.4.4 Bibliotheksunterstutzung fur hierarchische Multiprozessor-Tasks

Zur Abarbeitung modularer Programme mit hierarchisch strukturierten dynamisch entstehenden M-Tasks wurde die Laufzeitbibliothek TLib entwickelt [RR02]. Das bereitgestellte Bibliotheks-API bietet im Wesentlichen zwei Arten von Funktionen an: Funktionen zur dynamischen Erzeugung von hierarchischen Prozessorgruppen, wobei verschiedene, gleichzeitig existierende Hierarchien fur dieselbe Prozessormenge moglich sind, sowie Funktionen zur Koordination und Kooperation paralleler, geschachtelter M-Tasks. Ein Ineinanderschachteln von Funktionen beider Gruppen ist moglich, d. h. neue erzeugte M-Tasks konnen wiederum Gruppen-Splittings initiieren, auf denen wiederum M-Tasks ausgefuhrt werden. Ebenso werden durch den dynamischen Charakter rekursive Gruppen-Splittings ermoglicht, so dass rekursive Algorithmen oder Divide & Conquer-Verfahren in naturlicher Weise ausgedruckt und entsprechend parallel abgearbeitet werden konnen. Der dabei entstehende Verwaltungsoverhead ist marginal. Als Anwendungen werden neuere Verfahren zur Losung gewohnlicher Differentialgleichungssysteme betrachtet [RR04] sowie hierarchische Strukturen bei unterschiedlichen Verfahren zur parallelen Matrix-Matrix-Multiplikation [HRR04b, HRR04a], die das derzeit schnellste par-

alle Verfahren an Effizienz ubertreffen. Grundlage der Programmierung mit M-Tasks ist eine inharente M-Task-Struktur, die jedoch durchaus auf verschiedene Arten in einem parallelen Programm realisiert werden kann. Die Gestaltung von M-Task-Programmen kann durch eine vorgeschaltete Spezifikationsphase erganzt werden. In [ORR04] wird ein funktionaler Ansatz vorgestellt, der die auszunutzende modulare Struktur zunachst wiedergibt, um dann eine effiziente Abbildung auf M-Tasks vorzubereiten und durch Transformationen bereitzustellen. Die prinzipielle Vorgehensweise eines solchen Transformationsansatzes wird in [OR04] vorgestellt.

2.4.5 Parallelisierung im Bereich nichtlinearer dynamischer Systeme

Die durchgefuhrten Arbeiten konzentrierten sich auf parallele Orthogonalisierungsverfahren in Isolation und deren Einbindung in die Programmumgebung, wobei verschiedene Varianten entworfen, realisiert und getestet wurden. Zur Orthogonalisierung wurden parallele Versionen der Gram-Schmidt Orthogonalisierung und der QR-Dekomposition realisiert, in die effiziente Basisoperationen aus BLAS eingebunden wurden. Zum Vergleich wurden Algorithmen aus Bibliotheken wie ScaLAPACK herangezogen. Die parallelen Varianten unterscheiden sich hinsichtlich der Datenaufteilungen in spalten- und/oder zeilenweise Blockverteilung der Eingabematrix auf einem logisch zweidimensionalen Prozessgitter. Die Einbindung der Reorthogonalisierungskomponente benotigt je nach Datenverteilung einen nicht unerheblichen Kommunikationsaufwand zur Erhaltung einer Datenverteilungsvariante fur die korrekte Programmabarbeitung. Je nach Kommunikationsoverhead der Schnittstelle und paralleler Kosten der Reorthogonalisierung kann auch eine suboptimale Orthogonalisierungskomponente zur besten Gesamtleistung fuhren. Stark beeinflusst wird dies auch durch die genutzte parallele Hardware und es wurden daher Experimente auf verschiedenen Rechnern durchgefuhrt, dem Beowulf-Cluster CLiC, einem Dual-XEON-Cluster und dem IBM Regatta-System des NIC [RRSY04]. Die entstandene Bibliothek von parallelen Orthogonalisierungsverfahren und zugehorigen Schnittstellen [Sch04] erlaubt eine flexible, modulare Zusammensetzung des Gesamtprogramms zur effizienten Nutzung der Hardware.

Literaturverzeichnis

Referierte Zeitschriftenbeitrage

- [HRT04] K. Hering, G. Runger, and S. Trautmann. Modular Construction of Model Partitioning Processes for Parallel Logic Simulation, Erscheint in: Special Issue: Int. Journal of Computational Science and Engineering, Inderscience, 2004.
- [KRR04] C. Koziar, R. Reilein, and G. Runger. Load Imbalance Aspects in Atmosphere Simulations, Erscheint in: Special Issue: Int. Journal of Computational Science and Engineering, Inderscience, 2004.
- [OR04] J. O'Donnell and G. Runger. Derivation of a Logarithmic Time Carry Lookahead Addition Circuit, Erscheint in: Journal of Functional Programming, Cambridge University Press, 2004.

- [RR04b] T. Rauber and G. Runger. Program-Based Locality Measures for Scientific Computing, Erscheint in: *Int. Journal of Foundations of Computer Science*, World Scientific, 2004.
- [RRR04] T. Rauber, R. Reilein, and G. Runger. Group-SPMD programming with orthogonal processor groups. *Concurrency: Practice and Experience*, 16(2–3):173–195, 2004.

Buchbeitrage

- [RR04a] T. Rauber and G. Runger. Parallel Implementation Strategies for Algorithms from Scientific Computing. In Hergert W., Ernst A., and Dane M., editors, *Computational Materials Science, From Basic Principles to Material Properties, Series: Lecture Notes in Physics, Vol. 642*. Springer Verlag, 2004.

Referierte Konferenz- und Workshopbeitrage

- [HMR04] J. Hippold, A. Meyer, and G. Runger. An Adaptive, 3-Dimensional, Hexahedral Finite Element Implementation for Distributed Memory. In J. J. Dongarra M. Bubak, G. D. van Albada, editor, *Proc. of Int. Conf. on Computational Science (ICCS04), LNCS 3037*, pages 149–157. Springer Verlag, Poland, Krakau, 2004.
- [HR03a] J. Hippold and G. Runger. A Communication API for Implementing Irregular Algorithms on Clusters of SMPs. In J. Dongarra, D. Laforenza, and S. Orlando, editors, *Proc. of the 10th EuroPVM/MPI2003, LNCS 2840*, pages 455–463. Springer Verlag, Venedig, Italien, 2003.
- [HR03b] J. Hippold and G. Runger. Task Pool Teams for Implementing Irregular Algorithms on Clusters of SMPs. In *Proc. of the 17th Int. Parallel & Distributed Processing Symposium (IPDPS03), (CD-ROM)*, Nizza, Frankreich, 2003.
- [HR04a] J. Hippold and G. Runger. A Data Management and Communication Layer for Adaptive, Hexahedral FEM. Erscheint in: *Proc. of Euro-Par 2004*, Pisa, Italien, LNCS, Springer Verlag, 2004.
- [HR04b] J. Hippold and G. Runger. Interaction of Cache, Communication, and Load Increase on SMP Clusters for Parallel Adaptive FEM, Angenommen fur: PARA04, Workshop on State-of-the-Art in Scientific Computing, Lyngby, Danemark, 2004.
- [HRR04a] S. Hunold, T. Rauber, and G. Runger. Multilevel Hierarchical Matrix Multiplication on Cluster. Erscheint in: *Proc. of Int. Conf. on Supercomputing (ICS04)*, Saint-Malo, Frankreich, 2004.
- [HRR04b] S. Hunold, T. Rauber, and G. Runger. Hierarchical Matrix-Matrix Multiplication Based on Multiprocessor Tasks. In J. J. Dongarra M. Bubak, G. D. van Albada, editor, *Proc. of Int. Conf. on Computational Science (ICCS04), LNCS 3037*, pages 3–11. Springer Verlag, Poland, Krakau, 2004.
- [ORR04] J. O’Donnell, T. Rauber, and G. Runger. Functional Realization of Coordination Environments for Mixed Parallelism. In *Proc. of IPDPS: 6th Workshop on Advances in Parallel & Distributed Computational Models (APDCM04), (CD-ROM)*, Santa Fe, New Mexico, 2004.
- [RR02] T. Rauber and G. Runger. Library Support for Hierarchical Multi-Processor Tasks. In *Proc. of ACM/IEEE Supercomputing Conf. (SC02), (CD-ROM)*, Baltimore, USA, 2002.

- [RR04] T. Rauber and G. Runger. Execution Schemes for Parallel Adams Methods. Erscheint in: Proc. of Euro-Par 2004, Pisa, Italien, LNCS, Springer Verlag, 2004.
- [RRR01a] T. Rauber, R. Reilein, and G. Runger. Orthogonal Processor Groups for Message-Passing Programs. In *Proc. of HPCN Europe 2001, LNCS 2110, Amsterdam, Niederlande*, pages 363–372. Springer Verlag, 2001.
- [RRR01b] T. Rauber, R. Reilein, and G. Runger. Library Support for Orthogonal Processor Groups. In *Proc. of the 13th ACM Symposium on Parallel Algorithms & Architectures (SPAA)*, pages 316–317, Kreta, Griechenland, 2001. ACM Press.
- [RRR01c] T. Rauber, R. Reilein, and G. Runger. ORT – A Communication Library for Orthogonal Processor Groups. In *Proc. of ACM/IEEE Supercomputing Conf. (SC01), (CD-ROM)*, Denver, USA, 2001.
- [RRSY04] G. Radons, G. Runger, M. Schwind, and G. Yang. Parallel Algorithms for the Determination of Lyapunov Characteristics of Large Nonlinear Dynamical Systems, Angenommen fur: PARA04, Workshop on State-of-the-Art in Scientific Computing, Lyngby, Danemark, 2004.

Eingereichte Zeitschriftenbeitrage

- [HR] J. Hippold and G. Runger. Task Pool Teams: A Hybrid Programming Model for Implementing Irregular Algorithms on Cluster of SMPs, Eingereicht als Zeitschriftenbeitrag.

Interne Berichte und Arbeiten

- [Hip01] J. Hippold. *Dezentrale Taskpools auf Rechnern mit verteiltem Speicher*. Diplomarbeit, TU-Chemnitz, 2001.
- [HR02] J. Hippold and G. Runger. *Task Pool Teams for Implementing Irregular Algorithms on Clusters of SMPs*. SFB-Bericht 02-18, TU Chemnitz, SFB 393, 2002.
- [Sch04] M. Schwind. *Diplomarbeit, Voraussichtliche Fertigstellung: 2004*. TU-Chemnitz, 2004.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Die Betrachtung und Untersuchung verschiedener irregularer Algorithmen hinsichtlich ihrer effizienten Parallelisierung auf Rechnern mit verteiltem Speicher bzw. Clustern oder Clustern von SMPs hat zur Entwicklung der oben aufgefuhrten Programmierumgebungen, -komponenten und -bibliotheken gefuhrt, die jeweils charakteristische Merkmale in der Parallelisierung unterstutzen. Dabei konnten verschiedene Klassen von irregularen Anwendungen identifiziert werden, deren jeweiliger Grad an Irregularitat in die entsprechende Softwareentwicklungsstrategie eingeflossen ist, etwa in Form spezieller Kommunikationsprotokolle oder zusatzlicher Verwaltungsdatenstrukturen, wodurch fur jede Klasse die Moglichkeit zur Entwicklung effizienter paralleler Programme bereitgestellt wurde. Die tatsachlich resultierende Effizienz hangt zuletzt jedoch immer noch vom jeweiligen Anwendungsalgorithmus und dem verwendeten parallelen Hardwaretyp, ja sogar der speziellen parallelen Maschine, ab. Bei den Task Pool Teams etwa hat die Cachestruktur Einfluss auf die zu verwendende Taskqueue-Variante oder bei

adaptiven Verfahren ist die Netzgeschwindigkeit fur Lastbalancierung einzubeziehen. Ebenso hat die Netzwerk- und Prozessorgeschwindigkeit Auswirkungen fur die effiziente M-Task-Programmierung und die Ausnutzung von M-Tasks. Dies gilt auch fur die dargestellte Einbindung von Orthogonalisierungsalgorithmen in komplexe Gesamtalgorithmen. Ausfurhrliche Tests haben diese und weitere Phanomene gezeigt und zum Tuning der jeweiligen Anwendung mit der passenden Programmierumgebung bzw. -bibliothek gefurhrt. Eine weiterfuhrende Fragestellung ist nun, wie diese jeweils separat durchgefuhrten Tuningschritte in Softwareentwicklungsumgebungen, -werkzeuge und -komponenten aufgenommen werden konnen.

Software, die charakteristische Merkmale einer parallelen Plattform zunachst ermittelt und dann fur eine effiziente Abarbeitung nutzt, wird auch selbstadaptierend genannt und wurde bisher eher fur regelmaige Probleme eingesetzt, etwa zur Cacheausnutzung. Selbstadaptierende Software fur irregulare Probleme bzw. fur auszuwahlende Teilklassen stellt hier eine Herausforderung dar. Adaptives Verhalten der Software sollte Speicherhierarchien und Parallelitat berucksichtigen und ist mit dem hierarchischen und adaptiven Verhalten des eigentlichen Algorithmus abzustimmen. Besondere Wichtigkeit kommt adaptiver Software auf heterogen parallelen Plattformen zu.

Projektbereich

C

Simulation und Anwendungen in der Physik

Teilprojekt

C1

Lokalisierung elektronischer Zustände in amorphen
Materialien

2.1 Teilprojekt C1

Lokalisierung elektronischer Zustände in amorphen Materialien

2.1.1 Antragsteller

| | |
|---|---|
| Prof. Dr. Michael Schreiber 22.04.1954 Professur Theoretische Physik III (Theorie ungeordneter Systeme) Technische Universität Chemnitz 09107 Chemnitz Tel.: (0371) 531-3142 Fax: (0371) 531-3143 schreiber@physik.tu-chemnitz.de | PD Dr. Rudolf A. Römer 22.02.1966 Professur Theoretische Physik III (Theorie ungeordneter Systeme) Technische Universität Chemnitz 09107 Chemnitz Tel.: (0371) 531-3146 Fax: (0371) 531-3151 r.roemer@physik.tu-chemnitz.de |
|---|---|

Dr. Römer ist Ende September 2002 ausgeschieden, da er eine unbefristete Stelle als Lecturer an der Universität Warwick angenommen hat.

Prof. Schreiber war von Februar 2002 bis Januar 2003 beurlaubt, um eine Professur an der International University Bremen wahrzunehmen.

2.1.2 Projektbearbeiter

Philipp Cain
Dr. Viktor Cerovski
Alexander Croy
Rajkumar Brojen Singh
Sambasiva Rao Chinnamsetty
Dr. Inna Plyuchshay
Dr. Ahmed Jellal
M.Sc. Macleans Ndawana
Dr. Hassan Satori

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Gegenstand dieses Teilprojektes ist die computergestützte Untersuchung des durch Unordnung induzierten Metall-Isolator-Übergangs in ungeordneten und amorphen Materialien. Das Auftreten des Phasenübergangs und das kritische Verhalten in seiner Nähe wird durch höchst präzise numerische Methoden analysiert und charakterisiert. Es wurden die folgenden physikalischen Fragestellungen untersucht: Ändert sich das universelle Verhalten für ungeordnete Systeme, wenn man das zu Grunde liegende Anderson-Modell der Lokalisierung verändert? Haben Änderungen der Topologie des zu Grunde liegenden Gitters einen Einfluss? Gibt es Abweichungen von den universellen Vorhersagen der Theorie der Zufallsmatrizen, wenn man sich dem Phasenübergang nähert? Wie wirkt sich Vielteilchenwechselwirkung zwischen den elektronischen Zuständen auf die

Lokalisierungseigenschaften in ungeordneten Systemen aus? Wie lassen sich thermische und andere Transportgrößen im Anderson-Modell numerisch berechnen? Lässt sich der Lokalisierungs-Delokalisierungs-Übergang beim ganzzahligen Quanten-Hall-Effekt mit den von uns beim Anderson-Übergang benutzten Methoden beschreiben?

Die numerische Charakterisierung der elektronischen Zustände geschieht durch Bestimmung der Lokalisierungslängen und des kritischen Exponenten durch die Transfer-Matrix-Methode mit anschließendem "finite-size-scaling", durch Untersuchungen des multifraktalen und statistischen Verhaltens der Wellenfunktionsamplituden sowie durch Analyse der Energieniveaustatistiken, wofür die Eigenwerte und Eigenzustände mit dem Lanczos-Algorithmus bestimmt werden. Der Einfluss der Wechselwirkung wird ebenfalls mit exakten Diagonalisierungsverfahren, aber auch mit einer speziellen Dezimationsmethode und mit Renormierungsgruppen-Methoden behandelt. Der Renormierungsgruppenansatz wird auch bei der Beschreibung des Quanten-Hall-Effektes benutzt. Die direkte Berechnung der thermischen Transportgrößen geschieht mit Hilfe der linearen Antwort-Theorie.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

2.3.1 Teilaufgabe "Test und Entwicklung von Algorithmen"

Wie wir bereits in der vergangenen Förderperiode gezeigt hatten, lässt sich der Hamilton-Operator des Anderson-Modells der Lokalisierung sehr effektiv durch den Lanczos-Algorithmus in der Cullum-Willoughby-Implementation diagonalisieren. Obwohl verschiedene andere Algorithmen getestet wurden, hat sich der Lanczos-Algorithmus bisher als die beste zur Verfügung stehende Methode bewährt. Für wechselwirkende Elektronen mussten aufwändigere Algorithmen entwickelt werden.

2.3.2 Teilaufgabe "Anisotrope Systeme und Schichtsysteme"

Im Anderson-Modell wird den Transferintegralen, die das Hüpfen der Elektronen zwischen benachbarten Gitterplätzen beschreiben, üblicherweise ein konstanter Wert zugewiesen. Die Abweichung vom kristallinen, perfekt geordneten System wird dann durch die zufällige Wahl der potentiellen Energien an den Gitterplätzen modelliert. Im Rahmen dieser Teilaufgabe haben wir die Frage untersucht, inwieweit sich die Lokalisierungseigenschaften ändern, wenn wir andere physikalisch mindestens genauso relevante Arten von Unordnung oder Störungen der Transferintegrale im System berücksichtigen. Dabei wurden zunächst anisotrope periodische Systeme untersucht, bei denen die Transferintegrale in einer oder in zwei Richtungen wesentlich kleiner als in den verbleibenden Richtungen gewählt werden. Dadurch werden schwach gekoppelte Ebenen bzw. schwach gekoppelte Ketten simuliert. Dies ist von experimenteller Relevanz, da eine Reihe von Messungen zum kritischen Verhalten uniaxiale Druckveränderung nutzten, was anisotropen Änderungen der Transferintegrale entspricht. Interessant ist hierbei unter anderem die Frage, ob durch genügend schwache Kopplung zwischen den Ebenen ein quasi-zweidimensionales Verhalten erreicht werden kann. Dies ist von besonderer Relevanz, um den Phasenübergang zu beschreiben, der experimentell in zweidimensionalen Systemen gefunden wurde. In diesem Zusammenhang stellt sich natürlich auch die Frage,

ob ein derartiger Phasenübergang im Anderson-Modell beobachtet werden kann, wenn man Schichtstrukturen endlicher Dicke simuliert.

2.3.3 Teilaufgabe “Nichtdiagonale Unordnung”

Das Anderson-Modell mit zufällig gewählten Transferintegralen modelliert sehr gut die unterschiedlichen Hüpfraten auf Grund variabler Atomabstände in amorphen Substanzen. Im entsprechenden zweidimensionalen Modell ohne Potentialunordnung ist die Lokalisierungslänge der elektronischen Zustände im thermodynamischen Limes wesentlich größer als im Fall reiner Potentialunordnung. In der Mitte des Bandes divergiert die Lokalisierungslänge sogar, es ergibt sich ein kritischer Zustand, der jedoch bereits durch kleine zusätzliche Potentialunordnung lokalisiert wird.

2.3.4 Teilaufgabe “Topologische Unordnung”

Quasiperiodische Systeme stehen gewissermaßen zwischen geordneten Kristallen und ungeordneten Strukturen, da sie deterministisch aufgebaut sind, aber keine Translationsinvarianz zeigen. Diese topologische Unordnung hat Einfluss auf die Lokalisierungseigenschaften der elektronischen Zustände, beispielsweise treten an den Bandkanten vergleichsweise ausgedehnte Zustände auf, während in der Bandmitte extrem lokalisierte Zustände gefunden werden. Die Energieniveaustatistik von zweidimensionalen quasiperiodischen Systemen zeigt bereits kritisches Verhalten, ohne dass Potentialunordnung eingeführt werden muss.

2.3.5 Teilaufgabe “Wechselwirkende Systeme”

Der in zweidimensionalen Elektronensystemen mit hoher Ladungsträgerbeweglichkeit experimentell gefundene Metall-Isolator-Übergang wird vermutlich durch die Coulomb-Wechselwirkung induziert, denn eine einfache Abschätzung der relevanten Energieskalen ergibt bereits, dass die charakteristische Coulomb-Energie wesentlich größer als die Fermi-Energie ist. Die Frage, ob die Coulomb-Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen zu einer Vergrößerung der Lokalisierungslänge führt und damit möglicherweise in zweidimensionalen Systemen ein Metall-Isolator-Übergang auftritt, ist in der Vergangenheit kontrovers diskutiert worden. Interessant sind in diesem Zusammenhang auch einige quasiperiodische Systeme, bei denen ein Metall-Isolator-Übergang bereits für nichtwechselwirkende Elektronen auf eindimensionalen Strukturen auftritt.

Für sehr große Systeme, insbesondere im thermodynamischen Grenzfall, erscheint jedoch die Untersuchung von zwei wechselwirkenden Teilchen uninteressant, vielmehr stellt sich die Frage, wie sich eine große Zahl wechselwirkender Teilchen verhält. Da die Anzahl der Vielteilchenzustände in derartigen Systemen allerdings mit der Zahl der betrachteten Teilchen stark anwächst, ist die Größe der Systeme, die numerisch behandelt werden können, stark eingeschränkt.

2.3.6 Teilaufgabe “Transporteigenschaften”

Die Thermokraft ist ein Beispiel einer Transportgröße, deren Verhalten am Anderson-Übergang noch nicht gut verstanden ist, obwohl zahlreiche experimentelle Resultate

vorliegen. Die Temperaturabhängigkeit der Thermokraft kann ebenso wie die Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit im Rahmen der linearen Antwort-Theorie beschrieben werden.

Für eindimensionale Strukturen kann man Transporteigenschaften leicht mit Hilfe der Transmissionswahrscheinlichkeit iterativ bestimmen. Dies haben wir für den Magnetotransport eines mesoskopischen Systems von in einer Kette angeordneten Ringstrukturen benutzt.

2.3.7 Teilaufgabe “Quanten-Hall-Effekt”

Der unordnungsgetriebene Lokalisierungs-Delokalisierungs-Übergang beim quantisierten ganzzahligen Hall-Effekt kann durch das Netzwerkmodell von Chalker und Coddington simuliert werden. Mit Hilfe eines Renormierungsgruppenansatzes berechnen wir die Statistik von Transmissionsamplituden. Die Motivation der Untersuchung basiert auf experimentellen Arbeiten, in denen Abweichungen vom erwarteten Skalenverhalten gefunden wurden. Insbesondere stellt sich die Frage, ob derartige Abweichungen durch makroskopische Inhomogenitäten innerhalb der Probe hervorgerufen werden.

2.3.8 Teilaufgabe “Statistik der Wellenfunktionen von seltenen Zuständen”

Die Verteilung der Wellenfunktionsamplituden im metallischen Bereich des Anderson-Modells ist näherungsweise durch die Porter-Thomas-Verteilung gegeben. Sie folgt aus der Annahme, dass die Quantenlokalisierung, die mit wachsender Unordnung schließlich zum Phasenübergang führt, vernachlässigbar ist. Für endliche Werte des Unordnungsparameters gibt es natürlich Abweichungen von der Porter-Thomas-Verteilung auch im metallischen Bereich. Außerdem treten so genannte anormale Zustände auf, die Lokalisierung zeigen und sich stark von den typischen ausgedehnten Wellenfunktionen unterscheiden. Sie verursachen große relative Abweichungen in den Ausläufern der Verteilungsfunktionen. Das Ziel unserer entsprechenden Untersuchungen ist es, durch Vergleich der numerischen Daten mit analytischen Vorhersagen die mikroskopische Elektronenbewegung in ungeordneten Metallen besser zu verstehen. Die analytischen Vorhersagen beruhen auf dem nicht-linearen Sigma-Modell, das den Elektronentransport semiklassisch beschreibt, wobei sich die Elektronen lokal diffusiv bewegen, aber der Quantenlokalisierung unterliegen.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe “Test und Entwicklung von Algorithmen”

Wir führten noch einige abschließende Arbeiten zur Parallelisierung durch [CMRS01, CMRS02, cmrs01, s02c, skc⁺02]. Untersuchungen von Mehrgitterverfahren zeigten erneut, dass eine derartige iterative Herangehensweise mit den derzeit vorhandenen Glättungsverfahren keinen effizienten Ersatz für den Lanczos-Algorithmus ermöglicht. Zur Beschreibung von Vielteilchensystemen mit Wechselwirkung ist ein Diagonalisierungsverfahren entwickelt worden [SV03], das nur eine Teilmenge der energetisch günstigsten

Zustände berücksichtigt, aber die Wechselwirkung zwischen diesen Zuständen dann exakt enthält.

Eine neuartige Transfer-Matrix-Methode, bei der die Konvergenz durch vielfaches Betrachten desselben ungeordneten quasieindimensionalen Systems erreicht wird, haben wir entwickelt, um langreichweitig korrelierte Unordnungspotentiale im Anderson-Modell verwenden zu können [NRS04, nrs03a]. Auf diese Weise ist es möglich geworden, die Abhängigkeit des kritischen Exponenten von der Potenz, mit der die Korrelationsstärke des Potentials abfällt, zu bestimmen. Es zeigt sich, dass für feste Unordnung ein kritischer Wert dieser Potenz existiert, oberhalb dessen der kritische Exponent dem des Modells mit unkorrelierter Unordnung entspricht, was mit dem erweiterten Harris-Kriterium übereinstimmt [nrs03b, nrs04a].

Die üblicherweise verwendete Transfer-Matrix-Methode haben wir andererseits erweitert auf ein dreidimensionales Anderson-Modell mit zwei Bändern, wobei ein binäres Unordnungspotential benutzt wurde, um mit experimentellen Ergebnissen für amorphe metallische Legierungen vergleichen zu können [PRS03].

Einen Überblick auch über die methodischen Aspekte geben die Übersichtsartikel [RS03, SM02].

2.4.2 Teilaufgabe “Anisotrope Systeme und Schichtsysteme”

Bei den Untersuchungen des Metall-Isolator-Übergangs im Anderson-Modell der Lokalisierung mit anisotropen Transferintegralen wurde in allen Fällen die Gültigkeit der Einparameterskalenhypothese bestätigt. Die Abhängigkeit der Mobilitätskante von der Anisotropie wurde bestimmt [MRS01, smr01, sr02, s02b]. Dabei wurden neben der Niveau-Abstandsverteilung auch die Varianz, die die globale spektrale Steifheit misst, und deren Ableitung zur Beschreibung des Phasenübergangs und zur Bestimmung der kritischen Exponenten eingesetzt [NRS02, NRS03, nrs01, nrs02].

Schichtstrukturen unterschiedlicher Dicke wurden mit Hilfe der Transfer-Matrix-Methode untersucht [SK01, SK02, SK04]. Dabei wurde bereits für relativ dünne Schichten ein Metall-Isolator-Übergang gefunden.

2.4.3 Teilaufgabe “Nichtdiagonale Unordnung”

Für das Anderson-Modell mit zufällig gewählten Transferintegralen wurden die Zustandsdichte und die multifraktalen Eigenschaften der Eigenzustände auf zweidimensionalen Quadratgittern berechnet [ers02a]. Dabei wurde auch der Spezialfall eines bipartiten Systems analysiert, der in die so genannte chirale Universalitätsklasse fällt [ERS01a]. Durch Skalierung der Zustandsdichte in der Bandmitte wurde die Bestimmung des kritischen Exponenten in einem Modell mit zufälligem magnetischem Fluss vorgenommen [Cer01], was die bisher einzige quantitative Abschätzung der Divergenz der Lokalisierungslänge in der Bandmitte für dieses Modell ist. Eine Skalierung der Lokalisierungslängen führte dabei nicht zu einer genaueren Bestimmung des Wertes des Exponenten, da die Lokalisierungslängen sehr groß werden. Trotzdem konnte das Phasendiagramm des Modells in zwei Dimensionen bestimmt werden [Cer01].

2.4.4 Teilaufgabe “Topologische Unordnung”

Die Energiespektren und Eigenzustände von quasiperiodischen Systemen wurden mit Hilfe der Multifraktalanalyse und der Energieniveaustatistik beschrieben [s01c], wodurch sich die universellen Eigenschaften der Spektren nachweisen ließen [GS03, gs03]. In dreidimensionalen Systemen deuten erste Rechnungen zur Propagation von Wellenpaketen [CGS04, cgs03, cgs04, s01b] möglicherweise auf eine Mobilitätskante hin.

2.4.5 Teilaufgabe “Wechselwirkende Systeme”

Für das Problem von zwei wechselwirkenden Teilchen in einem Zufallspotential auf einer linearen Kette haben wir die Dezimationsmethode benutzt. Wir konnten zeigen, dass eine wechselwirkungsinduzierte Vergrößerung der Lokalisierungslängen auftritt, dass die Stärke der Delokalisierung jedoch weniger dramatisch ist als in analytischen Abschätzungen vermutet [s02a]. Die numerisch sehr anspruchsvolle Erweiterung dieser Arbeiten auf zweidimensionale Systeme zeigte eine vollständige Delokalisierung der Zweiteilchen-Lokalisierungslängen für bestimmte Zustände [RSV01, rsv01].

Auch in quasiperiodischen Systemen, die einen Metall-Isolator-Übergang schon in einer Dimension aufweisen, wie die Aubry-Andre-Kette, haben wir die Lokalisierungseigenschaften mit Hilfe der Dezimationsmethode untersucht [ERS01b, ERS02, ers02b, ers03, srs02]. Eine Änderung des kritischen Verhaltens wurde dabei nicht beobachtet. Dies gilt auch für entsprechende Untersuchungen mit Hilfe eines Dichtematrix-Renormierungsgruppen-Ansatzes, mit dem es möglich ist, eine endliche Dichte von wechselwirkenden Teilchen zu beschreiben [SRS02, SRS03, erss01].

Ein anderer Zugang zur Beschreibung der Lokalisierung von wechselwirkenden Vielteilchensystemen, der in der vergangenen Förderperiode im Rahmen des nicht weitergeführten Teilprojektes C2 entwickelt worden war, beruht auf der exakten Berechnung der niederenergetischen Vielteilchenzustände [EKS⁺01, VS01, svm01]. Die bisherigen Untersuchungen zum Quanten-Coulomb-Glas [mrs01], bei dem die Wechselwirkung sehr vieler Elektronen untereinander mit Unordnung konkurriert, wurden auf Systeme mit Berücksichtigung des Spins ausgedehnt [VS01]. Dabei wurden auch die Transporteigenschaften bestimmt [EKS⁺01]. Es hat sich gezeigt, dass im stark lokalisierten Bereich die Wechselwirkungen zur Erhöhung der Leitfähigkeit führen, wogegen sie für schwache Unordnung die Leitfähigkeit verringern. Diese Methode wurde nun auch für die Beschreibung von mehreren wechselwirkenden Elektronen in Quantenpunkten eingesetzt [SSV01a, SSV01b, SSV01c, s01a, ssv01, sv01].

2.4.6 Teilaufgabe “Transporteigenschaften”

Mit Hilfe der Greensfunktionsmethode konnten wir die thermoelektrischen Transporteigenschaften von amorphen Systemen in der Nähe des Metall-Isolator-Übergangs untersuchen und deren kritisches Verhalten beschreiben [VRSM01, crms04, vrsm01a]. Alle kinetischen Koeffizienten der linearen Antwort-Theorie lassen sich durch eine rekursive Formulierung der Methode berechnen [VRSM01, rsvm01, vrsm01b, vrsm02].

Ein anderer Zugang wurde benutzt, um Magnetotransport auf mesoskopischen Strukturen zu beschreiben, wobei der Transmissionskoeffizient berechnet wurde [CRS03, crs02, crs03].

2.4.7 Teilaufgabe “Quanten-Hall-Effekt”

Der Phasenübergang beim ganzzahligen quantisierten Hall-Effekt wurde für ein langreichweitig korreliertes Unordnungspotential beschrieben [CRSR01, crrs01, crs01]. Zur Charakterisierung des Übergangs wurde auch die Energieniveaustatistik benutzt [crs02, crrs03a, crsr02]. Dabei wurde wieder ein Renormierungsgruppenansatz verwendet [crsr03, crs04, crrs03b].

2.4.8 Teilaufgabe “Statistik der Wellenfunktionen von seltenen Zuständen”

Wir haben die Verteilung von Wellenfunktionsamplituden im Anderson-Modell untersucht [UMS01]. Dabei wurden auch Korrekturen zu den aus der Zufallsmatrizentheorie gewonnenen Resultaten berücksichtigt. Insbesondere wurde der Gültigkeitsbereich von störungstheoretischen Korrekturen analysiert [URS02]. In ihren Ausläufern kann die Verteilung der Intensitäten der Eigenzustände in quasieindimensionalen Systemen gut durch die Zufallsmatrizentheorie mit den erwähnten Korrekturen wiedergegeben werden, in zweidimensionalen Systemen stimmt die Verteilung mit Ergebnissen der Methode optimaler Fluktuationen überein [ums01]. Für dreidimensionale Systeme zeigen numerische Untersuchungen ebenfalls die Gültigkeit der Methode optimaler Fluktuationen [NC02], obwohl nur kleine Systemgrößen im metallischen Bereich untersucht wurden.

Die räumliche Struktur der anormalen lokalisierten Zustände großer dreidimensionaler Systeme wurde ebenfalls numerisch bestimmt [UMS02, umrs01, rusm01], dabei wurden insbesondere die Intensitäten außerhalb des anormalen Bereiches untersucht und mit analytischen Resultaten verglichen. Es zeigt sich, dass der Einfluss von ballistischen Effekten auf die statistischen Eigenschaften der Wellenfunktionen in quasieindimensionalen Systemen wichtig sein kann [UMS01].

Literaturverzeichnis

- [Cer01] V. Z. Cerovski. Critical exponent of the random flux model on an infinite two-dimensional square lattice and anomalous critical states. *Phys. Rev. B*, 64:161101(R)/1–4, 2001.
- [CGS04] V. Z. Cerovski, U. Grimm, and M. Schreiber. Spectral and diffusive properties of silver-mean quasicrystals in 1, 2, and 3 dimensions. *Phys. Rev. B*, 2004. (submitted for publication).
- [CMRS01] P. Cain, F. Milde, R. A. Römer, and M. Schreiber. Applications of cluster computing for the Anderson model of localization. in *Recent Research Developments in Physics*, ed. S. G. Pandalai. (*Transworld Research Network, Trivandrum, Indien*), 2:171–184, 2001.
- [CMRS02] P. Cain, F. Milde, R. A. Römer, and M. Schreiber. Use of cluster computing for the Anderson model of localization. *Comp. Phys. Comm.*, 147:246–250, 2002.
- [CRS03] A. Chakrabarti, R. A. Römer, and M. Schreiber. Magnetotransport on periodic and quasiperiodic arrays of mesoscopic rings. *Phys. Rev. B*, 68:195417/1–9, 2003.

- [CRSR01] P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, and M. E. Raikh. Integer quantum Hall transition in the presence of a long-range-correlated quenched disorder. *Phys. Rev. B*, 64:235326/1–9, 2001.
- [EKS⁺01] F. Epperlein, S. Kilina, M. Schreiber, S. Uldanov, and T. Vojta. Fock space localization, return probability, and conductance of disordered interacting electrons. *Physica B*, 296:52–55, 2001.
- [ERS01a] A. Eilmes, R. A. Römer, and M. Schreiber. Exponents of the localization lengths in the bipartite Anderson model with off-diagonal disorder. *Physica B*, 296:46–51, 2001. *Physica B* 324:429, 2002 (Erratum).
- [ERS01b] A. Eilmes, R. A. Römer, and M. Schreiber. Localization properties of two interacting particles in a quasi-periodic potential with a metal-insulator transition. *Eur. Phys. J. B*, 23:229–234, 2001.
- [ERS02] A. Eilmes, R. A. Römer, and M. Schreiber. Localization properties of two interacting particles in a quasi-periodic potential with a metal-insulator transition, in *Proc. 26th Int. Conf. Physics of Semiconductors (ICPS 26), Edinburgh 2002*, ed. A. R. Long and J. H. Davies. *Inst. Phys. Conf. Ser. (Inst. of Physics, Bristol)*, 171:P9/1–8, 2002.
- [GS03] U. Grimm and M. Schreiber. Energy spectra and eigenstates of quasiperiodic tight-binding Hamiltonians, in *Quasicrystals–Structure and Physical Properties*, ed. H.-R. Trebin. (Wiley-VCH, Berlin, 2003) pages 210–235.
- [MRS01] F. Milde, R. A. Römer, and M. Schreiber. Metal-insulator transition in anisotropic systems, in *Proc. 25th Int. Conf. Physics of Semiconductors (ICPS 25), Osaka 2000*, ed. N. Miura and T. Ando. *Proceedings in Physics* (Springer, Berlin, Heidelberg), 87:148–149, 2001.
- [NC02] B. K. Nikolić and V. Z. Cerovski. Structure of quantum disordered wave functions: weak localization, far tails, and mesoscopic transport. *Eur. Phys. J. B*, 30:227–238, 2002.
- [NRS02] M. L. Ndawana, R. A. Römer, and M. Schreiber. Finite-size scaling of the level compressibility at the Anderson transition. *Eur. Phys. J. B*, 27:399–407, 2002.
- [NRS03] M. Ndawana, R. A. Römer, and M. Schreiber. Scaling of the level compressibility at the Anderson metal-insulator transition. *J. Phys. Soc. Japan*, 72:A131–A132, 2003.
- [NRS04] M. L. Ndawana, R. Römer, and M. Schreiber. Effects of scale-free disorder on the Anderson metal-insulator transition. *Europhys. Lett.*, 2004. (submitted for publication).
- [PRS03] I. V. Plyushchay, R. A. Römer, and M. Schreiber. The three-dimensional Anderson model of localization with binary random potential. *Phys. Rev. B*, 68:064201/1–9, 2003.
- [RS03] R. A. Römer and M. Schreiber. Numerical investigations of scaling at the Anderson transition, in *Anderson Localization and Its Ramifications–Disorder, Phase Coherence, and Electron Correlations*, ed. T. Brandes and S. Kettmann. *Lecture Notes in Physics* (Springer, Berlin, Heidelberg), 630:3–19, 2003.

- [RSV01] R. A. Römer, M. Schreiber, and T. Vojta. Disorder and two-particle interaction in low-dimensional quantum systems. *Physica E*, 9:397–404, 2001.
- [SK01] R. K. Brojen Singh and D. Kumar. Localization in thin films: Cross-over from two dimensions to three dimensions. *Int. J. Mod. Phys. B*, 19:2627–2639, 2001.
- [SK02] R. K. Brojen Singh and D. Kumar. Self-consistent study of localization in thin films. *Phys. Rev. B*, 66:075123/1–5, 2002.
- [SK04] R. K. Brojen Singh and D. Kumar. Self-consistent study of localization in thin films. *Phys. Rev. B*, 69:115420/1–12, 2004.
- [SM02] M. Schreiber and F. Milde. Characterization of the metal-insulator transition in the Anderson model of localization, in *Computational Statistical Physics—From Billiards to Monte Carlo*, ed. K. H. Hoffmann and M. Schreiber. (Springer, Berlin, Heidelberg, 2002) pages 259–278.
- [SRS02] C. Schuster, R. A. Römer, and M. Schreiber. Interacting particles at a metal-insulator transition. *Phys. Rev. B*, 65:115114/1–7, 2002.
- [SRS03] C. Schuster, R. A. Römer, and M. Schreiber. Commensurate and incommensurate transitions for interacting particles. *J. Phys. Soc. Japan*, 72:A129–A130, 2003.
- [SSV01a] M. Schreiber, J. Siewert, and T. Vojta. Interacting electrons in parabolic quantum dots: energy levels, addition energies, and charge distributions. *Int. J. Mod. Phys. B*, 15:3641–3645, 2001.
- [SSV01b] M. Schreiber, J. Siewert, and T. Vojta. Interacting electrons in parabolic quantum dots: Energy levels, addition energies, and charge distributions, in *Excitonic Processes in Condensed Matter*, ed. K. Cho and A. Matsui. (World Scientific, Singapore, 2001) pages 73–77.
- [SSV01c] J. Siewert, M. Schreiber, and T. Vojta. Interacting electrons in parabolic quantum dots, in *Proc. 25th Int. Conf. Physics of Semiconductors (ICPS 25), Osaka 2000*, ed. N. Miura and T. Ando. *Proceedings in Physics* (Springer, Berlin, Heidelberg), 87:1061–1062, 2001.
- [SV03] M. Schreiber and T. Vojta. The Hartree-Fock based diagonalization—an efficient algorithm for the treatment of interacting electrons in disordered solids. *Mathematics and Computers in Simulation*, 62:243–254, 2003.
- [UMS01] V. Uski, B. Mehlig, and M. Schreiber. Signature of ballistic effects in disordered conductors. *Phys. Rev. B*, 63:241101(R)/1–4, 2001.
- [UMS02] V. Uski, B. Mehlig, and M. Schreiber. Spatial structure of anomalously localized states in disordered conductors. *Phys. Rev. B*, 66:233104/1–4, 2002.
- [URS02] V. Uski, R. A. Römer, and M. Schreiber. Numerical study of eigenvector statistics for random banded matrices. *Phys. Rev. E*, 65:056204/1–4, 2002.
- [VRSM01] C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, and A. MacKinnon. Critical behavior of the thermoelectric transport properties in amorphous systems near the metal-insulator transition, in *Proc. 25th Int. Conf. Physics of Semiconductors (ICPS 25), Osaka 2000*, ed. N. Miura and T. Ando. *Proceedings in Physics* (Springer, Berlin, Heidelberg), 87:166–167, 2001.

- [VS01] T. Vojta and M. Schreiber. Localization and conductance in the quantum Coulomb glass. *Phil. Mag. B*, 81:1117–1129, 2001.

Konferenzbeiträge:

- [cgs03] V. Z. Cerovski, U. Grimm, and M. Schreiber. Anomalous diffusion of the octonacci quasicrystals in $d = 1, 2$, and 3. Workshop “Elementary Excitations in Quasicrystals” Chemnitz, 10/03.
- [cgs04] V. Z. Cerovski, U. Grimm, and M. Schreiber. Spectral properties and anomalous diffusion in octonacci quasicrystals. Spring Meeting German Physical Society, Regensburg, 03/04.
- [cmrs01] P. Cain, F. Milde, R. A. Römer, and M. Schreiber. Applications of cluster computing for the Anderson model of localization. Conf. Computational Physics (CCP) 2001, Aachen, 09/01.
- [crms04] A. Croy, R. A. Römer, A. MacKinnon, and M. Schreiber. Thermoelectric properties of disordered systems. Spring Meeting German Physical Society, Regensburg, 03/04.
dito: CMMP04, Cond. Matter and Materials Physics Conf., Warwick, 04/04.
- [crrs01] P. Cain, M. E. Raikh, R. A. Römer, and M. Schreiber. Localization-delocalization quantum Hall transition in the presence of a quenched disorder. 21st IUPAP Int. Conf. Statistical Physics (STATPHYS21), Cancun, Mexico, 07/01.
- [crrs02] P. Cain, M. E. Raikh, R. A. Römer, and M. Schreiber. Energy level spacing distribution at the quantum Hall transition. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Regensburg, 03/02.
dito: 26th Int. Conf. Physics of Semiconductors, Edinburgh, UK, 08/02.
dito: 23rd Int. Conf. on Low Temperature Physics, Hiroshima, Japan, 08/02.
dito: APS March Meeting, Indianapolis, USA, 03/02.
- [crrs03a] *dito*: SPP-Kolloquium Quanten-Hall-Systeme, Bad Honnef, 01/03.
- [crrs03b] P. Cain, M. E. Raikh, R. A. Römer, and M. Schreiber. Renormalization group approach to energy level statistics at the integer quantum Hall transition. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Dresden, 03/03.
- [crs01] P. Cain, R. A. Römer, and M. Schreiber. Localization-delocalization quantum Hall transition in the presence of a quenched disorder. Int. Symp. Quantum-Hall-Effect and Heterostructures (266. WEH-Seminar), Würzburg, 12/01.
- [crs02] A. Chakrabarti, R. A. Römer, and M. Schreiber. Magneto-transport in periodic and quasiperiodic arrays of mesoscopic rings. APS March Meeting, Indianapolis, USA, 03/02.
- [crs03] *dito*: DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Dresden, 03/03.
dito: CMMP03, Cond. Matter and Materials Physics Conf., Belfast, 04/03.
dito: Workshop Off-shell Effects in Quantum Transport, MPI PKS Dresden, 05/03.
- [crs04] P. Cain, R. A. Römer, and M. Schreiber. Renormalizing into the mesoscopic quantum Hall insulator. Spring Meeting German Physical Society, Regensburg, 03/04.

- [crsr02] P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, and M. E. Raik. Energy level spacing distribution at the quantum Hall transition. 12th Int. Winterschool New Developments in Solid State Physics, Mauterndorf, Österreich, 03/02.
dito: 19th EPS/CMD conference, Brighton, Grossbritannien, 04/02.
dito: Localisation 2002: Int. Conf. on Quantum Transport and Quantum Coherence, Tokyo, Japan, 08/02.
- [crsr03] P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, and M. E. Raikh. Renormalization group approach to energy level statistics at the integer quantum Hall transition. CMMP03, Cond. Matter and Materials Physics Conf., Belfast, 04/03.
dito: Workshop Off-shell Effects in Quantum Transport, MPI PKS Dresden, 05/03.
- [ers02a] A. Eilmes, R. A. Römer, and M. Schreiber. Exponents of the localization lengths in the Anderson model with off-diagonal disorder. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Regensburg, 03/02.
dito: APS March Meeting, Indianapolis, USA, 03/02.
dito: Localisation 2002: Int. Conf. on Quantum Transport and Quantum Coherence, Tokyo, Japan, 08/02.
- [ers02b] A. Eilmes, R. A. Römer, and M. Schreiber. Localization properties of two interacting particles in a quasi-periodic potential with a metal-insulator transition. 26th Int. Conf. Physics of Semiconductors, Edinburgh, UK, 08/02.
dito: DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Regensburg, 03/02.
- [ers03] *dito*: Workshop Off-shell Effects in Quantum Transport, MPI PKS Dresden, 05/03.
- [erss01] A. Eilmes, R. A. Römer, C. Schuster, and M. Schreiber. Two and more interacting particles at a metal-insulator transition. 21st IUPAP Int. Conf. Statistical Physics (STATPHYS21), Cancun, Mexico, 07/01.
- [gs03] U. Grimm and M. Schreiber. Energy spectra and eigenstates of quasiperiodic tight-binding Hamiltonians. Joint Colloquium GDR-CINQ and SPQK, Nancy, Frankreich, 05/03.
- [mrs01] A. Möbius, U. K. Rössler, and M. Schreiber. Phase transition in the lattice Coulomb glass without disorder. Conf. Hopping and Related Phenomena 2001, Tel Aviv, Israel, 09/01.
- [nrs01] M. Ndawana, R. A. Römer, and M. Schreiber. Finite size scaling of the level compressibility at the Anderson transition. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Hamburg, 01/01.
- [nrs02] *dito*: 12th Int. Winterschool New Developments in Solid State Physics, Mauterndorf, Österreich, 03/02.
dito: DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Regensburg, 03/02.
dito: APS March Meeting, Indianapolis, USA, 03/02.
dito: 19th EPS/CMD conference, Brighton, Grossbritannien, 04/02.
dito: 26th Int. Conf. Physics of Semiconductors, Edinburgh, UK, 08/02.
dito: Localisation 2002: Int. Conf. on Quantum Transport and Quantum Coherence, Tokyo, Japan, 08/02.
- [nrs03a] M. Ndawana, R. A. Römer, and M. Schreiber. The Anderson model of localization with scale-free disorder. CMMP03, Cond. Matter and Materials Physics Conf., Belfast, 04/03.
dito: DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Dresden, 03/03.

- [nrs03b] M. Ndawana, R. A. Römer, and M. Schreiber. The extended-Harris criterion and scale-free disorder in the 3d Anderson model of localization. IOP TCM group meeting, Warwick, 12/03
- [nrs04a] *dito*: Spring Meeting German Physical Society, Regensburg, 03/04.
dito: CMMP04, Cond. Matter and Materials Physics Conf., Warwick, 04/04.
- [rsv01] R. A. Römer, M. Schreiber, and T. Vojta. Disorder and two-particle interaction in low-dimensional quantum systems. 21st IUPAP Int. Conf. Statistical Physics (STATPHYS21), Cancun, Mexico, 07/01.
- [rsvm01] R. A. Römer, M. Schreiber, C. Villagonzalo, and A. MacKinnon. Thermoelectric transport properties in amorphous materials at the metal-insulator transition. 21st IUPAP Int. Conf. Statistical Physics (STATPHYS21), Cancun, Mexico, 07/01.
- [rusm01] R. A. Römer, V. Uski, M. Schreiber, and B. Mehlig. An exact-diagonalization study of rare events in disordered conductors. MAR01 March Meeting APS, Seattle, USA, 03/01.
- [s01a] M. Schreiber. Application of the Hartree-Fock based diagonalization algorithm to the quantum Coulomb glass and to quantum dots. Dynamics Days Europe 2001, Dresden, 06/01.
- [s01b] M. Schreiber. Computer simulations of dynamical processes. WE-Heraeus-Sommerschule Dynamics of Complex Systems: Classical and Quantum Aspects, Wittenberg, 08/01.
- [s01c] M. Schreiber. Lokalisierung elektronischer Zustände in quasiperiodischen Gittern. SPP-Kolloquium Quasikristalle: Struktur und physikalische Eigenschaften, Irsee, 03/01.
- [s02a] M. Schreiber. Correlated electrons. 3rd TMR Workshop Quantum transport in the frequency and time domains, Bad Kleinkirchheim, Österreich, 01/02.
- [s02b] M. Schreiber. Localization of electronic states in disordered systems. Alexander von Humboldt Seminar The Scientific Community in Russia and European Integration, Moskau, Russland, 09/02.
- [s02c] M. Schreiber. Numerical investigations of the metal-insulator transition in disordered materials. CLAMV Seminar, International University Bremen, 10/02.
- [skc⁺02] M. Schreiber, U. Kleinekathöfer, P. Cain, I. Kondov, and R. A. Römer. Simulation of electron transfer processes in disordered systems and in molecular aggregates on large PC clusters. 291. WE-Heraeus-Seminar Science on Cluster Computers, Bad Honnef, 08/02.
- [smr01] M. Schreiber, F. Milde, and R. A. Römer. Spatial statistics and multifractality of wave functions in disordered materials at the metal-insulator transition. 2nd Conf. Spatial Statistics and Statistical Physics, Wuppertal, 03/01.
- [sr02] M. Schreiber and R. A. Römer. Numerical investigations of the Anderson transition. 283. WE-Heraeus-Seminar Localisation, Quantum Coherence and Interaction, Hamburg, 09/02.

- [srs02] C. Schuster, R. A. Römer, and M. Schreiber. Interacting particles at a metal-insulator transition. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Regensburg, 03/02.
dito: Localisation 2002: Int. Conf. on Quantum Transport and Quantum Coherence, Tokyo, Japan, 08/02.
- [ssv01] M. Schreiber, J. Siewert, and T. Vojta. Interacting electrons in parabolic quantum dots. MAR01 March Meeting APS, Seattle, USA, 03/01.
- [svm01] M. Schreiber, T. Vojta, and A. Möbius. The Hartree-Fock based diagonalization—an efficient algorithm for the exact treatment of many interacting disordered electrons in solid state physics. 3rd IMACS Seminar Monte Carlo Methods MCM2001, Salzburg, Österreich, 09/01.
- [svs01] M. Schreiber, T. Vojta, and J. Siewert. Interacting electrons in parabolic quantum dots and quantum dot structures. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Hamburg, 03/01.
- [umrs01] V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, and M. Schreiber. Exact-diagonalization study of rare events in disordered conductors. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Hamburg, 03/01.
dito: 21st IUPAP Int. Conf. Statistical Physics (STATPHYS21), Cancun, Mexico, 07/01.
- [ums01] V. Uski, B. Mehlig, and M. Schreiber. Deviations from universality in spectral statistics of the Anderson model. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Hamburg, 03/01.
- [vrsm01a] C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, and A. MacKinnon. Behavior of the thermopower in amorphous materials at the metal-insulator transition. MAR01 March Meeting APS, Seattle, USA, 01/01.
- [vrsm01b] C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, and A. MacKinnon. Thermoelectric transport properties in amorphous materials at the metal-insulator transition. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Hamburg, 01/01.
- [vrsm02] C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, and A. MacKinnon. Calculating thermoelectric transport properties the microscopic way. APS March Meeting, Indianapolis, USA, 03/02.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Die bisherigen Untersuchungen sollen fortgesetzt und erweitert werden. In zweidimensionalen und quasizweidimensionalen Systemen soll das Wechselspiel zwischen der Topologie des Gitters, der Schichtdicke und der Anisotropie genauer analysiert werden, dabei sollen insbesondere auch Systeme mit einem Magnetfeld parallel zu den Schichten beschrieben werden. Die bisherigen Untersuchungen zu Schichten endlicher Dicke kommen wahrscheinlich zu falschen Ergebnissen, da die für das “finite-size-scaling” benutzten Rohdaten wahrscheinlich nicht konvergiert waren, bzw. viel zu kleine Systeme berechnet wurden. Andere topologische Strukturen, beispielsweise das Modell eines Netzwerkes für eine “kleine Welt”, in dem ein bestimmter Anteil der Transferintegrale zwischen den

nächsten Nachbarn durch langreichweitige Transferterme zu zufällig ausgewählten Gitterplätzen ersetzt wird, sollen in Zukunft ebenfalls betrachtet werden. Mit wachsender Zahl derartig langreichweitiger Verbindungen im Netzwerk ist eine wachsende Delokalisierung der Eigenzustände zu erwarten, so dass das System möglicherweise in einen Phasenübergang getrieben werden kann. Genauere numerische Untersuchungen für die verschiedenen Varianten des Anderson-Modells sind geplant für die Energieniveaustatistik an der Mobilitätskante und deren Abhängigkeit von der Verteilung der zufällig gewählten Matrixelemente.

Eine genauere Analyse der Umstände, die zum Auftreten der anormalen lokalisierten Zustände erforderlich sind, soll zu einer besseren quantitativen Beschreibung führen, so dass ein Vergleich mit verschiedenen analytischen Resultaten möglich wird. Für die Charakterisierung der Transporteigenschaften sollen die diffusiven Eigenschaften bei der Dynamik von Wellenpaketen berechnet werden, insbesondere die anormale Diffusion, die im kritischen Bereich des Delokalisierungsübergangs auftritt. In quasiperiodischen Systemen zeigt sich hier ein Übergang zwischen ballistischem und diffusivem Verhalten, der sicherlich durch die Zunahme von Potentialunordnung beeinflusst werden kann, wobei die Unordnung entweder durch Störstellen oder auch topologisch, also durch Phasen eingeführt werden kann.

In allen Fällen wird die Charakterisierung der elektronischen Zustände und die Beschreibung des kritischen Verhaltens am Phasenübergang wesentliches Ziel unserer zukünftigen Untersuchungen sein.

Teilprojekt

C3

Simulation und Modellierung der Relaxation komplexer
Systeme mittels Parallelrechnern

2.1 Teilprojekt C3

Simulation und Modellierung der Relaxation komplexer Systeme mittels Parallelrechnern

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Karl Heinz Hoffmann

29.7.1953

Professur für Theoretische Physik, insbesondere Computerphysik

Institut für Physik

Fakultät für Naturwissenschaften

Technische Universität Chemnitz

09107 Chemnitz

Telefon: (0371) 531-3212

Fax: (0371) 531-3233

e-mail: hoffmann@physik.tu-chemnitz.de

2.1.2 Projektbearbeiter

Prof. Dr. K. H. Hoffmann, Computerphysik

Dr. P. Blaudeck, Computerphysik

Dipl.-Phys. A. Fischer, Computerphysik

Dr. A. Franz, Computerphysik

Dipl.-Phys. F. Heilmann, Computerphysik

Dipl.-Phys. A. Nemnes, Computerphysik

Dr. S. Schubert, Computerphysik

Dr. C. Schulzky, Computerphysik

Dr. S. Seeger, Computerphysik

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Das Projekt befasst sich mit dem Relaxationsverhalten komplexer Systeme [Pal82, Hof99]. Diese sind durch einen Zustandsraum charakterisiert, der viele lokale Minima der Energiefunktion enthält, die ihrerseits durch energetische Barrieren unterschiedlicher Höhe getrennt sind. Zudem wird die Bewegung im Zustandsraum nicht nur durch diese energetischen Barrieren, sondern auch durch die Konnektivität der Zustände und damit durch die Mobilität zwischen verschiedenen Zustandsraumbereichen beschränkt.

Diese Einflüsse bestimmen das thermische Relaxationsverhalten der komplexen Systeme, welches als Hüpfen zwischen den Zuständen beschrieben werden kann. Die Zeitskalen, auf denen solche Prozesse ablaufen, sind sehr groß verglichen mit den typischen, für experimentelle Untersuchungen verwandten Zeiten. Dies führt zu einer Vielzahl interessanter experimenteller Befunde; insbesondere werden Nichtgleichgewichtsphänomene beobachtet. In Spin-Gläsern drücken sich diese besonders durch das so genannte Aging-Verhalten aus [LSNB83, GSN⁺88, SGN⁺87, HLO⁺92, VHO⁺97, JVH⁺98, MJN⁺02, JYN02].

Ziel dieses Teilprojektes ist es, u. a. diese Nichtgleichgewichtsphänomene auf der Basis komplexer Zustandsräume zu modellieren. Wegen der extrem hohen Anzahl von

Zuständen selbst relativ kleiner Systeme kann eine erfolgreiche Modellierung in der Regel nicht im vollständigen Zustandsraum erfolgen. Statt dessen hat es sich als fruchtbar erwiesen, diesen auf eine handhabbare Anzahl sogenannter Cluster zu vergrößern. Dies sind Zusammenfassungen sehr vieler energetisch dicht beieinander liegender benachbarter Zustände, die untereinander schnell ins Gleichgewicht kommen.

Bei der Modellierung von Aging-Phänomenen in sogenannten Temperature-Step-Experimenten [VHO91, GSN⁺88, LHOV94, HSS97] zeigte es sich, dass die Berücksichtigung von kinetischen Faktoren notwendig ist, die in vergrößerter Weise die Konnektivitäten im Zustandsraum wiedergeben. Um die durch die Konnektivitäten bedingten Relaxationseigenschaften besser modellieren zu können, haben wir unsere Forschungen zur Relaxation in selbstähnlichen, fraktalen Strukturen vertieft. Bei diesen ist die Relaxation nicht durch die Energielandschaft, sondern ausschließlich durch die Topologie des Zustandsraumes bestimmt.

Basierend auf einer schon früher entwickelten Beschreibung von Fraktalen, die eine effektiv randlose Simulation der Diffusion von Zufallswanderern möglich macht, implementierten wir nun eine parallelisierte Variante, die die Grundlage des Langzeitstudiums der Diffusion auf Fraktalen bildet. So konnten wir die anomalen Diffusioneigenschaften sehr genau charakterisieren.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

2.3.1 Teilaufgabe Zustandsraumstruktur und langsame Relaxation bei Spingläsern und anderen Systemen

Die Struktur des Zustandsraums komplexer Systeme bildet die Basis für die dynamische Beschreibung solcher Systeme. Dabei wird der Zustandsraum häufig durch ein Energiegebirge visualisiert [Hof02, HS02]. Diese Zustandsraumstruktur für ausgewählte, physikalisch relevante Modellsysteme wie Ising-Spins zu analysieren, war zentrales Ziel unserer Untersuchungen, da sie in Verbindung mit weiteren Einflüssen Ursache einer Reihe von thermodynamischen Nichtgleichgewichtsphänomenen ist.

Die in den vorhergehenden Bewilligungsperioden begonnenen Arbeiten zur Zustandsraumstruktur von Ising-Spingläsern wurden fortgesetzt. Dabei wurden insbesondere Spingläser mit gleichverteilten Wechselwirkungen benutzt. Ziel unserer Untersuchungen war die Charakterisierung durch Enumeration im niedrigerenergetischen Bereich und die Gewinnung von Zustandsdichten auch für höhere Energien sowie die Frage einer angemessenen Vergrößerung zur Beschreibung der Dynamik.

Wichtiges Teilziel war dabei, den Zugriff auf die globale Zustandsdichte komplexer Systeme zu verbessern. Unbekannt ist z. B. die genaue Energieabhängigkeit in Spingläsern mit verschiedenen Wechselwirkungen. Hierzu entwickelten wir einen parallelen Algorithmus, der die Übergangsmatrix eines Systems sukzessive approximiert. Unsere Implementation ist besonders gut für Rechner-Cluster geeignet.

Mittels eines rekursiven, speziell dem Problem angepassten Branch-and-Bound-Verfahrens, das in dieser Antragsperiode weiter optimiert wurde, katalogisierten wir die niedrigerenergetischen Teile des Zustandsraums und ermittelten so seine Struktur. Insbesondere bei unseren Forschungen zur Vergrößerung von Zustandsräumen konnten auf diese Weise realistischere Bilder der Konnektivitäten und Energieabhängigkeiten gezeichnet werden.

Bei der Vergrößerung von Zustandsräumen treten eine ganze Reihe von Problemen auf, da hierbei einerseits Effizienz (starke Reduktion der Freiheitsgrade), andererseits aber Wirkungsgleichheit (im dynamischen Verhalten) einander widersprechende Forderungen sind. Als Basis hierzu konnten wir mit Hilfe der neu gewonnenen Daten die Barrierenstruktur von Spingläsern charakterisieren und Aussagen zur Verteilung lokaler Minima treffen. Dies versetzte uns dann in die Lage, eine automatische Vergrößerung des Zustandsraums zu implementieren. Hierbei ergaben sich eine Reihe interessanter Erkenntnisse, die insbesondere zu verbesserten Modellen komplexer Zustandsräume führen werden.

Zur Ergänzung studierten wir auch den Zustandsraum kontinuierlicher Systeme. Bei der Analyse des Zustandsraumes solcher Systeme besteht die Grundidee darin, die Bereiche des Zustandsraumes zu definieren, die intern so schnell relaxieren, dass sie als ein diskreter Zustand in einem möglichst einfachen System solcher diskreter Zustände behandelt werden können. Dabei ist natürlich zu berücksichtigen, dass auch hier eine ganze Hierarchie von Relaxationszeiten auftritt.

Zunächst werden typischerweise die lokalen Minima der Energie im Zustandsraum aufgesucht. Die Einzugsbereiche (Energietäler) dieser Minima werden dann dadurch charakterisiert, dass Sattelpunkte der Energiefläche bestimmt werden, die den Pässen der Energielandschaft entsprechen [DWB90, HKQ91]. In einer vorhergehenden Arbeit hatten wir so die optimale Abkühlung eines Clustersystems untersucht, das durch Vergrößerung des Zustandsraums eines Argon-19-Clusters entstanden war [KBHB98].

Befindet sich das System in einem solchen Minimum, dann kann sein Verhalten in Abhängigkeit von der Temperatur weiter untersucht werden. Dadurch gelingt es erstens, die Höhen der Barrieren für den Übergang zu Nachbarzuständen zu „messen“. Die für diesen Übergang benötigte mittlere Zeit charakterisiert aber außerdem auch eine von kinetische Größen und Zusammenhangsverhältnissen abhängige Übergangswahrscheinlichkeit. Unter Benutzung dieser Daten kann nun die Dynamik des Systems modelliert werden. Ziel unserer Untersuchungen war es, unter Verwendung der schon entwickelten Programme diese Fragen für amorphe Halbleiter zu analysieren.

2.3.2 Teilaufgabe Relaxationsverhalten auf Fraktalen

Die Dynamik eines Systems wird nicht nur durch energetische Barrieren, sondern auch von der Zusammenhgangsstruktur des Zustandsraums selbst wesentlich beeinflusst. Infolgedessen setzten wir unsere Arbeiten zur Untersuchung von Relaxationsvorgängen auf Fraktalen fort. Diese dienen einerseits als Zustandsraummodell eines komplexen Systems, andererseits als Realraummodell z. B. poröser Materialien. Die besondere Art von Konnektivität zwischen den Zuständen verlangsamt i. Allg. die Bewegung von Zufallswanderern bzw. die Diffusion von Teilchen.

Im Mittelpunkt unserer Untersuchungen stand die Aufgabe, diese anomale Diffusion möglichst exakt zu charakterisieren. Technisch standen wir vor der Frage, wie sich die von uns implementierten, bisher nur seriellen Algorithmen effektiv parallelisieren lassen. Um die Dynamik der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung auf verschiedenen Sierpinski-Teppichen zu berechnen, müssen effektiv randlose Fraktale verwendet werden. Dies gelang uns durch einen Algorithmus, in dem nur die schon mit Wahrscheinlichkeit belegten Teile des Fraktals gespeichert werden. Um nun Langzeitstudien durchführen zu können, muss die Beschränkung durch Speicherausbau und CPU-Leistung umgangen werden.

Hierzu bietet sich die Benutzung von Compute-Clustern an. Auch bei der Verfolgung von Random Walkers treten ähnliche Probleme auf; wir erwarteten, diese auf eine analoge Weise lösen zu können.

Jedoch zeigte sich, dass die Parallelisierung unseres Algorithmus höchst komplex ist. Dies resultiert aus der Notwendigkeit, sehr eng miteinander verflochtene Daten – Generatoren und enthaltene Wahrscheinlichkeiten – zu synchronisieren, die aber auf eine Vielzahl von Compute-Nodes einer Distributed-Memory-Architektur verteilt sind. Dies gelingt im Moment nur durch einen großen Kommunikationsaufwand, der das Speedup-Verhalten verschlechtert.

2.3.3 Teilaufgabe Modellierung von Aging-Experimenten in Spingläsern

Zur Beschreibung von Spinglas-Aging-Experimenten sind bisher zum einen Clustermodele und zum anderen hierarchisch organisierte Modelle verwendet worden. Gerade die letzteren waren in der Lage, einige der wichtigen Eigenschaften der Experimente zu reproduzieren. Dabei wurden sehr vereinfachte Baummodelle mit einer Mastergleichungsdynamik versehen, die zum Teil sogar eine analytische Lösung zuließen. Zusammen mit einer Modellierung der magnetischen Überlappfunktion, die alle für den Einsatz der Resonanztheorie notwendigen Informationen über die magnetischen Eigenschaften des Systems enthält, konnten so die einfachen Agingexperimente mit ihrem charakteristischen Buckel in der Relaxationsrate angenähert werden.

Unklar ist immer noch, inwieweit die verwendeten Baummodelle die wirkliche Zustandsraumstruktur repräsentieren. Sicher ist, dass einige Eigenschaften der Experimente nicht richtig oder nicht vollständig wiedergegeben werden. Typischerweise steigen z. B. die theoretischen Kurven wieder an, während die experimentellen dies nicht tun. Es ist unbekannt, wie dieser Effekt vermieden werden kann.

Eine interessante Klasse von Experimenten sind solche, bei denen die Temperatur in der Wartezeit verändert wird. Diese so genannten „temperature-cycling“ Arbeiten zeigen verschiedene Verhaltensweisen, für die unklar ist, ob sie im Rahmen der hierarchischen Baummodelle modelliert werden können.

Ziel unserer Untersuchungen war daher, mit dem von uns entwickelten und oben erwähnten NB-Clustering Aging-Experimente zu modellieren. Wir haben dazu aus dem Realraumhamiltonian ein Zustandsraummodell abgeleitet und auf dieser Basis einige der an den heuristischen Baumstrukturen durchgeführten Modellierungen wiederholt [SH04]. Dabei konnten wir durch den direkten Zusammenhang zwischen der untersuchten vergrößerten Zustandsraumstruktur und dem zugrundeliegenden Realraumhamiltonian eines Ising-Spinglases die grundsätzliche Richtigkeit der hierarchischen Baummodelle zeigen, es bieten sich aber auch Ansatzpunkte für eine Reihe von Fortentwicklungen. Diese Arbeiten sind wichtiger Bestandteil der noch erforderlichen Vorarbeiten für die Modellierung der verbliebenen, noch nicht behandelten ac-Suszeptibilitätsexperimente.

Literaturverzeichnis zu 2.3

- [DWB90] H. L. Davis, D. J. Wales, and R. S. Berry. Exploring potential energy surfaces with transition-state calculation. *J. Chem. Phys.*, 92(7):4308–4319, 1990.
- [GSN⁺88] P. Granberg, L. Sandlund, P. Norblad, P. Svedlindh, and L. Lundgren. Observation of a time-dependent spatial correlation length in a metallic spin glass. *Phys. Rev. B*, 38(10):7097–7100, 1988.
- [HKQ91] D. Heidrich, W. Kliesch, and W. Quapp. *Properties of Chemically Interesting Potential Energy Landscapes*. Springer-Verlag, Heidelberg, 1991.
- [HLO⁺92] J. Hamman, M. Lederman, M. Ocio, R. Orbach, and E. Vincent. Spin-glass dynamics – relation between theory and experiment – a beginning. *Physica A*, 185(1–4):278–294, 1992.
- [Hof99] K. H. Hoffmann. Slow relaxation dynamics – from spin glasses to stochastic optimization. *Comp. Phys. Comm.*, 121-122(1-3):30–33, 1999.
- [Hof02] K. H. Hoffmann. The statistical physics of energy landscapes: From spin glasses to optimization. In K. H. Hoffmann and M. Schreiber, editors, *Computational Statistical Physics*, chapter 4, pages 57–76. Springer Verlag, Berlin, 1st edition, 2002.
- [HS02] K. H. Hoffmann and M. Schreiber, editors. *Computational Statistical Physics*. Springer Verlag, Berlin, 2002.
- [HSS97] K. H. Hoffmann, S. Schubert, and P. Sibani. Age reinitialization in hierarchical relaxation models for spin-glass dynamics. *Europhys. Lett.*, 38(8):613–618, 1997.
- [JVH⁺98] K. Jonason, E. Vincent, J. Hammann, J. P. Bouchaud, and P. Nordblad. Memory and chaos effects in spin glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 81:3243–3246, 1998.
- [JYN02] P. E. Jönsson, H. Yoshino, and P. Nordblad. Symmetrical temperature-chaos effect with positive and negative temperature shifts in a spin glass. *Phys. Rev. Lett.*, 89(9):097201/1–097201/4, 2002.
- [KBHB98] R. E. Kunz, P. Blaudeck, K. H. Hoffmann, and S. Berry. Atomic clusters and nanoscale particles: From coarse-grained dynamics to optimized annealing schedules. *J. Chem. Phys.*, 108(6):2576–2582, 1998.
- [LHOV94] F. Lefloch, J. Hammann, M. Ocio, and E. Vincent. Spin glasses in a magnetic field: phase diagram and dynamics. *Physica B*, 203:63–74, 1994.
- [LSNB83] L. Lundgren, P. Svedlindh, P. Nordblad, and P. Beckman. Dynamics of the relaxation-time spectrum in a CuMn spin-glass. *Phys. Rev. Lett.*, 51(10):911–914, 1983.
- [MJN⁺02] R. Mathieu, P. E. Jönsson, P. Nordblad, H. Aruga Katori, and A. Ito. Memory and chaos in an Ising spin glass. *Phys. Rev. B*, 65(1):012411/1–012411/4, 2002.
- [Pal82] R. G. Palmer. Broken ergodicity. *Adv. Phys.*, 31(6):669–735, 1982.
- [SGN⁺87] P. Svedlindh, P. Granberg, P. Nordblad, L. Lundgren, and H. S. Chen. Relaxation in spin glasses at weak magnetic fields. *Phys. Rev. B*, 35(1):268–273, 1987.

- [SH04] S. Schubert and K. H. Hoffmann. Aging in enumerated spin glass state spaces. accepted for publication in *Europhysics Letters*, 2004.
- [VHO91] E. Vincent, J. Hammann, and M. Ocio. Slow dynamics in spin glasses and other complex systems. Saclay Internal Report SPEC/91-080, Centre D'Etudes de Saclay, Orme des Merisiers, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France, October 1991. also in *Recent Progress in Random Magnets*, D.H. Ryan editor.
- [VHO⁺97] E. Vincent, J. Hammann, M. Ocio, J.-P. Bouchaud, and L. F. Cugliandolo. Slow dynamics and aging in spin glasses. In Miguel Rubíand Conrado Pérez-Vicente, editors, *Lecture Notes in Physics: Complex Behaviour in of Glassy Systems*, volume 492, pages 184–219. Springer, 1997.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe Zustandsraumstruktur und langsame Relaxation diskreter Systeme

Für die Untersuchung der Zustandsraumstruktur von Ising-Spinalgäsern mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung verwendeten wir im Wesentlichen zwei Algorithmen. Erstens wurden in der Umgebung lokaler Minima der Energie die Zustände katalogisiert; dazu implementierten wir einen auf einem umgekehrten Sintflut-Verfahren basierenden parallelen Algorithmus. Damit wurde die lokale Zustandsdichte bestimmbar: wir konnten zeigen, dass diese mit der Energie subexponentiell zunimmt.

Zweitens benutzten wir rekursive Branch-and-Bound-Methoden, um alle Zustände unterhalb einer festgelegten oberen Schranke der Energie zu finden. Dabei werden auch die Zustände gefunden, die durch Barrieren getrennt sind, die höher als dieser Maximalwert sind. Im Unterschied zu obigem Algorithmus wird die globale Zustandsdichte ermittelbar. Auf Basis der so gewonnenen Daten konnten wir schon früher zeigen, dass diese unterexponentiell anwächst [KSH98] und bis dahin vertretene anders lautende Meinungen widerlegen [SS94, Sib98].

Die globale Zustandsdichte ist auch berechenbar, wenn die Übergangsmatrix des Systems bei unendlicher Temperatur bekannt oder gut approximiert ist [AHM⁺88]. Sie ergibt sich dann als rechter Eigenvektor zum Eigenwert 1. Auf dieser Basis implementierten wir einen parallelen Algorithmus, der sehr gut skalierbar ist [HH04]. Dieser so genannte parQ-Algorithmus benutzt ein Ensemble von Zufallswanderern, die auf beliebig viele Rechenknoten eines Compute-Clusters verteilt werden können: Abb. 2.1 zeigt das Speedup-Verhalten auf zwei Compute-Clustern mit unterschiedlich vielen Random Walkers.

Mit steigender Schrittzahl liefern diese immer besser genäherte Matrixeinträge. Wir benutzten diesen Algorithmus zunächst, um ferromagnetische Ising-Spinsysteme zu untersuchen. Für diese existiert ein von Beale geschaffenes Mathematica-Programm [Bea96], das für zweidimensionale Ising-Gitter exakte Zustandsdichten berechnet und deshalb zu Vergleichen herangezogen werden kann. Unser Algorithmus ist mindestens so performant wie die besten zurzeit existierenden Konkurrenzalgorithmen (z. B. [WL01]). Hierzu wird in Abb. 2.2 die Auswirkung von verschiedenen Anzahlen von Sweeps für einen 32×32 -Isingferromagneten auf die Güte der berechneten Zustandsdichte vergli-

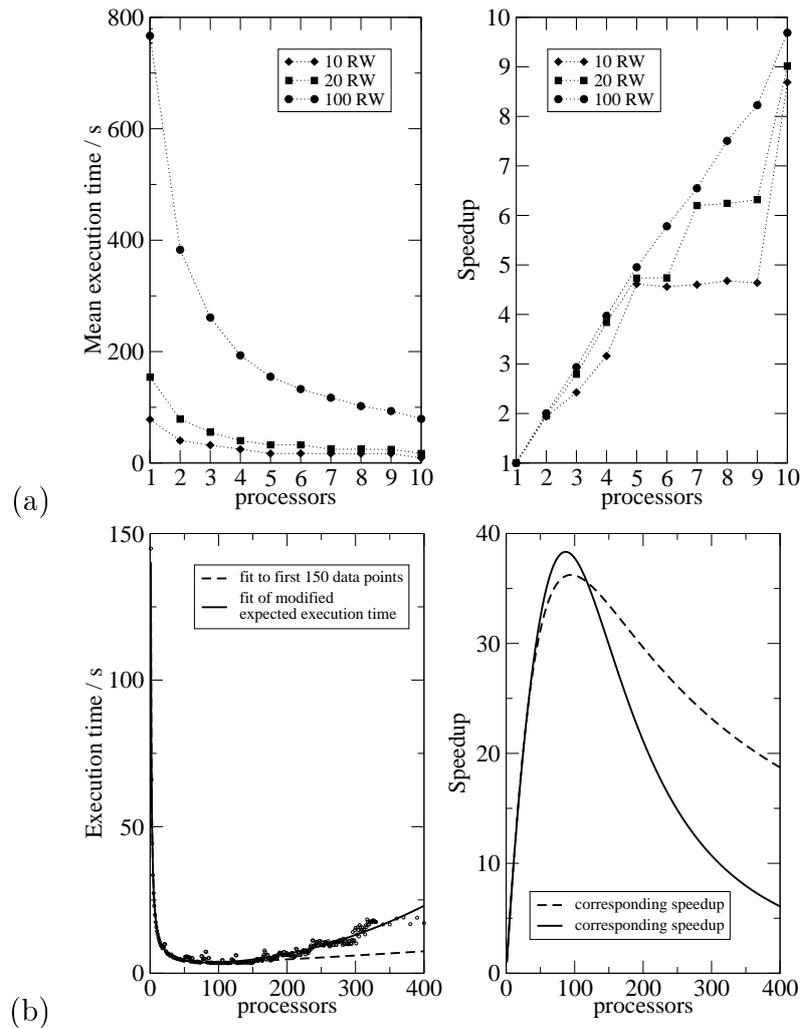


Abbildung 2.1: Laufzeiten und Speedup unseres parQ-Algorithmus auf dem gruppeninternen Cluster (a) und auf dem CLiC (b). Unterschiedliche Zahlen von Random Walkers (RW) führen zu unterschiedlichem Skalierungsverhalten. In Teilabbildung (b) sind zwei verschiedene Fits an die Rohdaten durchgeführt worden.

chen. Mit steigender Anzahl verkleinert sich der relative Fehler in Bezug auf die exakt berechnete Zustandsdichte.

Zur detaillierten Untersuchung energetischer Barrieren und Konnektivitäten entwickelten wir ein Verfahren, welches den Zustandsraum eines Systems vergrößert (Coarse Graining). Dazu werden Zustandsraumbereiche, die leicht miteinander ins Gleichgewicht kommen [Hof99], zu so genannten No-Barrier-Clustern zusammengefasst [SH04b].

Hierzu werden die Zustände eines Spinglas-Edwards-Anderson-Hamiltonian mit Nahbereichswechselwirkung

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - \sum_i H s_i \quad (2.1)$$

in Reihenfolge aufsteigender Energie betrachtet und entsprechend ihrer Nachbarschaftsrelation zu allen Zuständen geringerer Energie in dynamisch erzeugte Cluster eingeord-

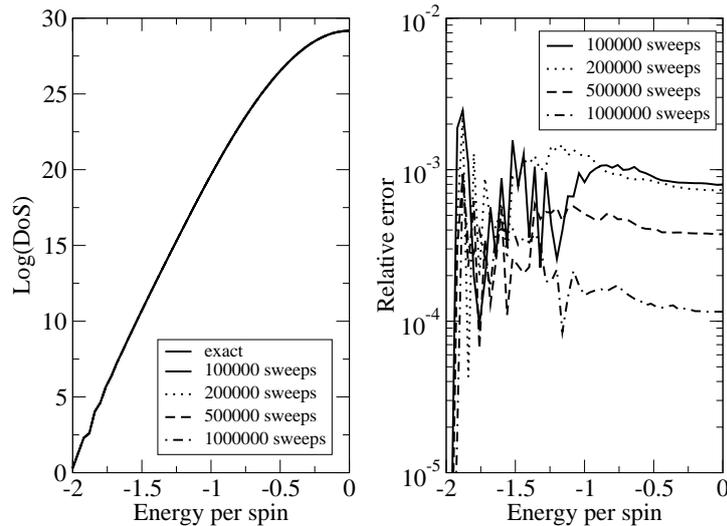


Abbildung 2.2: Zustandsdichteapproximation eines 32×32 -Isingferromagneten und relativer Fehler in Bezug auf die exakte Zustandsdichte in Abhängigkeit der durchgeführten Sweeps.

net. Dabei sind s die Spins und J_{ij} die Wechselwirkungskonstanten zwischen diesen, H ist ein äußeres Magnetfeld, das entsprechend der experimentellen Vorgehensweise gesteuert wird. Die entstehende vergrößerte Struktur, bestehend aus so genannten „local minimum clusters“ und „barrier clusters“, kann durch eine Mastergleichung beschrieben werden, um z. B. Aging-Phänomene nachzubilden. Dazu wurde auch die Dynamik selbst vergrößert, indem effektive kinetische Faktoren aus der mikroskopischen Dynamik abgeleitet wurden, die die Übergangsraten zwischen benachbarten Clustern beschreiben. Dabei ist die mittlere Energie des Clusters als

$$\hat{E}_p = -\frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{1}{\hat{n}_p} \sum_{j \in C_p} e^{-\beta E_j} \right) \quad (2.2)$$

und der effektive kinetische Faktor zwischen den Clustern C_p und C_q als

$$\hat{T}_{pq} = \frac{\sum_{j \in C_q, i \in C_p} t_{ij} \min(e^{-\beta E_j}, e^{-\beta E_i})}{\min(e^{-\beta \hat{E}_p}, e^{-\beta \hat{E}_q})} \quad (2.3)$$

definiert, wobei β die inverse Temperatur, E_i die Energie des Zustandes i , \hat{n}_p die Anzahl der Zustände im Cluster C_p sowie t_{ij} ein kinetischer Faktor ist.

Mit Hilfe dieser Vorgehensweise lassen sich detaillierte Informationen gewinnen und in den vergrößerten Zustandsraum übertragen. Dies ist z. B. die Anzahl der vom globalen Minimum aus erreichbaren lokalen Minima, wenn eine gewisse Barrierenhöhe nicht überschritten werden darf; Abb. 2.3 zeigt eine Mittelung über 88 Spinglasrealisationen der Größe 8×8 .

Ebenfalls wurde die Dichte der entstehenden Cluster untersucht. Diese ist von Bedeutung für die Einschätzung der Güte von z. B. hierarchischen Modellen für Zustandsräume.

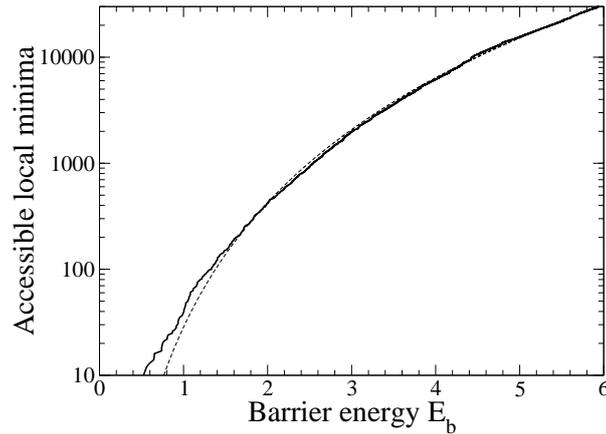


Abbildung 2.3: Lokale Minima, die vom globalen Minimum aus erreichbar sind, ohne eine Barriere größer E_b zu überqueren. Die gestrichelte Linie markiert einen Fit $\sim E_b^{3.9}$.

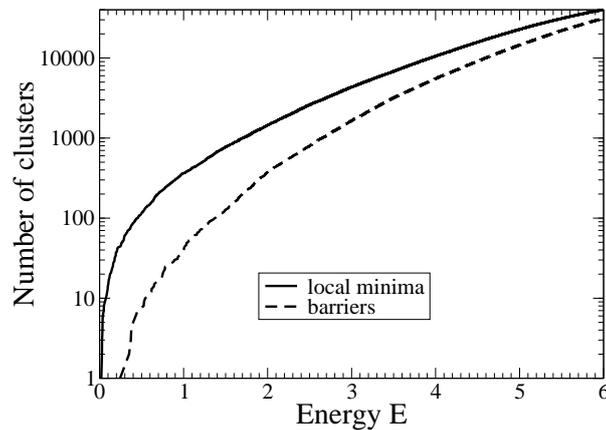


Abbildung 2.4: Anzahl der local minimum clusters und barrier clusters mit Energie kleiner E , die hier relativ zur Energie des globalen Minimums gemessen wurde.

Hierzu wird in Abb. 2.4 die Abhängigkeit der Anzahl der zwei Clusterarten von der Energie dargestellt und ein subexponentieller Anstieg nachgewiesen.

Die oben schon angesprochenen kinetischen Faktoren haben wir gleichfalls sehr detailliert untersucht. Zur Abhängigkeit dieser Faktoren von der Energiedifferenz zweier Cluster zeigt Abb. 2.5 die mittleren kinetischen Faktoren von 131 Spinglasrealisationen. Energetisch kurze Verbindungen sind nachweislich stärker. Die große Standardabweichung wird nicht durch einen breiten Peak um den mittleren Wert verursacht, sondern durch die Verteilung der Verbindungen selbst, s. Abb. 2.6. Diese Ergebnisse bestätigen die bisherigen Arbeiten, insbesondere aber die Richtigkeit einiger Annahmen zu den hierarchischen Modellen. [HS88, SH91, UHS95].

Ein noch detaillierteres Ergebnis zeigt Abb. 2.7: Hier haben wir die Abhängigkeit des mittleren kinetischen Faktors zwischen zwei Clustern gegen die Energiedifferenz aufge-

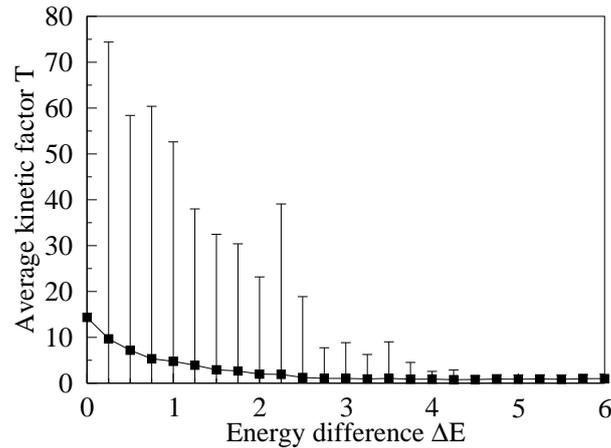


Abbildung 2.5: Mittlere kinetische Faktoren zwischen zwei Clustern als Funktion ihrer Energiedifferenz.

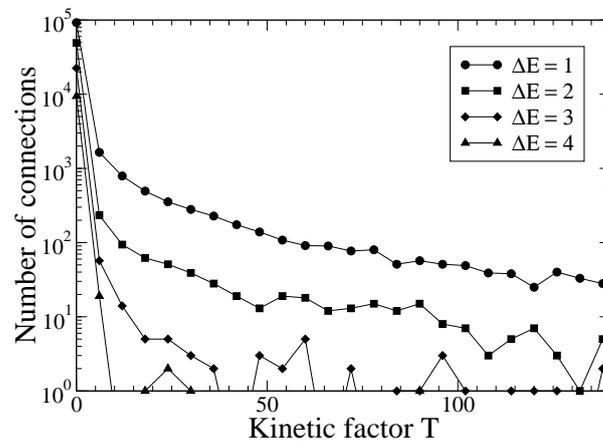


Abbildung 2.6: Anzahl der Verbindungen zwischen zwei Clustern als Funktion des kinetischen Faktors im Energieintervall $(\Delta E, \Delta E + 0.25)$. Die breite Verteilung ist Ursache der großen Standardabweichungen in Abb. 2.5.

tragen, wobei der Cluster mit geringerer Energie zu einem gewissen Energieband gehört. Wir fanden, dass im Mittel die Verbindungen bei kleineren globalen Energien stärker sind als die bei größeren globalen Energien. Dieser Eigenschaft wird bisher in heuristischen Modellen nicht Rechnung getragen, könnte aber eine verbesserte Modellbildung zur Folge haben.

Der Ausgangspunkt bei der Untersuchung des dynamischen Verhaltens kontinuierlicher Systeme war die Grundidee, den kontinuierlichen Zustandsraum auf einen diskreten Raum abzubilden. Diese Aufgabe wurde durch eine bereits im vorhergehenden Bericht grundlegend beschriebene parallele Master-Slave-Implementierung gelöst, bei der systematisch der Zustandsraum durchwandert und an vielen Stellen durch Slave-Prozesse genauer untersucht wird. Diese Implementierung wurde in diesem Berichtszeitraum mehrfach optimiert und zur Anwendungsreife gebracht. Eine entscheidende Bedeutung besitzt in diesem Algorithmus die so genannte Escape-Zeit, die das System bei einer bestimmten

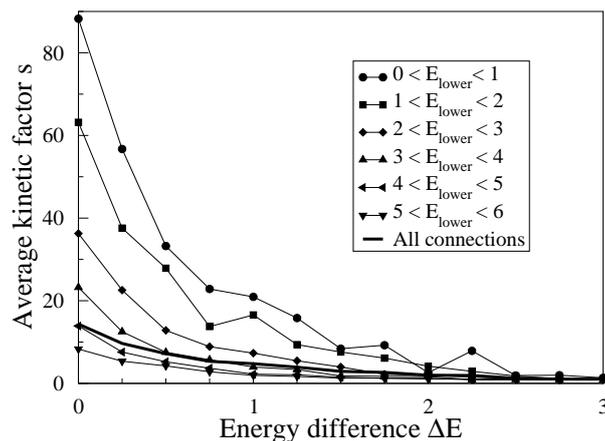


Abbildung 2.7: Mittlerer kinetischer Faktor zwischen zwei Clustern in Abhängigkeit ihrer Energiedifferenz, wobei die Energie des tiefer liegenden Clusters im angegebenen Intervall liegt.

Temperatur im Mittel benötigt, um aus einem lokalen Minimum der potentiellen Energie zu entkommen. Diese Escape-Zeit erlaubt eine Abschätzung der Tiefe eines lokalen Minimums.

Auf diese Weise entsteht eine Statistik von Minima mit bestimmten Eigenschaften, die sich katalogisieren und in Gruppen einordnen lassen. Es gelang, dies für eine in den letzten Jahren besonders interessante Klasse von Systemen, die amorphen Halbleiter, zu realisieren. Es wurde eine optimale Strategie für das Aufsuchen von besonders tief liegenden Minima der potentiellen Energie von Systemen mit gegebener atomarer Zusammensetzung gefunden. Abbildung 2.8 zeigt beispielhaft das Ergebnis für einen Cluster aus amorphem Kohlenstoff, nachdem dessen wesentliche Eigenschaften des Zustandsraumes auf eine durch Barrieren verbundene Struktur von diskreten Zuständen abgebildet werden konnte [BH03]. Die Methode ist ohne weiteres auch auf Systeme aus anderen Atomsorten mit anderen Wechselwirkungspotentialen übertragbar.

2.4.2 Teilaufgabe Relaxationsverhalten auf Fraktalen

Um den Einfluss der Konnektivitäten im Zustandsraum eines komplexen Systems auf dessen thermisches Relaxationsverhalten zu verstehen, haben wir unsere Untersuchungen der Diffusion auf Fraktalen fortgesetzt. Wir beschränkten uns auf Sierpinski-Teppiche, da hierfür sowohl ein von uns entwickelter effizienter Algorithmus zur Simulation der Diffusion auf „finitely ramified“ Teppichen existiert [SFSH01], andererseits aber auch komplementäre Methoden zur Bestimmung der Random-Walk-Dimension solcher Strukturen zur Verfügung stehen. Die Teppiche werden in unserem Algorithmus folgendermaßen realisiert: nur der Generator wird, verbunden mit einer hierarchischen Notation der Koordinaten des Walkers, gespeichert. Das entstehende Fraktal wird dabei dynamisch erzeugt und wächst im Verlauf der Simulation. Damit werden im Gegensatz zu herkömmlichen, bitmap-orientierten Algorithmen Randeffekte vermieden und wesentlich genauere Werte für die Random-Walk-Dimension ermittelbar. Als Beispiel zeigt Abb. 2.9 die Entstehung eines „finitely ramified“ Teppichs von Stufe 1 bis 3.

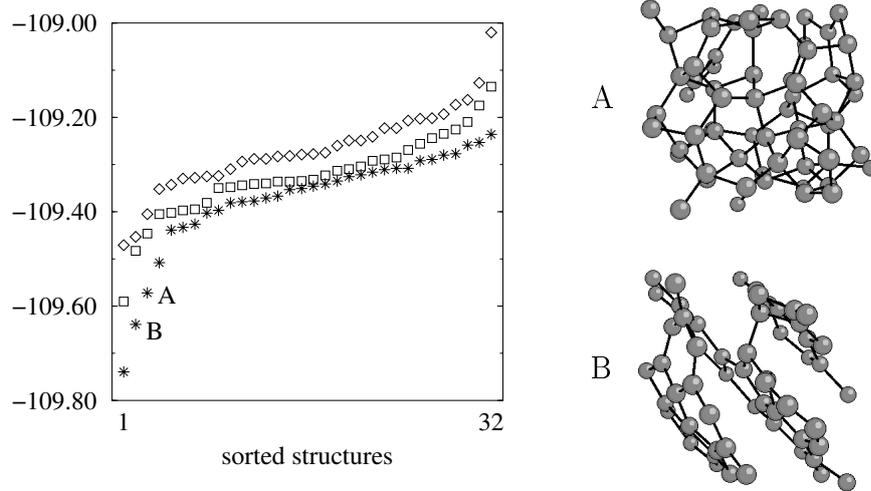


Abbildung 2.8: Links: Statistik der potentiellen Energien tief liegender Minima von jeweils 32 Systemen, neuentwickelte Strategie (Sterne) im Vergleich mit vorher gewonnenen Resultaten (Quadrate). Rechts: Kohlenstoffcluster (A: amorph, B: graphitähnlich bei besonders geringer potentieller Energie)

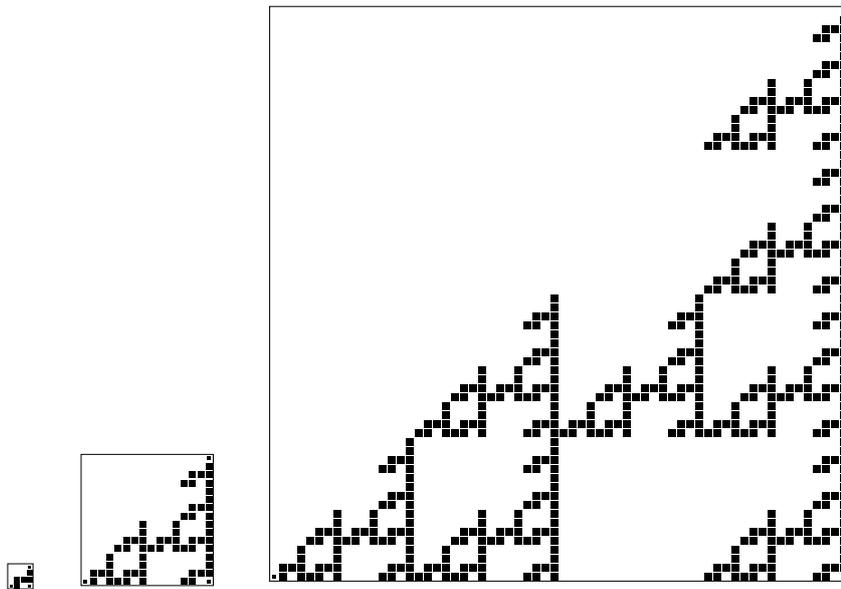


Abbildung 2.9: Entstehung eines typischen Sierpinski-Teppichs. Die kleinen Quadrate markieren die Verbindungen zum Rest der Struktur.

Die Parallelisierung des Algorithmus für Compute-Cluster wurde von uns in der vergangenen Periode in Angriff genommen. Dabei ergaben sich mehrere Herausforderungen. Erstens musste eine effektive, über mehrere Compute-Nodes verteilbare dynamische Datenhaltung implementiert werden. Dazu haben wir die dynamisch generierten Fraktalteile in einer verteilten Liste abgelegt. Zweitens müssen *alle* Compute-Nodes darüber

informiert werden, wo welcher Teil des Teppichs verwaltet wird. Hierzu müssen nach Generierung eines neuen Teils umfangreiche, prozessgruppenweite Kommunikationen stattfinden, um die Daten auf allen Knoten zu synchronisieren. Drittens darf ein neu zu generierender Teil nicht gleichzeitig mehrfach erzeugt werden: dieses Problem tritt z. B. in den Zeitschritten auf, in denen Random Walkers, die in verschiedenen Richtungen um eine Pore des Fraktals herum wanderten, sich wieder treffen.

Beispielhaft zeigt Abb. 2.10, wie die sich ausbreitende Wahrscheinlichkeitsdichte auf einem Fraktal nach und nach die Erzeugung neuer Fraktalteile notwendig macht. Ausgehend vom Zentrum des Fraktals läuft diese breit, jedoch existiert eine Vorzugsrichtung (hier die x -Achse), auf der dies schneller geschehen kann. Daher ist das entstehende (Pseudo)-Fraktal in diese Richtung weiter ausgedehnt.

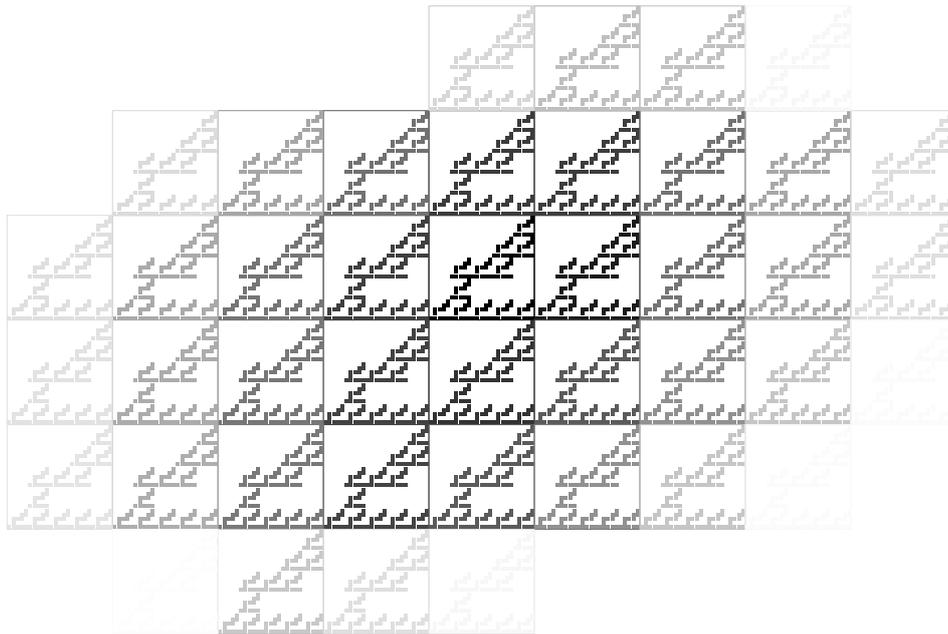


Abbildung 2.10: Durch Breitlaufen einer ursprünglich scharf konzentrierten Wahrscheinlichkeitsdichte entstehendes Fraktal. Je heller der Teil, desto später wurde dieser in die schon bestehende Struktur eingefügt.

Diese Aspekte machten es notwendig, strikt zwischen den Teilen Generation von neuen Teppichteilen, Schrittausführung der Random Walker und Kommunikation zu unterscheiden und ein Ausführungsschema zu entwickeln, welches die Daten synchron hält. Alle drei Teile sind aber sehr eng miteinander verknüpft und bedingen teilweise einander. Der dadurch entstehende große Kommunikationsaufwand bietet uns einen Ansatzpunkt für weitere Verbesserungen. In Zusammenarbeit mit Frank Mietke aus dem neu beantragten TP B10 wurde eine Zeitmessung durchgeführt, die in Abb. 2.11 dargestellt ist. Hier ist der relative Anteil der Kommunikation via MPI an der Gesamtlaufzeit als Funktion des Iterationsschrittes während der Berechnung einer Dichteverteilung auf einem Fraktal dargestellt.

Darüber hinaus wurden von uns ergänzende Methoden zur Bestimmung der Random-Walk-Dimension untersucht, angewandt und weiterentwickelt: Iteration der Mastergleichung und Resistance Scaling. Zur Untersuchung der Diffusion mittels Mastergleichung

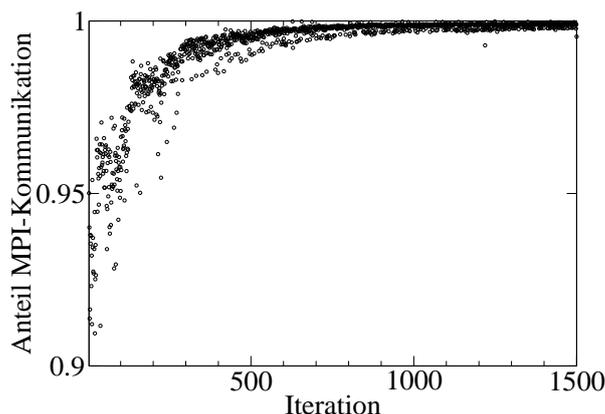


Abbildung 2.11: Relativer Anteil der Kommunikation via MPI an der Gesamtlaufzeit einer Wahrscheinlichkeitsdichteberechnung als Funktion des Iterationsschrittes.

entwickelten wir basierend auf der „Exact Enumeration Method“ [HBA87] einen Algorithmus, der die zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsverteilung auf dem untersuchten Fraktal dynamisch speichert [FSSH00]. Auch hier verfolgten wir das Ziel, diesen zu parallelisieren und eine für Compute-Cluster optimal angepasste Implementation zu finden, um Speicherplatzbeschränkungen zu umgehen. Unsere Idee war, nur die besuchten Teile des Fraktals zu speichern. Hier treten im Prinzip die gleichen Probleme auf wie auch schon bei der oben beschriebenen Parallelimplementation der Random-Walk-Variante. Es kommt aber noch hinzu, dass CPU-Last und Kommunikationsaufwand mit der Laufzeit steigen können. Die Konnektivität zwischen den Teilen des Fraktals muss deshalb besonders sorgfältig mit der Inter-Node-Kommunikation verknüpft werden, um ausreichende Effizienz zu gewährleisten. Außerdem muss eine leistungsfähige Lastverteilung kreiert werden. Zur Zeit gibt es eine erste Implementation.

Analytische Untersuchungen starteten mit der Einsicht, dass die Brownsche Bewegung auf einem Substrat und der Stromfluss durch ein entsprechendes Widerstandsnetzwerk eng gekoppelt sind [FSH01]. Skalierungsuntersuchungen des Gesamtwiderstands erlauben Berechnungen der Random-Walk-Dimension mit beliebiger Genauigkeit. Dies wurde mit einem entsprechenden Mathematica-Programm umgesetzt [SFH00] und für die Berechnung chemischer Dimensionen erweitert [FSH02]. Diese drei Methoden – Verfolgung von Random Walkers, Iteration der Mastergleichung, Widerstandsskalierung – wurden gegenübergestellt in einer Zusammenfassung [FSSH02].

Die Möglichkeit einer Kontinuumsbeschreibung der Diffusion auf Fraktalen wurde auch in der vergangenen Antragsperiode weiter untersucht. Neben einer Reihe von schon existierenden Arbeiten [HES98, ESFH00, SED⁺00, DES⁺01, EDS⁺01], jedoch ist diese Frage im Wesentlichen ungeklärt und weiterhin Gegenstand intensiver Forschung.

2.4.3 Modellierung von Aging-Experimenten in Spingläsern

Nachdem in der Vergangenheit hierarchische Baummodelle verwendet wurden, um Alterungseffekte bei Spingläsern zu erklären, haben wir einen ersten Versuch unternommen, um eine Modellierung zu finden, die direkt auf dem Realraumhamiltonian eines Ising-

Spinglases aufbaut [SH04a]. Ausgehend von den Daten des enumerierten Zustandsraumes führten wir eine Vergrößerung des Zustandsraumes durch, bei der auch die magnetischen Eigenschaften berücksichtigt wurden. Das von uns entwickelte NB-Clustering-Verfahren lieferte dann einen mesoskopischen Zustandsraum, auf dem mittels Mastergleichungsdynamik das zeitliche Verhalten mit und ohne Magnetfeld modelliert werden konnte. Im Einzelnen konnten so Simulationen durchgeführt werden, die den Aging-Experimenten entsprechen.

Eine der damit untersuchten experimentellen Situationen ist das ZFC-Experiment. Dabei wird das System ohne äußeres Magnetfeld abgekühlt und kann anschließend für eine Zeit t_w relaxieren. Danach wird ein kleines, konstantes Magnetfeld eingeschaltet und die zeitliche Entwicklung der Magnetisierung gemessen. Dabei betrachten wir zur besseren Übersicht die Ableitung der Magnetisierung nach dem Logarithmus der Zeit, als Relaxationsrate bezeichnet, $S(t) = dM(t)/d \log(t)$, wobei $t = 0$ der Zeitpunkt der Einschaltens des Magnetfeldes ist. Aus Abb. 2.12 geht dabei klar hervor, dass jeweils $S_{\max} \equiv S(t \approx t_w)$ gilt. Das wiederum bedeutet, dass man aus dem Zeitverlauf der Relaxationsrate das Alter des untersuchten Systems ableiten kann.

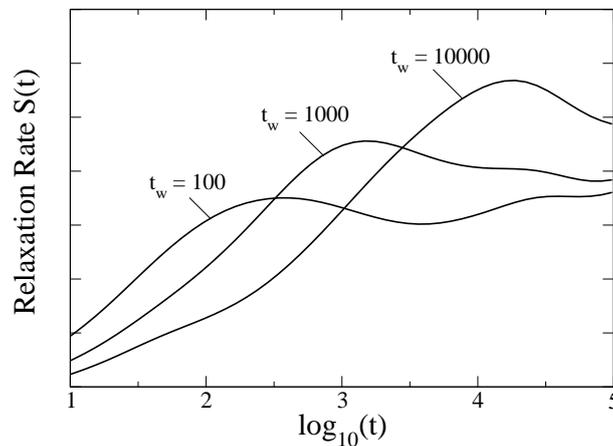


Abbildung 2.12: Relaxationsrate $S(t) = dM(t)/d \log(t)$, gemittelt über 500 Realisierungen des vergrößerten Spinglases. Das System wird abgekühlt, und nach Verstreichen der Wartezeit t_w legt man ein konstantes schwaches Magnetfeld an und misst den Zeitverlauf der Magnetisierung. Dabei findet man, dass die Zeitpunkte der Maxima der Relaxationsrate genau wie im Experiment mit den Wartezeiten korrespondieren.

Eine Modifikation dieses Experimentes ist das ZFC-Experiment mit Temperaturstufe. Der prinzipielle Ablauf dieses Experimentes ist gleich dem obigen mit dem kleinen aber wesentlichen Unterschied, dass die Temperatur während der Wartezeit t_w um ΔT niedriger als zur Messzeit t ist. Der Effekt der Temperaturstufe ist, dass die Ergebniskurven mit niedrigerer Temperatur während der Wartezeit jünger erscheinen, d. h. das Maximum der Relaxationsrate ist nach links verschoben, wie Abbildung 2.13 deutlich zeigt. Technisch gesehen ist die scheinbare Wartezeit oder das scheinbare Alter eines Systems durch die Position des Maximum der Relaxationsrate definiert. Stellt man, wie in Abbildung 2.14, die scheinbare Wartezeit als Funktion der Temperaturstufe ΔT dar, findet man eine exponentielle Abhängigkeit, wobei der Betrag des Koeffizienten mit steigender

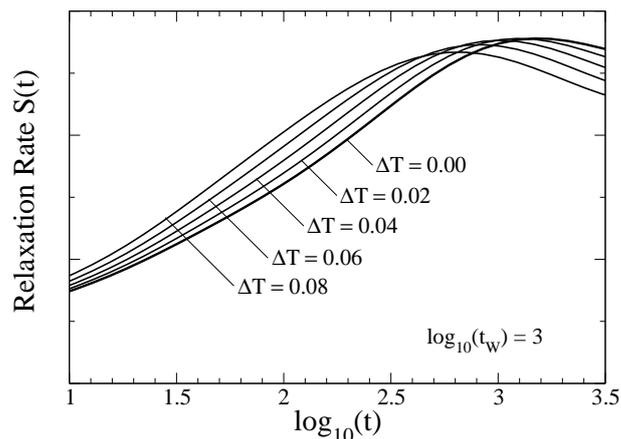


Abbildung 2.13: Relaxationsrate $S(t) = dM(t)/d \log(t)$ des ZFC-Experimentes mit Temperaturstufe unter dem Einfluss unterschiedlicher Temperaturabsenkung ΔT während konstanter Wartezeit $t_w = 1000$. Dabei finden wir, dass die Zeitpunkte der Maxima der Relaxationsrate mit steigendem ΔT nach links verschoben werden, ein Effekt den man auch als geringeres scheinbares Alter verstehen kann.

Wartezeit zunimmt.

Dabei zeigen sich für große ΔT , insbesondere bei langen Wartezeiten, Abweichungen vom exponentiellen Verhalten. Diese resultieren aus den Übergangsraten, welche für die Dynamik während der Wartezeit benutzt werden. Wie aus den Gleichungen (2.2) und (2.3) hervorgeht, ist die Vergrößerung der Dynamik temperaturabhängig; aus Gründen der Durchführbarkeit wurden aber die gleichen Parameter sowohl während der Wartezeit als auch während der Messzeit verwendet. Für kleine ΔT ist diese Vereinfachung aber möglich, und wir finden eine sehr gute Übereinstimmung mit experimentellen Befunden [GSN⁺88].

Literaturverzeichnis

Eigene referierte Publikationen:

- [AHM⁺88] B. Andresen, K. H. Hoffmann, K. Mosegaard, J. Nulton, J. M. Pedersen, and P. Salamon. On lumped models for thermodynamic properties of simulated annealing problems. *J. Phys. France*, 49:1485–1492, 1988.
- [BH03] P. Blaudeck and K. H. Hoffmann. Ground states for condensed amorphous systems: Optimizing annealing schemes. *Comp. Phys. Comm.*, 150(3):293–299, 2003.
- [DES⁺01] M. Davison, C. Essex, C. Schulzky, A. Franz, and K. H. Hoffmann. Clouds, fibres and echoes: a new approach to studying random walks on fractals. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 34(20):L289–L296, 2001.
- [EDS⁺01] C. Essex, M. Davison, C. Schulzky, A. Franz, and K. H. Hoffmann. The differential equation describing random walks on the Koch curve. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 34(41):8397–8406, 2001.

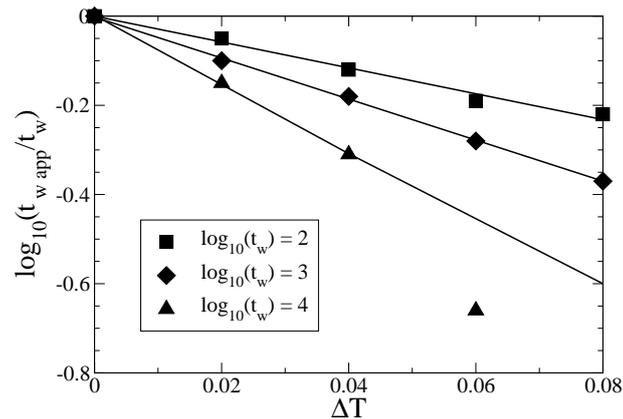


Abbildung 2.14: Logarithmus der scheinbaren Wartezeit t_w^{app} als Funktion der Temperaturstufe ΔT für verschiedene Wartezeiten T_w . Die scheinbare Wartezeit ist durch das Maximum der Relaxationsrate definiert, welches in Experimenten mit Temperaturstufe zu kürzeren Zeiten hin verschoben ist. Die Linien repräsentieren lineare Trends; im Falle von $t_w = 10000$ wurden dabei aus im Text genannten Gründen nur Werte $\Delta T \leq 0.04$ berücksichtigt.

- [ESFH00] C. Essex, C. Schulzky, A. Franz, and K. H. Hoffmann. Tsallis and Rényi entropies in fractional diffusion and entropy production. *Physica A*, 284(1-4):299–308, 2000.
- [FH02] A. Franz and K. H. Hoffmann. Optimal annealing schedules for a modified Tsallis statistics. *J. Comput. Phys.*, 176(1):196–204, 2002.
- [FH03] A. Franz and K. H. Hoffmann. Threshold accepting as limit case for a modified Tsallis statistics. *Appl. Math. Lett.*, 16(1):27–31, 2003.
- [FHS01] A. Franz, K. H. Hoffmann, and P. Salamon. Best possible strategy for finding ground states. *Phys. Rev. Lett.*, 86(23):5219–5222, 2001.
- [FSH01] A. Franz, C. Schulzky, and K. H. Hoffmann. The Einstein relation for finitely ramified Sierpinski carpets. *Nonlinearity*, 14(5):1411–1418, 2001.
- [FSH02] A. Franz, C. Schulzky, and K. H. Hoffmann. Using computer algebra methods to determine the chemical dimension of finitely ramified Sierpinski carpets. *SIGSAM Bulletin*, 36(2):18–30, 2002.
- [FSSH00] A. Franz, C. Schulzky, S. Seeger, and K. H. Hoffmann. An efficient implementation of the exact enumeration method for random walks on Sierpinski carpets. *Fractals*, 8(2):155–161, 2000.
- [FSSH02] A. Franz, C. Schulzky, S. Seeger, and K. H. Hoffmann. Diffusion on fractals – efficient algorithms to compute the random walk dimension. In J. M. Blackledge, A. K. Evans, and M. J. Turner, editors, *Fractal Geometry: Mathematical Methods, Algorithms, Applications*, IMA Conference Proceedings, pages 52–67. Horwood Publishing Ltd., Chichester, West Sussex, 2002.
- [FSTH01] A. Franz, C. Schulzky, S. Tarafdar, and K. H. Hoffmann. The pore structure of Sierpinski carpets. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 34(42):8751–8765, 2001.

- [HES98] K. H. Hoffmann, C. Essex, and C. Schulzky. Fractional diffusion and entropy production. *J. Non-Equilib. Thermodyn.*, 23(2):166–175, 1998.
- [HFS02] K. H. Hoffmann, A. Franz, and P. Salamon. Structure of best possible strategies for finding ground states. *Phys. Rev. E*, 66:046706, 2002.
- [HH04] F. Heilmann and K. H. Hoffmann. The parQ method: a parallelized algorithm for calculating the density of states. submitted to *Parallel Computing*, March 2004.
- [HHS04] F. Heilmann, K. H. Hoffmann, and P. Salamon. Best possible probability distribution over extremal optimization ranks. *Europhys. Lett.*, 66(3):305–310, 2004.
- [Hof99] K. H. Hoffmann. Slow relaxation dynamics – from spin glasses to stochastic optimization. *Comp. Phys. Comm.*, 121-122(1-3):30–33, 1999.
- [Hof02] K. H. Hoffmann. The statistical physics of energy landscapes: From spin glasses to optimization. In K. H. Hoffmann and M. Schreiber, editors, *Computational Statistical Physics*, chapter 4, pages 57–76. Springer Verlag, Berlin, 1st edition, 2002.
- [HS88] K. H. Hoffmann and P. Sibani. Diffusion in hierarchies. *Phys. Rev. A*, 38(8):4261–4270, 1988.
- [HS02] K. H. Hoffmann and M. Schreiber, editors. *Computational Statistical Physics*. Springer Verlag, Berlin, 2002.
- [HS03] K. H. Hoffmann and J. C. Schön. Kinetic features of preferential trapping on energy landscapes. submitted to *Europhysics Letters*, December 2003.
- [KSH98] T. Klotz, S. Schubert, and K. H. Hoffmann. The state space of short-range Ising spin glasses: the density of states. *Eur. Phys. J. B*, 2(3):313–317, 1998.
- [LED⁺03] X. Li, C. Essex, M. Davison, K. H. Hoffmann, and C. Schulzky. Fractional diffusion, irreversibility and entropy. *J. Non-Equilib. Thermodyn.*, 28(3):279–291, 2003.
- [SED⁺00] C. Schulzky, C. Essex, M. Davison, A. Franz, and K. H. Hoffmann. The similarity group and anomalous diffusion equations. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 33(31):5501–5511, 2000.
- [SFH00] C. Schulzky, A. Franz, and K. H. Hoffmann. Resistance scaling and random walk dimensions for finitely ramified Sierpinski carpets. *SIGSAM Bulletin*, 34(3):1–8, 2000.
- [SFSH01] S. Seeger, A. Franz, C. Schulzky, and K. H. Hoffmann. Random walks on finitely ramified Sierpinski carpets. *Comp. Phys. Comm.*, 134(3):307–316, 2001.
- [SH91] P. Sibani and K. H. Hoffmann. Relaxation in complex systems: Local minima and their exponents. *Europhys. Lett.*, 16:423, 1991.
- [SH02] S. Seeger and K. H. Hoffmann. The cumulant method applied to a mixture of Maxwell gases. *Continuum Mech. Thermodyn.*, 14(2):321–335, 2002.
- [SH04a] S. Schubert and K. H. Hoffmann. Aging in enumerated spin glass state spaces. accepted for publication in *Europhysics Letters*, 2004.
- [SH04b] S. Schubert and K. H. Hoffmann. The structure of enumerated spin glass state spaces. accepted by *Computer Physics Communications*, 2004.

- [TFSH01] S. Tarafdar, A. Franz, S. Schulzky, and K. H. Hoffmann. Modelling porous structures by repeated Sierpinski carpets. *Physica A*, 292(1-4):1–8, 2001.
- [UHS95] C. Uhlig, K. H. Hoffmann, and P. Sibani. Relaxation in self similar hierarchies. *Z. Phys. B*, 96:409–416, 1995.

Andere Zitate:

- [Bea96] P. D. Beale. Exact Distribution of Energies in the two-dimensional Ising model. *Phys. Rev. Lett.*, 76(1):78–81, 1996.
- [GSN⁺88] P. Granberg, L. Sandlund, P. Norblad, P. Svedlindh, and L. Lundgren. Observation of a time-dependent spatial correlation length in a metallic spin glass. *Phys. Rev. B*, 38(10):7097–7100, 1988.
- [HBA87] S. Havlin and D. Ben-Avraham. Diffusion in disordered media. *Adv. Phys.*, 36(6):695–798, 1987.
- [Sib98] P. Sibani. Local state space geometry and thermal relaxation in complex landscapes: the spin-glass case. *Physica A*, 258(3–4):249–262, 1998.
- [SS94] P. Sibani and P. Shriver. Local phase-space structure and low-temperature dynamics of short-range Ising spin glasses. *Phys. Rev. B*, 49(10):6667–6671, 1994.
- [WL01] F. Wang and D. P. Landau. Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States. *Phys. Rev. Lett.*, 86(10):2050–2053, 2001.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Die Arbeiten in diesem Teilprojekt dauern an; sowohl bezüglich der Zustandsraumauflösung als auch der Spinglasmodellierung gibt es weiterhin eine Reihe offener Fragen:

- Kann eine Methode implementiert werden, die wahlweise mehr oder weniger detailliert den Zustandsraum eines Spinglases vergrößert? Wie muss die innere Struktur sehr großer Cluster beschaffen sein, damit dies möglich wird?
- Wie könnte eine solche Methode effektiv parallelisiert werden? Hierzu könnten sich Schemata anbieten, die eine Gebietszerlegung im Zustandsraum benutzen, um benachbarte Zustände zusammenzufassen.
- Ist es möglich, den Zustandsraum von Spingläsern in der Umgebung lokaler Minima soweit zu enumerieren, dass eine größere Anzahl von Spinflips erforderlich ist, um diesen Bereich zu verlassen?
- Wie kann das unterexponentielle Wachstum der Zustandsdichte am besten charakterisiert werden?

Auch zu den Forschungen auf dem Gebiet der Fraktale ergeben sich eine Reihe von interessanten Fragestellungen:

- Wie wirkt sich die Mischung von unterschiedlichen Fraktalgeneratoren gleicher Random-Walk-Dimension auf die Dimension des erzeugten Zufallsfraktales aus?

- Was geschieht, wenn nunmehr Generatoren verschiedener Dimension verwendet werden?
- Auch eine Energiefunktion kann auf Fraktalen definiert sein. Dann existieren Vorzugsrichtungen für Zufallswanderer auf diesen. Wie ist dann das Wechselspiel zwischen Random-Walk-Dimension und Energiefunktion zu charakterisieren?

Im Bereich der Modellierung von Spinglasexperimenten verbleiben z. B. folgende Probleme:

- Kann man mit Hilfe der linearen Response-Theorie die ac-Suszeptibilität der hierarchischen Modelle für die neueren Experimente mit Temperaturrampe bestimmen, und darauf aufbauend die experimentell beobachteten Effekte reproduzieren?
- Lässt sich hierzu, basierend auf den Kenntnissen über die Temperaturabhängigkeit der Eigenwerte der Übergangsmatrix, der Propagator für eine kontinuierliche Temperaturrampe ermitteln?

Eine ausführliche Darstellung der geplanten Projekte ist im Finanzierungsantrag 2005–2007, Teilprojekt C3, enthalten.

Teilprojekt

C7

Zweistufige Parallelisierung eines Bandstrukturprogramms
und massiv parallele Anwendung auf
Amorphisierungsphänomene an inneren Grenzflächen

2.1 Teilprojekt C7

Zweistufige Parallelisierung eines Bandstrukturprogramms und massiv parallele Anwendung auf Amorphisierungsphänomene an inneren Grenzflächen

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Michael Schreiber
22.04.1954

Professur Theoretische Physik III
(Theorie ungeordneter Systeme)
Fakultät für Physik
Technische Universität Chemnitz
09107 Chemnitz
Tel.: (0371) 531-3142
Fax: (0371) 531-3143
schreiber@physik.tu-chemnitz.de

Dr. Sibylle Gemming
25.08.1968

Institut für Physikalische Chemie
und Elektrochemie
Fakultät für Naturwissenschaften
Technische Universität Dresden
01062 Dresden
(0351) 463-39449
(0351) 463-35953
sibylle.gemming@chemie.tu-dresden.de

Prof. Schreiber war von Februar 2002 bis Januar 2003 beurlaubt, um eine Professur an der International University Bremen wahrzunehmen.

Dr. Sibylle Gemming (geb. Köstlmeier) war von August 2001 bis März 2002 sowie von Oktober 2002 bis September 2003 in Mutterschutz bzw. Elternzeit. Seit Januar 2004 ist sie an der Technischen Universität Dresden beschäftigt. Sie hat ihre Habilitation im Mai 2004 an der Technischen Universität Chemnitz eingereicht.

2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. Igor Chaplygin (04/02–07/03)
Dr. Rebecca Janisch (09/03–12/03)

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Gegenstand des Teilprojekts ist die Untersuchung von Strukturbildungs- und Amorphisierungsvorgängen an Metall-Halbleiter-Grenzflächen mit Hilfe von Dichtefunktional-Bandstruktur-Rechnungen auf einer gestuft parallelen Plattform aus mehreren *shared-memory*-Compute-Servern, die untereinander mit einem schnellen, internen Netzwerk verbunden sind. Mit drei HP 9000 N4000 Enterprise-Servern mit je 8 Prozessoren verfügt die Arbeitsgruppe über eine geeignete Testplattform, und die gegenwärtigen Entwicklungen der Computertechnik hin zu Mehrprozessor-Rechnern bestätigen daher den gewählten Ansatz. Das Teilprojekt verbindet informatisch-methodische Aspekte mit physikalischen und materialwissenschaftlichen Fragestellungen: insbesondere soll geklärt werden, wie sich die inhärente Struktur des physikalischen Problems optimal auf eine adaptive Parallelisierung für homogene Cluster aus Mehrprozessor-Rechnern abbilden lassen kann, so dass sich große Modellsysteme (mit bis zu 500 Atomen) genau und effizient behandeln lassen, was einer Steigerung aktuell behandelbarer Systemgrößen um etwa einen Faktor von 10 entspricht.

Dazu mussten die folgenden Fragen beantwortet werden: Wie kann allein durch Restrukturierung des physikalischen Problems eine ausgewogenere Lastverteilung zwischen den Clusterknoten erreicht werden? An welchen Stellen können die bereits im Sonderforschungsbereich entwickelten parallelen Routinen direkt eingesetzt werden, und wo bedürfen sie einer Anpassung? Die grundlegende Parallelisierungsstrategie war es, die Stützstellen der numerischen Brillouinonen-Integration auf verschiedene Clusterknoten zu verteilen, das mit größerem Kommunikationsaufwand verbundene Eigenwertproblem an jeder Stützstelle aber lokal auf einer *shared-memory*-Mehrprozessormaschine mit parallelen Solvern zu lösen und so eine zweistufige Parallelisierung zu erzielen. Diese Strategie sollte im Projektverlauf geprüft werden, indem auch andere, potentielle Parallelisierungsmöglichkeiten evaluiert werden sollten.

Als konkrete Anwendung des parallelen Rechnens wurde die Dichtefunktional-Bandstruktur-Untersuchung innerer Grenzflächen zwischen Silizium und Titan bzw. Vanadium geplant. Bei der Herstellung dieser Grenzflächen durch Molekularstrahlepitaxie bilden sich amorphe Bereiche, die sich zu kristallinen Polymorphen umformen. Aus diesen Beobachtungen ergaben sich folgende materialwissenschaftliche Fragestellungen, die mit Hilfe von Dichtefunktional-Rechnungen zu geeigneten Modellsystemen zu klären waren: welche strukturell stabilen, binären Silizidphasen existieren, und wie ist der Zusammenhang zwischen den gebildeten Silizid-Polymorphen und der Temperatur? Gibt es charakteristische, immer wiederkehrende lokale Strukturelemente, welche auch in amorphen Bereichen immer wieder beobachtet werden? Welche Wechselwirkungen dominieren an der Titan-Silizium-Grenzfläche vor der temperatur-induzierten Silizidbildung? Welche Wechselwirkung ist der Hauptgrund für die Bildung amorpher und/oder kristalliner Silizid-Polymorphe an der Grenzfläche? Wie beeinflusst die reaktive Phase die Grenzflächenstabilität? Und welche Auswirkungen hat sie auf die elektronischen Eigenschaften der gesamten Grenzfläche?

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

Die Teilaufgaben 2.3.1 bis 2.3.3 sind verbunden mit den materialwissenschaftlichen Fragestellungen, den Dichtefunktional-Bandstruktur-Rechnungen zur Strukturbildung und Wechselwirkung an reaktiven Metall-Halbleiter-Grenzflächen. Teilaufgabe 2.3.4 ist ein Beispiel dafür, wie physikalische und informationstechnische Aspekte zur effizienten Parallelisierung kombiniert werden können. Die Teilaufgaben 2.3.5 und 2.3.6 widmen sich hingegen mehr der konkreten Programmentwicklung.

2.3.1 Teilaufgabe “Binäre kristalline und amorphe Modifikationen”

Der Mitarbeiter der Ergänzungsaustattung sollte sich mit Hilfe kleinerer Systeme in die physikalischen Grundlagen einarbeiten und einen Überblick über die Programmstruktur erhalten. Dazu dienten die Element-Volumenkristalle und die kristallinen Modifikationen TiSi (B27 oder AG) und V₃Si (A15) mit jeweils acht Atomen in der Einheitszelle, um adäquate Pseudopotentiale und Konvergenzparameter für realistische Validierungstests bereit zu stellen. Als Validierung und als Benchmark waren auch komplexere Kristallstrukturen wie TiSi₂ (C54 und C49, 12 Atome), VSi₂ (C40, 9 Atome) und Ti₅Si₃ oder V₅Si₃ (D8₈, 16 Atome) sowie amorphe Modifikationen zu berechnen. Dazu wer-

den - analog zum Vorgehen bei der Untersuchung von quasiperiodischen Strukturen - charakteristische Strukturelemente der amorphen Modifikation in größeren Superzellen periodisch wiederholt. Durch sukzessive Vergrößerung dieser periodischen Approximanten und durch Mittelung über verschiedene Konfigurationen sollen die Eigenschaften der ungeordneten, amorphen Struktur genähert beschrieben werden. Dabei müssen Eigenwertprobleme mit größeren Matrizen an wenigen k -Punkten gelöst werden, so dass diese Fragestellung es erlaubt, die Performance von Maschinen mit verteiltem Speicher und von *shared-memory*-Architekturen zu vergleichen.

2.3.2 Teilaufgabe “Ausgangsstruktur der Ti(0001)|Si(111)-Grenzfläche”

Ausgangs- und Referenzpunkte sind die Grenzflächen zwischen den Elementkristallen Si(111)/Ti(0001) und Si(111)/V(0001), sowie die Grenzflächen von Ti(0001) und V(0001) zu einer Modellstruktur für amorphes Silizium. Für diese Rechnungen werden Schichtmodelle in großen Superzellen periodisch wiederholt, und somit die Grenzflächen als unendlich ausgedehnte planare Defekte beschrieben. Da die meisten experimentell beobachteten Systeme dieses Typs die Festphasen-Amorphisierung durchlaufen, gibt es bislang wenige Daten zur Stabilität, zur lokalen geometrischen Struktur, oder zu den elektronischen Wechselwirkungen an dieser Grenzfläche. Daher müssen diese Daten aus molekularstatischen Modellrechnungen des Systems vor der Amorphisierung gewonnen werden. Neben den bereits erwähnten Aspekten geben diese Rechnungen auch Aufschluss über die Triebkraft der Strukturumwandlung. Mögliche Faktoren sind der Elektronegativitätsunterschied von Ti und Si, der eine Negativierung der Silizium-Ionen und damit eine Silizid-Bildung bevorzugt. Dem gegenüber steht die Fehlpassung der Gitterkonstanten von Silizium und Titan (oder Vanadium), welche ungünstige elastische Wechselwirkungen an der Grenzfläche induziert.

2.3.3 Teilaufgabe “Silizid-Bildung an der Ti(0001)|Si(111)-Grenzfläche”

Die Bildung der Niedertemperatur-Polytypen M_3Si und M_5Si_3 ($M = Ti, V$) kann mit Hilfe der Dichtefunktional-Molekulardynamik-Methode studiert werden. Dabei folgen die Kerne den klassischen Newton'schen Bewegungsgleichungen auf der Born-Oppenheimer-Oberfläche, die durch die quantenmechanische Wechselwirkung des Elektronensystems bestimmt ist. So kann mit Hilfe geeigneter Strukturmodelle untersucht werden, wie sich die relevanten Wechselwirkungsparameter, die Elektronegativität und die elastische Verspannung mit zunehmender Temperatur verändern, und abgewogen werden, welcher Faktor bei welcher Temperatur dominiert.

Da $TiSi_2$ und VSi_2 als Endstufe des Auslagerns im höheren Temperaturbereich (etwa 800 - 900 K) gebildet werden, sollten auch von diesen Polymorphen Grenzflächen zu Silizium bzw. zum jeweiligen Metall untersucht werden. Eine Erweiterung auf Grenzflächen mit den Niedertemperatur-Polytypen Ti_3Si , V_3Si , Ti_5Si_3 und V_5Si_3 wurde zunächst aufgrund des eng gesteckten Zeitrahmens des Teilprojekts nicht geplant, da die im Projektverlauf gesammelten Daten ausreichend sind, um aus dem Hochtemperaturverhalten auch auf den Temperaturbereich von 300 - 800 K Rückschlüsse zu erlauben.

2.3.4 Teilaufgabe “Verbessertes Load-Balancing der Parallelisierung über die Integrationsstützstellen”

Unter Verwendung periodischer Randbedingungen tritt bei der Berechnung der Gesamtenergie und der davon abgeleiteten Größen mit Hilfe des Kohn-Sham-Formalismus eine Integration über die erste Brillouin-Zone auf, welche durch Diskretisierung auf einem geeignet gewählten Gitter aus Integrationsstützstellen ausgewertet wird. Entscheidend ist dabei, dass hinreichend viele dieser Stützstellen, der k -Punkte, verwendet werden, und dass sie den reziproken Raum möglichst isotrop abdecken, um die Wechselwirkungen in allen drei Raumrichtungen genau und gleichmäßig zu beschreiben. Die konkrete Position dieser Stützstellen ist daher nicht direkt physikalisch motiviert, sondern bietet einen Ansatzpunkt für die Programoptimierung. In Standardverfahren für serielle Programme wurde versucht, eine optimale Integration mit möglichst wenigen dieser Stützstellen zu erreichen, da an jedem k -Punkt das zeitintensive Kohn-Sham-Eigenwertproblem gelöst werden muss. Die Wahl spezieller k -Punkte und dazu gehörender Gewichtungsfaktoren führt aber dazu, dass aus Symmetriegründen nicht an jeder Stützstelle gleich viele Basisfunktionen berücksichtigt werden müssen, so dass die Größe des Matrix-Eigenwertproblems im Extremfall an jeder Stützstelle anders ist. Bei der bislang seriell ausgeführten Berechnung stellt dies kein Problem dar, für die Verteilung der Brillouinzone-Integration auf verschiedene parallele Prozessoren ist es jedoch von Nachteil. Der Effizienzgewinn, der durch die gleichzeitige Behandlung mehrerer oder aller Stützstellen erzielt werden kann, wird in diesem Fall durch den k -Punkt mit dem größten zu lösenden Eigenwertproblem (oder der niedrigsten Symmetrie im reziproken Raum) dominiert. Für extrem heterogene parallele Architekturen kann dies ein Lösungsansatz für eine optimale Lastverteilungsstrategie sein. Für Cluster aus gleichen *shared-memory*-Maschinen muss jedoch die Rechenlast möglichst gleichmäßig auf die Clusterknoten verteilt werden. Mögliche Ansätze dafür sind Lastverteilungsalgorithmen über Taskeschlangen, wie sie im SFB entwickelt werden, oder die Wahl eines möglichst homogenen Stützstellennetzes, das noch die physikalischen Anforderungen hinsichtlich Dichte und isotroper Verteilung erfüllt.

2.3.5 Teilaufgabe “Parallelisierung über die Bänder”

Wie bereits in Teilaufgabe 2.3.4 beschrieben, ist an jeder der Integrationsstützstellen ein Matrix-Eigenwertproblem mit Hilfe eines Selbstkonsistenzverfahrens zu lösen, das die Gesamtenergie, die Kräfte auf die Kerne im Potential der Elektronen, aber auch das elektronische Spektrum in Kohn-Sham-Näherung liefert. Neben dem Index k für die Integrationsstützstelle tritt deshalb auch der Laufindex n auf, der die Energieeigenzustände bzw. Bänder durchzählt und die Größe des zu lösenden Eigenwertproblems bestimmt. Es bietet sich deshalb an, auch über diesen Index zu parallelisieren, wobei aufgrund des zu erwartenden hohen Kommunikationsaufwandes während des Selbstkonsistenzzyklus eine parallele Bearbeitung nur auf einer *shared-memory*-Maschine aussichtsreich erscheint.

2.3.6 Teilaufgabe “Alternative Parallelisierungsansätze”

Neben den beiden Parallelisierungsansätzen gibt es alternative Ansatzpunkte, insbesondere für die Parallelisierung für die *shared-memory*-Architektur. Da verschiedene Teile des physikalischen Problems im Orts- oder im Impulsraum gelöst werden, müssen die

Ergebnisse durch Fourier-Transformation miteinander verbunden werden. Deshalb ist zu prüfen, ob die lokale Parallelisierung der Fouriertransformation mit Hilfe der im SFB entwickelten parallelen Algorithmen eine bessere Effizienzsteigerung bewirkt als die Parallelisierung über den Bandindex. Eine Kombination der beiden alternativen Verfahren erscheint wegen des zusätzlichen Kommunikationsaufwandes nicht sinnvoll.

2.4 Ergebnisse

In der laufenden Förderperiode erfolgte die optimierende Parallelisierung des Pseudopotential-Bandstruktur-Programms, das für die Berechnung der strukturellen und elektronischen Eigenschaften der Metall-Halbleiter-Grenzflächen eingesetzt wird. So kann auch die Gitterfehlpassung, die durch die unterschiedlichen Gitterkonstanten von Titan bzw. Vanadium und Silizium an der $M(0001)|Si(111)$ -Grenzfläche auftritt, adäquat mit großen Superzellen mit vertretbarem numerischem Aufwand modelliert werden. Dazu wurde die in den numerischen Algorithmen des Programms vorliegende mehrstufige Parallelität über die Stützstellen bei der k -Raum-Integration, über die Bänder und bei der Fouriertransformation zwischen Orts- und Impulsraum genutzt.

2.4.1 Teilaufgabe “Binäre kristalline und amorphe Modifikationen”

Zunächst wurden die strukturellen und elektronischen Eigenschaften der verschiedenen Silizid-Modifikationen in Analogie zu früher publizierten Daten reproduziert [g03a, g03b, gcs03a, gcs03b]. Diese Ergebnisse sind die Referenzdaten für die Berechnung der Grenzflächenstabilität sowie weiterer thermodynamischer Größen bei der grenzflächeninduzierten Silizidbildung. Sie dienen aber auch für die Parametrisierung eines einfachen tight-binding-Modells, mit dem ein schneller, qualitativer Zugang zu Approximanten für die amorphen Modifikationen und zum Hochtemperaturverhalten der Volumenkristalle erschlossen wurde [gcs04b, gcs03b, g03a, g03b, g03c]. Damit konnten mehrere Piko-sekunden lange Trajektorien für den strukturellen Phasenübergang von der elektrisch schlechter leitenden C49-Modifikation des $TiSi_2$ zur gewünschten, gut leitenden C52-Modifikation bei erhöhten Temperaturen simuliert werden [GCS04, gcs04a, gcs04b]. Dieser Phasenübergang ist unter Parinello-Rahman-Randbedingungen mit einer geringfügigen Veränderung der Gitterparameter verbunden. Die relevanten Abschnitte der Trajektorien werden zur Zeit mit Hilfe des Dichtefunktional-Bandstrukturprogramms nachgerechnet, so dass eine Mittelwertbildung auf voller Dichtefunktional-Basis erhalten wird. Diese Arbeiten sind thematisch eingebettet in Untersuchungen zur Strukturbildung und Thermodynamik in binären Mischverbindungen. So konnte z.B. auch gezeigt werden, dass sich das Mischungsverhalten binärer Verbindungen auf der Nanometerskala grundlegend von den Verhältnissen im ausgedehnten Volumenkristall unterscheidet [GS03b, GSS04, gss04a, gss04b, gss04c, g03a]. In einem Hauptgruppen-Silizid der gleichen Stöchiometrie wie die hier relevanten Verbindungen, dem $CaSi_2$, wurde ferner nachgewiesen, dass sich das Zintl-Konzept der Strukturbildung auch auf Nanostrukturen übertragen lässt [GS03a, gs03a, gs03b, gs03c].

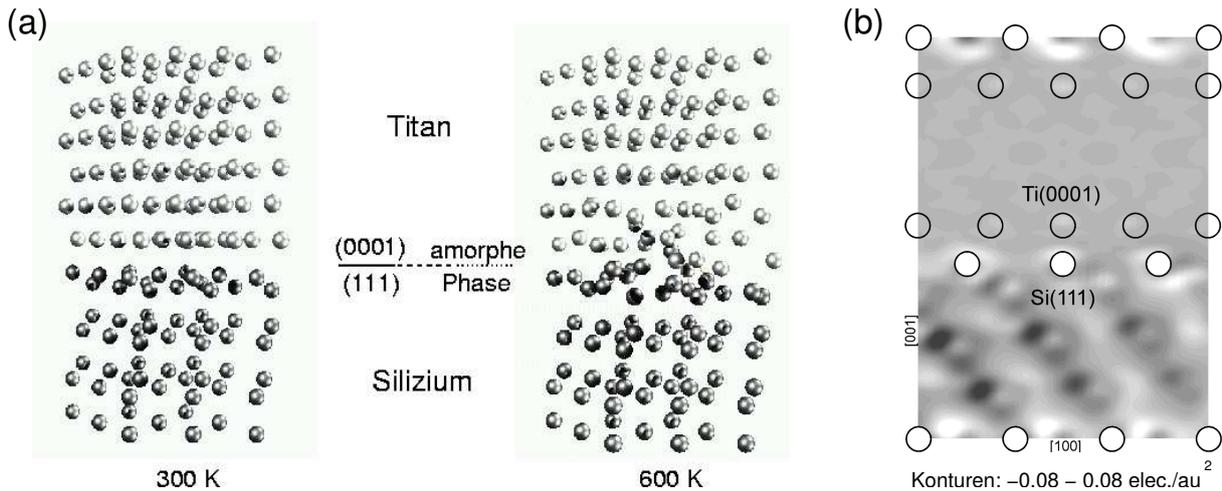


Abbildung 2.1: Das Grenzflächensystem Ti(0001)|Si(111): (a) Schematischer Aufbau des Modellsystems und erste Schritte der temperatur-induzierten Silizidbildung. (b) Bindungsladungsdichte vor der Grenzflächenreaktion in einer Schmittebene parallel zur [100]-Richtung des Si, in der sich die meisten bindenden Titan-Silizium-Kontakte ergeben. Abgebildet ist die Differenz der Elektronendichte des Gesamtsystems, die 17 Konturlinien reichen von -0.08 bis $+0.08$ e^-/bohr^2 . Dunkle Bereiche entsprechen einer Elektronenverarmung, helle einer Elektronenanreicherung.

2.4.2 Teilaufgabe “Ausgangsstruktur der Ti(0001)|Si(111)-Grenzfläche”

Darauf aufbauend wurden Dichtefunktional-Bandstruktur-Rechnungen zu Superzellen durchgeführt, welche die Grenzfläche Ti(0001)|Si(111) vor, während und nach der Silizidbildung repräsentieren. Aufgrund der Gitterfehlpassung zwischen Titan ($a_0 = 2.95$ Å) und Silizium ($a_0 = 3.85$ Å) beinhalten gleiche Bereiche der Ti(0001)- und Si(111)-Oberflächen eine unterschiedliche Anzahl an Atomen mit einem Verhältnis von Ti : Si von etwa 16 : 9. Deshalb wurden Superzellen gewählt, welche parallel zur Grenzfläche $4 a_0(\text{Ti}) \approx 3 a_0(\text{Si})$ groß sind und senkrecht dazu sechs Lagen Titan und acht Lagen Silizium (in vier Doppellagen) enthalten (siehe Abbildung 2.1). Vor der Silizidbildung beträgt die Energie der reinen Grenzfläche nur 0.28 J/m^2 [GS04, gcs04a, g04, gcs03a, gcs03b, g03a]. Dies deutet darauf hin, dass die Wechselwirkung vor der Grenzflächenreaktion nur schwach attraktiv ist und von den wenigen direkten Ti-Si-Bindungen vermittelt wird. Für ein kleineres Superzell-Modell, bei dem starke expansive Kräfte auf Silizium und kontraktive Kräfte auf Titan wirken, ist das System sogar nichtbindend [gcs03b]. Diese Befunde stehen im Einklang mit früheren Dichtefunktional-Untersuchungen zur Titan-Spinell-Grenzfläche, an der ohne strukturelle Relaxation die korrosive Oxidation der Titanschicht schon für niedrige Sauerstoffgehalte ein Versagen der Grenzfläche prognostiziert wird, welches - neben elektronischen Faktoren - wie an der Titan-Silizium-Grenzfläche auf ungünstige elastische Wechselwirkungen zurückzuführen ist. [EK01, KE01, gsc03, cgs02, ge01].

Die Geometrieoptimierung der Grenzfläche führt zu einer Verbiegung der Titan-Ebene an der Grenzfläche um 0.09 Å. Durch diese Deformation gleichen sich die Ti-Si-Abstände

für die verschiedenen Adhäsionsplätze an der Grenzfläche einander an, so dass sie im Intervall 2.6 bis 2.7 Å liegen. Die Siliziumlage an der Grenzfläche zeigt hingegen keine signifikante Aufrauung, aber der Abstand zur darunterliegenden Siliziumlage ist um 0.21 Å vermindert. Dadurch bilden die beiden Siliziumlagen zusammen nicht mehr einen idealen Cyclohexyl-artigen Ausschnitt aus dem Diamantgitter, sondern eine leicht abgeflachte gewellte Sechseckstruktur, die auch in schichtartigen Siliziden wie CaSi_2 vorliegt [GS03a]. Dadurch kommen die in den Lücken der ersten Siliziumlage stehenden Si-Atome der zweiten Lage in näheren Kontakt mit der Titanschicht und können sich an der Wechselwirkung mit dem Titan beteiligen [GS04, gcs04a, g04, gcs03a].

Die Differenz der Elektronendichte des Gesamtsystems und der der Überlagerung der Dichten der beiden einzelnen Teilschichten ist ebenfalls in Abbildung 2.1 gezeigt. Der Schnitt entlang der [100]-Richtung, in der sich die meisten Titan-Silizium-Kontakte bilden, zeigt, dass die Titanschicht von der Wechselwirkung mit dem Silizium nur im unmittelbaren Bereich der Grenzfläche betroffen ist, während in der mittleren Titanlage vollständige Abschirmung auftritt. Im halbleitenden Silizium ist die Abschirmung weniger stark, so dass die Elektronenanhäufung an den Si-Atomen der Grenzfläche (im Bild: helle Bereiche) eine etwas weiterreichende Ladungsumordnung in der darunterliegenden Schicht verursacht. Insgesamt bestätigt die Analyse der elektronischen Struktur aber eine Tendenz zur Silizidbildung durch die Elektronegativitätsunterschiede der beteiligten Komponenten [GS04, gcs04a, g04, gcs03a].

2.4.3 Teilaufgabe “Silizid-Bildung an der Ti(0001)|Si(111)-Grenzfläche”

Dichtefunktional-Molekulardynamik-Simulationen auf der Born-Oppenheimer-Hyperfläche zeigten ferner, dass sich an der Grenzfläche amorphe Strukturen bei Temperaturen ausbilden, bei denen die Volumenkristalle noch nicht schmelzen (siehe Abbildung 2.1). Die Grenzflächenreaktion führt zu einer Angleichung und Reduktion der Komponenten des elastischen Spannungstensors, durch den die Fehlanpassung ausgeglichen wird. Durch diesen Vorgang erhöht sich die Bindungsenergie signifikant auf 0.52 J/m². Im Einklang mit experimentellen Befunden wurde beobachtet, dass Silizium die mobilere Spezies an der Grenzfläche ist. Vorläufige Ergebnisse für die Grenzflächen Ti—TiSi₂—Si lassen darauf schließen, dass die für Kobalt berechnete Stabilisierung durch Silizidbildung auch bei Titan erfolgt [gcs04a, g04, gcs04b].

2.4.4 Teilaufgabe “Verbessertes Load-Balancing der Parallelisierung über die Integrationsstützstellen”

Durch den Programmablauf und die Datenstruktur bedingt, erfordert die Parallelisierung über die k -Punkte weniger Informationsaustausch zwischen parallelen Knoten als die Parallelisierung über die Bänder, die pro k -Punkt anfällt. Deshalb wurde die eingangs beschriebene Strategie verfolgt, nur die k -Punkt-Parallelisierung für Maschinen mit verteiltem Speicher vorzusehen, und für die zweite Stufe Mehrprozessor-Rechner mit gemeinsamem Speicher einzusetzen. Außerdem sollte zunächst davon ausgegangen werden, dass die verschiedenen Parallelknoten von gleichem Typ sind, so dass die Optimierung des Programms auf eine möglichst gleichmäßige Verteilung der Rechenlast hinausläuft.

Für die k -Punkt-Parallelisierung war dies auf einfache Weise möglich, indem gemäß den Arbeiten von Moreno und Soler die k -Punkt-Netze möglichst gut gleichverteilt gewählt wurden. Dabei wird eine Basistransformation der dreidimensional periodisch wiederholten Superzelle durchgeführt, so dass die dazu komplementäre Zelle im Impulsraum Basisvektoren hat, die möglichst genau ganzzahlige Vielfache einer Einheitslänge sind. Dies führt zu einem effizienten Sampling des Impulsraumes mit wenigen Stützstellen, da Wechselwirkungen in allen drei Raumrichtungen gleich gut beschrieben werden und nicht die Richtung mit dem schlechtesten Sampling die numerische Genauigkeit des Verfahrens vorgibt. Für die hier zu lösende Optimierungsaufgabe bietet das gleichverteilte Sampling aber auch noch den Vorteil, dass die Eigenwertgleichungen, die pro k -Punkt zu lösen sind, in etwa gleich große Matrizen beinhalten. Damit ist die Forderung nach einer möglichst gleichmäßigen Verteilung der Rechenlast für den Einsatz von homogenen Architekturen erfüllt. Die zusätzliche Implementation von Lastverteilungsalgorithmen ist deshalb für diese Stufe der Parallelisierung auf homogenen Rechnerclustern nicht erforderlich gewesen.

2.4.5 Teilaufgabe “Parallelisierung über die Bänder”

Die Parallelisierung über den Bandindex wurde vorerst zurückgestellt. Eine Analyse der Daten- und Kommunikationsstruktur zusammen mit den Projektpartnern aus der Informatik zeigte, dass die Parallelisierung der Fourier-Transformation der vielversprechendere Ansatz für die lokale Parallelisierung innerhalb eines *shared-memory*-Knotens ist.

2.4.6 Teilaufgabe “Alternative Parallelisierungsansätze”

Für die zweite Stufe der Parallelisierung der Fourier-Transformation werden derzeit verschiedene Algorithmen zusammen mit den Projektpartnern aus der Fakultät für Informatik erprobt.

Literaturverzeichnis

- [EK01] C. Elsässer, S. Köstlmeier. Oxidative corrosion of adhesive interlayers. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 3:5140–5144, 2001.
- [GCS04] S. Gemming, I. Chaplygin, M. Schreiber. High-temperature behaviour of metal-semiconductor interfaces. eingereicht bei *Phys. Rev. B*.
- [GS03a] S. Gemming, G. Seifert. Nanotube Bundles from Calcium Disilicide - a DFT study. *Phys. Rev. B* 68:075416-1-7, 2003.
- [GS03b] S. Gemming, M. Schreiber. Alloying in mixed $\text{Ag}_n\text{Au}_{1-n}$ Nanowires. *Z. Metallkd.* 75:213–218, 2003.
- [GS04] S. Gemming, M. Schreiber. Density-functional study of the $\text{Ti}(0001)|\text{Si}(111)$ interface. eingereicht bei *J. Phys.: Condens. Matter*.
- [GSS04] S. Gemming, G. Seifert, M. Schreiber. Density-functional study of alloyed AgAu and PdAu nanowires. *Phys. Rev. B* 68:096424-1-7, 2004.

- [KE01] S. Köstlmeier, C. Elsässer. Influence of interfacial excess oxygen on the adhesion energetics at metal/oxide heterophase boundaries. *Trans. JWRI* 30:251–256, 2001.

Beiträge zu wissenschaftlichen Veranstaltungen:

- [cgs02] I. Chaplygin, S. Gemming, M. Schreiber. Oxidation of thin Ti films. EuroConference “Interfaces”, Kloster Irsee, 08/02.
- [g02] S. Gemming. DFT for Interfaces. Seminar of the Materials Research Laboratory, U. C. Santa Barbara, Santa Barbara (CA), U.S.A., 09/02.
- [g03a] S. Gemming. Density-functional investigations for systems with reduced dimensionality. Seminar “Quantum Chemistry”, MPI-PKS Dresden, 10/03.
- [g03b] S. Gemming. Band structure calculations for novel materials. Seminar Physikalische Chemie und Elektrochemie, TU Dresden, 07/03.
- [g03c] S. Gemming. Theoretische Untersuchungen zu inneren Grenzflächen. Physikalisches Kolloquium, TU Chemnitz, 05/03.
- [g04] S. Gemming. DFT investigation of the Ti-Si heterophase boundary. Workshop “Modelling and Simulation in Molecular Systems, Mesoscopic Structures, and Material Science”, TU Chemnitz, 04/04.
- [gcs03a] S. Gemming, I. Chaplygin, M. Schreiber. Phase Formation at the Silicon-Titanium Interface. Workshop Physik-Kolloquium, Universität Chouaib Doukkali, El-Jadida, Marokko, 10/03.
- [gcs03b] S. Gemming, I. Chaplygin, M. Schreiber. Phase Transformations at the Silicon-Titanium Interface. EuroConference on Interfaces in Nanostructured Materials - Moving Interfaces, Kloster Irsee, 08/03.
- [gcs04a] S. Gemming, I. Chaplygin, M. Schreiber. Reactive Metal-Semiconductor Interfaces. 103. Bunsen-Tagung, Dresden, 05/04.
- [gcs04b] S. Gemming, I. Chaplygin, M. Schreiber. Structure and reactivity at the Titanium-Silicon interface. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Regensburg, 03/04.
- [ge01] S. Gemming, C. Elsässer. Oxidative Corrosion of Ti-Interlayers. 100. Bunsentagung, Stuttgart, 05/01.
- [gs03a] S. Gemming, G. Seifert. DFT study of bundles from calcium disilicide. Conference on Functional Nanostructures, CFN Karlsruhe, 10/03.
dito: 17th International Winterschool on the Electronic Structure of Novel Materials. Kirchberg/Tirol, Österreich, 03/03.
- [gs03b] S. Gemming, M. Schreiber. Alloying on the Nanoscale. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Dresden, 03/03.
- [gs03c] S. Gemming, G. Seifert. Metallic MX₂ tubes. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Dresden, 03/03.

- [gsc03] S. Gemming, M. Schreiber, I. Chaplygin. Initial oxidation stages in thin titanium films. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Dresden, 03/03.
- [gss04a] S. Gemming, M. Schreiber, G. Seifert. DFT Investigation of Binary Nanostructures. 103. Bunsen-Tagung, Dresden, 05/04.
- [gss04b] S. Gemming, G. Seifert, M. Schreiber. DFT investigations of alloyed binary nanostructures. 18th International Winterschool on the Electronic Structure of Novel Materials. Kirchberg/Tirol, Österreich, 03/04.
- [gss04c] S. Gemming, G. Seifert, M. Schreiber. Density-functional study of alloyed nanowires. 13th International Winterschool on New Developments in Solid State Physics, Mauterndorf, Österreich, 03/04.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

In der laufenden Förderperiode wurden die mikroskopischen Mechanismen aufgeklärt, welche zur Ausbildung amorpher und kristalliner Modifikationen an reaktiven Metall-Halbleiter-Grenzflächen führen. Diese Ergebnisse zu Struktur und Thermodynamik dienen als Ausgangspunkt für die weitergehende Untersuchung des elektronischen Transports über Metall-Halbleiter-Grenzflächen. Konkret sollen für das System $\text{Ti}(0001)|\text{Si}(111)$ drei, teilweise komplementäre theoretische Ansätze verfolgt werden: die Dichtefunktional-Störungstheorie, mit der die Antwort des Systems auf ein externes elektrisches Feld oder auf die Verschiebung von Atompositionen berechnet werden kann, die Beschreibung der Zweiteilchen-Streuung am Grenzflächenpotential durch die Lösung der entsprechenden Bethe-Salpeter-Gleichung und ein Verfahren zur Wellenpaket-Dynamik auf den bereits berechneten Potentialhyperflächen, mit dem der Einfluss des phononischen Hintergrunds auf den Elektronentransport modelliert werden kann.

Mit diesen Untersuchungen sollen drei experimentelle Beobachtungen erklärt werden, welche für die Anwendung von frühen Übergangsmetallen als Haftvermittler an mikro- und nanoelektronischen Gold-Silizium-Kontakten von Bedeutung sind: Warum zeigt nur eine der beiden niederenergetischen kristallinen Modifikationen des TiSi_2 einen geringen Kontaktwiderstand und wie verändert sich der Widerstand, wenn (pseudo-)amorphe Strukturen an der Grenzfläche vorliegen? Wie verstärken Dotieratome wie Niob den Transport über die Grenzfläche? Und wie verändert sich der Transport, wenn anstelle von Titan eine Vanadiumlage verwendet wird, bei der ebenfalls Silizidbildung erfolgt? Für Rechnungen mit der Dichtefunktional-Störungstheorie soll das Bandstrukturprogramm eingesetzt werden, dessen Parallelisierung in der laufenden Förderperiode für homogene Architekturen erfolgt ist, und dessen weitergehende Optimierung für komplexere Rechner-Architekturen in Zusammenarbeit mit den Teilprojekten aus der Informatik geplant ist. Für die anderen Ansätze sollen in der Arbeitsgruppe entwickelte, zum Teil parallele Routinen adaptiert und auf eine weitere Parallelisierbarkeit getestet werden.

Teilprojekt

C8

Langzeitverhalten großer dynamischer Systeme

2.1 Teilprojekt C8

Langzeitverhalten großer dynamischer Systeme

2.1.1 Antragsteller

| | | |
|---|--|---|
| Prof. Dr. G. Radons 16.08.1953 | PD. Dr. W. Just 19.06.1962 ehemals | PD. Dr. A. Latz 06.02.1962 ehemals |
| Theoretische Physik I (Komplexe Systeme und Nichtlineare Dynamik) | Theoretische Physik I (Komplexe Systeme und Nichtlineare Dynamik) | Theoretische Physik I (Komplexe Systeme und Nichtlineare Dynamik) |
| Fak. für Naturwiss. TU Chemnitz 09107 Chemnitz Tel.: (0371) 531-3205 Fax: (0371) 531-3233 radons@physik. tu-chemnitz.de | Fak. für Naturwiss. TU Chemnitz 09107 Chemnitz (0371) 531-3040 (0371) 531-3233 just@physik. tu-chemnitz.de | Fak. für Naturwiss. TU Chemnitz 09107 Chemnitz (0371) 531-3292 (0371) 531-3233 arnulf.latz@physik. tu-chemnitz.de |

Wegen der derzeitigen hochschulpolitischen Situation, die insbesondere für den wissenschaftlichen Nachwuchs starke Unwägbarkeiten mit sich bringt, sahen sich zwei der Antragsteller, die auf zeitlich befristeten Stellen eingestellt waren, gezwungen, vorzeitig aus dem SFB auszuschneiden. Um den neuen Beschränkungen, die das 5. Hochschulrahmengesetz mit sich brachte, zu entgehen, wurde das Arbeitsverhältnis mit PD Dr. Arnulf Latz im gegenseitigen Einverständnis noch vor Ablauf des Jahres 2001 aufgehoben. Herr Dr. Latz konnte daraufhin eine längerfristige Anstellung am Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik, Kaiserslautern, antreten. Ebenfalls vorzeitig und im gegenseitigen Einverständnis wurde das Arbeitsverhältnis mit PD Dr. Wolfram Just Ende September 2003 aufgehoben, der daraufhin eine unbefristete Stelle als Lecturer im Bereich Applied Mathematics am Queen Mary College der University of London antreten konnte. Beide Projektleiter standen und stehen weiterhin beratend zur Verfügung.

2.1.2 Projektbearbeiter

Prof. Dr. Günter Radons
PD Dr. Wolfram Just
PD Dr. Arnulf Latz
Dr. Hongliu Yang
Dr. Benno Rumpf (seit 1/2004)
Dipl. Phys. Christian Drobniowski (seit 4/2004)
Dipl. Phys. Andreas Fichtner (seit 11/2003)
Prof. Dr. Gudula Rünger (Informatik, B8)
Michael Schwind (Informatik, B8)

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Die Theorie der nichtlinearen Dynamik verknüpft deterministische Bewegungsgleichungen mit chaotischen, scheinbar stochastischen Phänomenen. Für einfache niedrigdimensionale Systeme lässt sich eine statistische Beschreibung aus dynamischen Eigenschaften ohne probabilistische Annahmen begründen. Ergodisches und mischendes Verhalten und der Zerfall von Zeitkorrelationen lassen sich dabei aus der dynamischen Instabilität von Trajektorien herleiten [K79]. Während niedrigdimensionale Systeme auf diese Weise intensiv untersucht worden sind [ER85], ist das Verständnis von hochdimensionalen Systemen noch immer unzureichend [CH].

Das langfristige Ziel dieses Teilprojekts ist es, ein tieferes Verständnis statistischer Prozesse in hochdimensionalen Systemen mit Mitteln der nichtlinearen Dynamik zu erhalten. Dabei wird eine Verbindung zwischen dem Lyapunov-Spektrum und den Lyapunov-Vektoren, die mikroskopisch die Instabilitäten charakterisieren, und den makroskopischen Systemeigenschaften wie den Transportkoeffizienten gesucht. Die Gaussche Thermostatenmethode von Nosé, Hoover, Evans, Morriss et al. [E90, H91, H99] und einige Arbeiten von Gaspard und Nicolis [G98, D99] konnten einen derartigen Zusammenhang bereits nachweisen.

Unser besonderes Interesse gilt dabei glasartigen Zuständen [A95, DS01], die trotz ihrer praktischen Relevanz immer noch nicht ausreichend verstanden sind [M01]. Dabei erwarten wir insbesondere durch numerische nichtlineare Stabilitätsanalysen neue Einsichten. Wir untersuchen die binäre Lennard-Jones-Mischung, die als der Prototyp für die Simulation der molekularen Dynamik von Gläsern gelten kann [K95, K96, K00, S96, DST00]. Wir erwarten dabei, dass Unordnungsphänomene am Glasübergang, sowie auch Alterungsprozesse von Gläsern im Lyapunov-Spektrum und in den Lyapunov-Vektoren der mikroskopischen Dynamik erkennbar sind.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

2.3.1 Nichtlineare und molekulare Dynamik

Mit molekulardynamischen Methoden lassen sich die Struktur und die Dynamik von unterkühlten Flüssigkeiten und Gläsern untersuchen [AT87]. Dabei werden die Newtonschen Bewegungsgleichungen der Atome numerisch integriert. Trotz der im Vergleich zu realen Systemen kleinen Zahl N von Atomen und der relativ kurzen Simulationszeit lassen sich dadurch analytisch nicht zugängliche Eigenschaften ermitteln. Die Lyapunov-Exponenten sind hierbei das wichtigste Mittel zur Charakterisierung der chaotischen Dynamik.

Molekulardynamische Simulationen für den Glasübergang in einem d -dimensionalen Lennard-Jones-System mit N Teilchen ($N = 100 - 1000$) sollten in diesem Projektteil durch eine Lyapunov-Analyse der Instabilitäten ergänzt werden. Die effizienteste Methode zur Berechnung von Lyapunov-Exponenten und Lyapunov-Vektoren in hochdimensionalen Systemen stammt von Benettin und Shimada [BGS76, SN79]. Dabei werden $2dN * 2dN$ lineare und $2dN$ nichtlineare gewöhnliche Differentialgleichungen simultan integriert, um die Dynamik der $2dN$ Tangentialraumvektoren und der Trajektorie zu gewinnen.

Zur Berechnung der Lyapunov-Exponenten und Vektoren müssen die Vektoren periodisch orthogonalisiert werden. Das geschieht entweder mit dem Gram-Schmidtschen

Orthogonalisierungsverfahren oder durch eine QR-Zerlegung. Die Ergebnisse werden anschließend der Integrationsroutine der Molekulardynamik übergeben, die den Ausgangspunkt der nächsten Orthogonalisierung liefert. Die Simulation auf hinreichend langen Zeitskalen erfordert die Implementierung des Algorithmus auf einem Parallelrechner. Die wiederholte Orthogonalisierung benötigt dabei den größten Teil der Rechenzeit und erfordert bei der Programmentwicklung besondere Sorgfalt. Außerdem erfordert in einem Cluster von Rechnern der wiederholte Wechsel zwischen der Orthogonalisierungs- und der Integrationsroutine zusätzliche Anstrengungen in Bezug auf Zuweisung von Rechenzeit und Speicherkapazität. Die Parallelimplementierung des Programms sollte deshalb in Zusammenarbeit mit Projekt B8 durchgeführt werden. Dieses Programm konnte erfolgreich umgesetzt werden

Jedem der Lyapunov-Exponenten ist ein zeitabhängiger Lyapunov-Vektor zugeordnet [O68]. Abgesehen von einigen frühen Untersuchungen [PPP84, GP91, PP98, PEME00, MPH98] wurde dieses zustandsabhängige orthogonale Vektorsystem lange Zeit lediglich als Hilfsmittel zur Berechnung von Lyapunov-Spektren angesehen. Dass diese Größen interessante strukturelle und dynamische Informationen enthalten, ist erst neuerdings entdeckt worden [PH00, FHPH04, H02], allerdings waren diese Resultate auf Hartkugelsysteme beschränkt. Erst durch Einführung einer neuen Methode, die statische und dynamische Korrelationen der Dichtefluktuationen der Lyapunov-Vektoren bestimmt, konnte eine Kontroverse zur Existenz hydrodynamischer Lyapunov-Moden in Soft-Potential-Systemen [PH00, FHPH04, H02] gelöst werden. Diese von uns eingeführten Korrelationsfunktionen stellen ein wesentliches Werkzeug für die getätigten und noch anstehenden Untersuchungen dar.

2.3.2 Entwicklung raum–zeitlicher Dynamik nach periodischen Orbits, Altern und anomaler Transport

Die Idee dieses Projektteils bestand darin, die Möglichkeiten der Periodic-Orbit-Theorie an einfachen Modellsystemen auszuloten und das anomale Zeitverhalten ungeordneter dynamischer Systeme zu untersuchen. Diese Untersuchungen an idealisierten Systemen sollten die Forschungsergebnisse der viel komplexeren nichtlinearen Dynamik von monoatomaren und binären Lennard-Jones-Flüssigkeiten von einer komplementären Seite beleuchten und ergänzen. Die zu untersuchenden Modellsysteme sind durch ungeordnete iterierte Abbildungen gegeben. In Spezialfällen, für die Markov-Partitionen existieren, können diese Modelle auf bekannte Systeme der Statistischen Mechanik abgebildet werden. Von Letzteren ist bekannt, dass sie Nichtgleichgewichtsphänomene wie Altern und anomalen Transport zeigen. Im Rückschluss gilt dies auch für die zugeordneten dynamischen Systeme, und darüber hinaus für eine noch viel größere, noch nicht klar definierte Klasse von dynamischen Systemen, die nicht notwendigerweise Markov-Partitionen besitzen. Dieser letzte Punkt ist allerdings bisher kaum untersucht worden. Wegen der Wichtigkeit dieser Nichtgleichgewichtsphänomene ist jedoch ein tiefergehendes Verständnis gefragt und sollte in diesem Projektteil erarbeitet werden.

Literaturverzeichnis zu 2.3 (eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

- [A95] C. A. Angell, Formation of Glasses from Liquids and Biopolymers, *Science*, **267**, 1924-1935 (1995); P. Debenedetti, *Metastable liquids* (Princeton University Press, Princeton, 1997).
- [AT87] M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer simulation of liquids* (Clarendon Press, Oxford 1987).
- [BGS76] G. Benettin, L. Galgani and J. M. Strelcyn, Kolmogorov Entropy and Numerical Experiments, *Phys. Rev. A* **14**, 2338-2345 (1976).
- [CH] M.C. Cross und P.C. Hohenberg, Pattern Formation outside of Equilibrium, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 851-1112, 1993.
- [D99] J.P. Dorfman, *An Introduction to Chaos in Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
- [DS01] P.G. Denenedetti and F.H. Stillinger, Supercooled Liquids and the Glass Transition, *Nature* **410**, 259-267 (2001).
- [DST00] C. Donati, F. Sciortino, and P. Tartaglia, Role of Unstable Directions in the Equilibrium and Aging Dynamics of Supercooled Liquids, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1464-1467 (2000).
- [E90] D.J. Evans, G.P. Morriss, *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Liquids* (Academic, New York, 1990).
- [ECM90] D.J. Evans, E.G.D. Cohen and G.P. Morriss, Viscosity of a Simple Fluid from its Maximal Lyapunov Exponents, *Phys. Rev. A* **42**, 5990-5997 (1990).
- [EG00] J.-P. Eckmann and O. Gat, Hydrodynamic Lyapunov Modes in Translation-Invariant Systems, *J. Stat. Phys.* **98**, 775-798 (2000).
- [ER85] J.-P. Eckmann, D. Ruelle, Ergodic Theory of Chaos and Strange Attractors, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 617-656 (1985); E. Ott, *Chaos in Dynamical Systems* (Cambridge University Press, Cambridge 1993).
- [FHPH04] Ch. Forster, R. Hirschl, H.A. Posch and Wm.G. Hoover, Perturbed Phase-space Dynamics of Hard-disk Fluids, *Physica D* **187**, 294-310 (2004).
- [G98] P. Gaspard, *Chaos, Scattering, and Statistical Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1998).
- [GLS94] W. Gropp, E. Lusk, and A. Skjellum, *Using MPI: Portable Parallel Programming with the Message Passing Interface* (MIT Press, Cambridge, 1994).
- [GP91] G. Giacomelli and A. Politi, Spatio-temporal Chaos and Localization, *Europhys. Lett.* **15**, 387-392 (1991).
- [H91] Wm.G. Hoover, *Computational Statistical Mechanics* (Elsevier, New York, 1991).
- [H99] Wm.G. Hoover, *Time Reversibility, Computer Simulation, and Chaos* (World Scientific, Singapore, 1999).
- [H02] Wm.G. Hoover et al., Lyapunov Modes of Two-Dimensional Many-Body Systems; Soft Disks, Hard Disks, and Rotors, *J. Stat. Phys.* **109**, 765-776 (2002).

- [K79] N.S. Krylov, *Works on the Foundations of Statistical Mechanics* (Princeton University Press, Princeton, 1979).
- [K95] W. Kob and H.C. Andersen, Testing Mode-coupling Theory for a Supercooled Binary Lennard-Jones Mixture I: the van Hove Correlation Function, *Phys. Rev. E* **51**, 4626-4641 (1995).
- [K96] W. Kob, C. Donati, S. J. Plimpton, P. H. Poole and S. C. Glotzer, Dynamical Heterogeneities in a Supercooled Lennard-Jones Liquid, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2827-2830 (1997).
- [K00] W. Kob, Supercooled Liquids and Glasses, p.249-277 in M.E. Cates and M.R. Evans (Hrsg.), *Soft and Fragile Matter, Nonequilibrium Dynamics, Metastability and Flow* (Institute of Physics, London, 2000).
- [KY79] J. Kaplan and J. A. Yorke, Chaotic Behavior of Multidimensional Difference Equations, in *Functional Differential Equations and Approximation of Fixed Points*, Springer Lecture Notes in Mathematics **730**, p.204-227 (1979).
- [M01] M. Mézard, Statistical Physics of the Glass Phase, arXiv: cond-mat/0110363.
- [MNM01] S. McNamara and M. Mareschal, Origin of the Hydrodynamic Lyapunov modes, *Phys. Rev. E* **64**, 051103-1-14 (2001); M. Mareschal and S. McNamara, Lyapunov Hydrodynamics in the Dilute Limit, *Physica D* **187**, 311-325 (2004).
- [MPH98] Lj. Milanović, H.A. Posch, and Wm.G. Hoover, Lyapunov Instability of Two-dimensional Fluids: Hard Dumbbells, *Chaos* **8**, 455-461 (1998).
- [O68] V.I. Oseledec, A Multiplicative Ergodic Theorem: Ljapunov Characteristic Numbers for Dynamical Systems, *Trans. Mosc. Math. Soc.* **19**, 197-231 (1968).
- [P04] H.A. Posch, talk given at DPG-Frühjahrstagung; Regensburg, 8-12 March 2004, Ch. Forster and H.A. Posch, in preparation.
- [PEME00] W. Pesch, D.A. Egolf, I.V. Melnikov and R.E. Ecke, Mechanism of Extensive Spatiotemporal Chaos in Rayleigh-Bénard Convection, *Nature* **404**, 733-736 (2000).
- [PF04] H.A. Posch, Ch. Forster, in *Collective Dynamics of Nonlinear and Disordered Systems*, p.309-346, Eds. G. Radons, W. Just, and P. Häussler (Springer, Berlin, 2004), in print.
- [PH88] H.A. Posch and Wm.G. Hoover, Lyapunov Instability of Dense Lennard-Jones Fluids, *Phys. Rev. A* **38**, 473-482 (1988).
- [PH00] H.A. Posch and R. Hirschl, Simulation of Billiards and of Hard Body Fluids, p.269-314, in *Hard Ball Systems and the Lorentz Gas*, EMS Vol. **101**, Ed. D. Szasz (Springer, Berlin, 2000).
- [PP98] A. Pikovsky and A. Politi, Dynamic Localization of Lyapunov Vectors in Space-time Chaos, *Nonlinearity* **11**, 1049-1062 (1998); A. Pikovsky and A. Politi, Dynamic Localization of Lyapunov Vectors in Hamiltonian Lattices, *Phys. Rev. E* **63**, 036207-1-9 (2001).
- [PPP84] Y. Pomeau, A. Pumir, and P. Pelce, Intrinsic Stochasticity with Many Degrees of Freedom, *J. Stat. Phys.* **37**, 39-49 (1984); K. Kaneko, Lyapunov Analysis and Information Flow in Coupled Map Lattices, *Physica D* **23**, 436-447 (1986).

- [S96] S. Sastry, Lyapunov Spectra, Instantaneous Normal Mode Spectra, and Relaxation in the Lennard-Jones Liquid, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3738-3742 (1996).
- [SN79] I. Shimada and T. Nagashima, A Numerical Approach to Ergodic Problem of Dissipative Dynamical Systems, *Prog. Theor. Phys.* **61**, 1605-1616 (1979).
- [TM02] T. Taniguchi and G.P. Morriss, Stepwise Structure of Lyapunov Spectra for Many-Particle Systems using a Random Matrix Dynamics, *Phys. Rev. E* **65**, 056202-1-15 (2002).
- [TM03a] T. Taniguchi and G.P. Morriss, Boundary Effects in the Stepwise Structure of the Lyapunov Spectra for Quasi-one-dimensional Systems, *Phys. Rev. E* **68**, 026218-1-18 (2003).
- [TM03b] T. Taniguchi and G.P. Morriss, Localized Behavior in the Lyapunov Vectors for Quasi-one-dimensional Many-hard-disk Systems, *Phys. Rev. E* **68**, 046203-1-22 (2003).
- [WB] A.S. de Wijn and H. van Beijeren, Goldstone Modes in Lyapunov Spectra of Hard Sphere Systems, arXiv: nlin.CD/0312051.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Nichtlineare und molekulare Dynamik

Die Grundlagen für diesen Projektteil wurden bereits in unseren Vorarbeiten zu zufällig gekoppelten Phasenoszillatoren [SR98, SR00] gelegt. Dort wurde gezeigt, dass sich Nichtgleichgewichtsphasenübergänge aus einer dynamisch ungeordneten Phase in eine spin-glasartige Phase mit eingefrorener Unordnung klar im Lyapunov-Spektrum niederschlägt. In Spezialfällen, wie dem Kuramoto-Modell, können für derartige Systeme auch exakte analytische Ergebnisse für die Lyapunov-Spektren gewonnen werden [R04b]. Das theoretische Verständnis des zu untersuchenden Glasübergangs wurde in den Arbeiten [L00, L01, L02] geschaffen. Von diesem Hintergrund ausgehend wurde in der laufenden Förderperiode die Lyapunov-Instabilität von Lennard-Jones-Flüssigkeiten untersucht. Basis für diese Untersuchungen war die Erstellung eines um die Tangentialraumdynamik erweiterten Molekulardynamikprogramms, das auf dem konventionellen MD-Code von Walter Kob aufsetzt. Ziel war es, für die binäre Mischung eine charakteristische Veränderung z.B. der Lyapunov-Spektren zu detektieren. Die Ergebnisse einiger Testläufe dieses Programms in einer dreidimensionalen binären Lennard-Jones Mischung mit 100 Teilchen sind in Abbildung 2.1 dargestellt. Dabei verwenden wir die von Kob und Anderson zur Simulation von unterkühlten Flüssigkeiten und Gasen eingeführte Parametrisierung [K95]. Eine Abschätzung [K95] ergibt in diesem Modell einen Modenkopplungsübergang bei $T = 0.435$. Es ist bereits gezeigt worden, dass sich das Systemverhalten an diesem Punkt erheblich ändert, obwohl hier kein klassischer Phasenübergangspunkt in einen glasartigen Zustand vorliegt [DS01].

Aus den Simulationen fanden wir, dass sich das gesamte Lyapunov-Spektrum für sinkende Temperaturen nach unten verschiebt. Das ist vermutlich auf die mit sinkender Temperatur sinkende Kollisionsrate zurückzuführen. Die Symmetrieeigenschaften des Spektrums sind zudem ein Beleg für die Funktionsfähigkeit unseres Programms. Mit

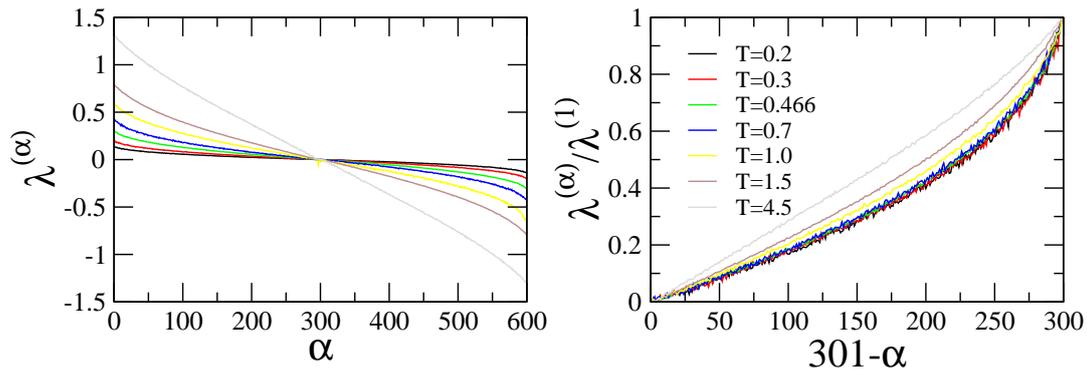


Abbildung 2.1: Das Lyapunov-Spektrum $\lambda^{(\alpha)}$ (links) und das normierte Lyapunov-Spektrum $\lambda^{(\alpha)}/\lambda^{(1)}$ (rechts) für ein binäres 3d Lennard-Jones-System bei verschiedenen Temperaturen. Die Teilchenzahl ist $N = 100$ und Systemgröße ist $L = 4.36$.

sinkender Temperatur wird das Spektrum mehr und mehr gekrümmt. Unterhalb von $T = 0.466$ ändert sich das normierte Spektrum nur wenig mit der Temperatur. Anscheinend spiegelt der größte Lyapunov-Exponent $\lambda^{(1)}$ im Wesentlichen die kinetische Energie der Atome wieder, während das gesamte Spektrum die Konfiguration der Atome wiedergibt. Die Krümmung des Spektrums folgt aus der Separation der schnellen Zeitskala der Atomvibrationen und der langsamen Zeitskala der Relaxation der Atomkonfiguration. Bei der durch die Berechnung auf nur einem Prozessor möglichen Systemgröße und Simulationsdauer sind endgültige Schlussfolgerungen noch nicht möglich. Insbesondere bei niedrigen Temperaturen treten noch erhebliche Fluktuationen auf. Es musste daher erst eine parallelisierte Version des Programms erstellt werden.

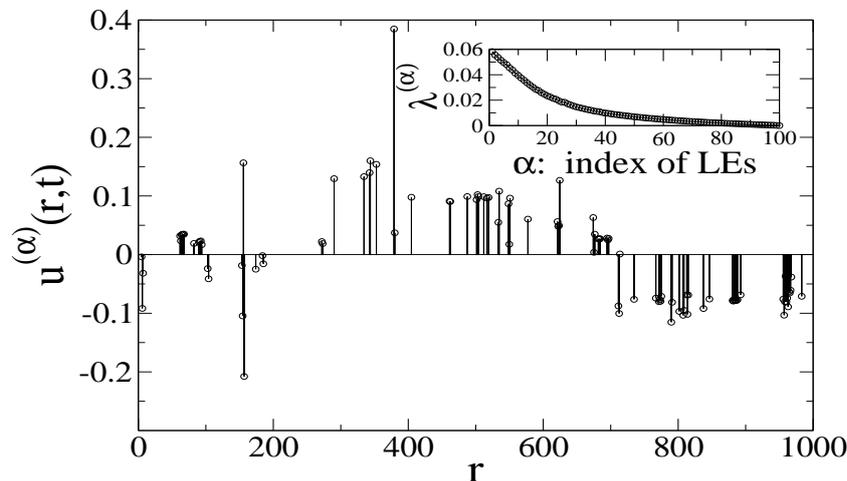


Abbildung 2.2: Momentaufnahme LV-Dichte $u^{(\alpha)}(r,t)$ für eine 1-d Lennard-Jones-Flüssigkeit ($N = 100$), wobei der Lyapunov-Exponent $\lambda^{(96)}$ nahe Null liegt. Die Auslenkungen $u_i^{(\alpha)}$ sind vertikal über der Teilchenposition R_i aufgetragen und zeigen eine wellenartige Struktur. Außerdem ist der positive Zweig des Lyapunov-Spektrums dargestellt.

Unsere Ergebnisse für binäre LJ-Systeme deuteten an, dass das Lyapunov-Spektrum al-

lein nicht genügend aussagekräftig sein würde, da es zu unsensitiv auf das Einführen von Unordnung reagiert. Diese Tatsache brachte uns zu der Einsicht, dass die Untersuchung der zugehörigen Lyapunov-Vektoren die Problematik lösen könnte. Und in der Tat zeigen schon sehr einfache Größen, wie die Partizipationsverhältnisse (participation ratios) der Lyapunov-Vektoren, charakteristische Unterschiede zwischen Systemen mit und ohne Unordnung. Diese Unterschiede betreffen stark lokalisierte Lyapunov-Vektoren, die zu den maximalen Lyapunov-Exponenten gehören. Interessanter sind jedoch die Lyapunov-Vektoren, die zu Lyapunov-Exponenten nahe der Null gehören, da diese für das Verständnis von Langzeitphänomenen wichtig sind. Dies konnte bereits durch Simulationen ein-komponentiger Lennard-Jones-Flüssigkeiten gezeigt werden, was zudem nichttriviale Resultate hervorbrachte. Für Hartkugelsysteme wurde kürzlich die interessante Entdeckung gemacht, dass Lyapunov-Vektoren, deren Exponenten nahe bei Null liegen, eine wellenartige Struktur aufweisen [PH00]. Diese so genannten hydrodynamischen Moden verhalten sich sehr verschieden von den typischerweise lokalisierten Lyapunov-Vektoren, die zu den größten Lyapunov-Exponenten gehören [PPP84, GP91, MPH98]. In Folgearbeiten [FHPH04, EG00, MNM01, WB, TM02] wurden diese Moden anhand von vereinfachten Modellen auf der Basis von Zufallsmatrizen [EG00] untersucht, sie sind aber immer noch nicht ausreichend verstanden. Beispielsweise existierte die durch plausible Argumente unterstützte Meinung, dass solche hydrodynamischen Moden nur in Flüssigkeiten mit harten Potentialen existieren, nicht aber in Vielteilchensystemen mit weichen Wechselwirkungspotentialen [PH00, FHPH04, H02]. Auch in molekulardynamische Simulationen von Soft-Potential-Systemen mit WCA-Wechselwirkungen wurden zunächst keine hydrodynamischen Lyapunov-Moden detektiert. Deren Existenz in Systemen mit weichen Potentialen konnte erst durch unsere Arbeiten nachgewiesen werden.

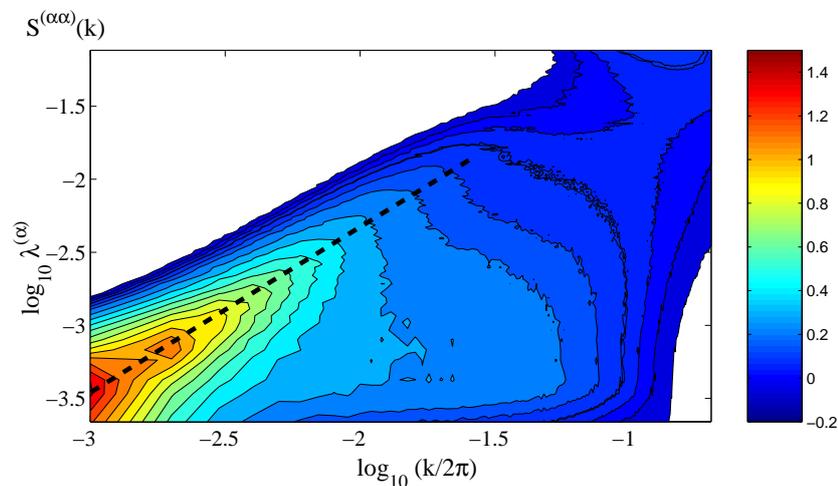


Abbildung 2.3: Höhenlinien der statischen Korrelationsfunktion $S^{(\alpha\alpha)}(k)$ für eine 1-d Lennard-Jones- Flüssigkeit ($N = 100$, $L = 1000$). Der Kamm bei kleinen k - und λ -Werten (angedeutet durch die gestrichelte Linie) zeigt die Existenz hydrodynamischer Lyapunov-Moden.

Um hydrodynamische Lyapunov-Moden im Lennard-Jones-System detektieren zu können, führten wir statische und dynamische Korrelationsfunktionen für die räumlichen Dichten der Lyapunov-Vektoren ein. Dabei ist die räumliche Dichte der Lyapunov-Vektoren als $u^{(\alpha)}(r, t) = \sum_{i=1}^N u_i^{(\alpha)}(t) \delta(r - R_i(t))$ definiert, wobei $R_i \in R^d$ der Ort des i -ten Teilchens

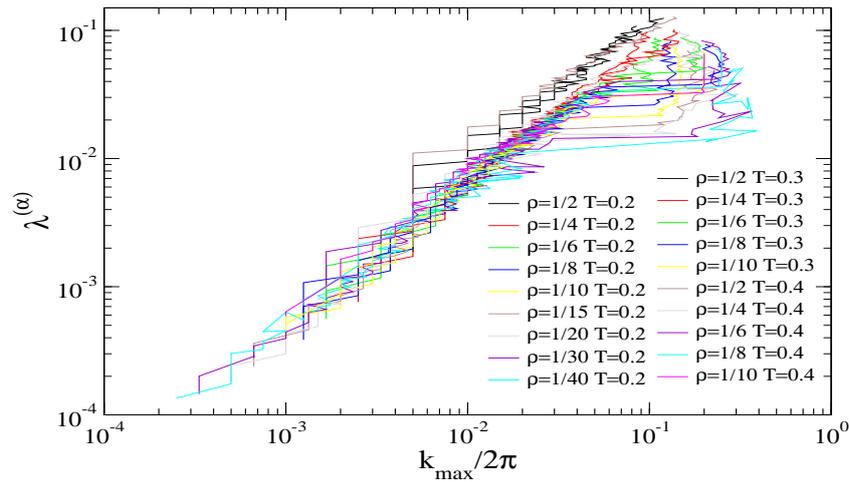


Abbildung 2.4: Dispersionsrelation $\lambda(k)$ der hydrodynamischen Lyapunov-Moden, dargestellt für verschiedene Teilchendichten und Temperaturen. Die Dispersionsrelation ist über einen weiten Parameterbereich unabhängig von der Temperatur.

und $u_i^{(\alpha)}(t)$ der räumliche Anteil des α -ten Lyapunov-Vektors für das i -te Teilchen ist. Wie in Abbildung 2.2 für $L = 1000$ und $T = 0,2$ gezeigt ist, fluktuiert $u^{(\alpha)}(r, t)$ in der Zeit und im Raum.

Die räumlichen Korrelationen werden durch $S^{(\alpha\alpha)}(k)$, die gleichzeitigen Korrelationen der Fourierkomponenten $u^{(\alpha)}(k, t)$ von $u^{(\alpha)}(r, t)$ erfasst. Zur Vereinfachung diskutieren wir zunächst die Resultate für eine eindimensionale Lennard-Jones-Flüssigkeit, für die $S^{(\alpha\alpha)}(k)$ eine skalare Größe ist. Abbildung 2.3 zeigt einen Grat (gestrichelt) bei kleinen λ und k . Dementsprechend bedeutet die entsprechende Dispersionsrelation $\lambda(k)$, dass die Lyapunov-Mode räumlich oszillatorisches Verhalten zeigt. In Abbildung 2.4 ist λ über $k_{\max} = \arg \max_k S(\lambda, k)$ für Systeme mit verschiedenen Dichten und Temperaturen aufgetragen. Die Dispersionsrelation $\lambda(k)$ ist weitgehend unabhängig von diesen Größen in dem Bereich, in dem $\lambda(k)$ wohldefiniert ist. Die gemeinsame Dispersionsrelation $\lambda(k)$ ist linear in der doppellogarithmischen Darstellung, woraus sich ein Skalengesetz $\lambda(k) \sim k^\eta$ mit $\eta = 1,2 \pm 0,1$ ergibt. Allerdings kann man aus diesen Daten auch eine lineare Dispersionsrelation mit quadratischen Korrekturen nicht ausschließen. Diese Resultate zeigen eindeutig die Existenz hydrodynamischer Lyapunov-Moden in Lennard-Jones-Flüssigkeiten.

Genauere Informationen können aus der dynamischen LV-Korrelationsfunktion $S^{(\alpha\alpha)}(k, \omega)$ gewonnen werden, die man durch zeitliche Fouriertransformation aus den ungleichzeitigen Korrelationen $F^{(\alpha\alpha)}(k, \tau)$ der Fluktuationen $u^{(\alpha)}(k, t)$ erhält. Diese Funktion enthält neben strukturellen auch zeitliche Korrelationen. Durch Frequenzintegration $S^{(\alpha\alpha)}(k) = \int S^{(\alpha\alpha)}(k, \omega) d\omega$ kann wieder die statische Korrelationsfunktion $S^{(\alpha\alpha)}(k)$ gewonnen werden. In Abbildung 2.5 ist ein typisches Beispiel der Korrelationsfunktion $S^{(\alpha\alpha)}(k, \omega)$ dargestellt. Sie besteht aus einem zentralen “quasi-elastischen” Maximum und schulterförmigen seitlichen Strukturen, die der dynamischen Strukturfunktion $S(k, \omega)$ von Flüssigkeiten ähneln. Die dynamische Information kann durch eine 3-Pol-Approximation der Laplace-Transformation von $F^{(\alpha\alpha)}(k, \tau)$ gewonnen werden, was einem Fit der Funktion $S^{(\alpha\alpha)}(k, \omega)$ durch Lorentz-Funktionen bei $\omega = 0$ und bei $\omega = \pm\omega(k)$ ent-

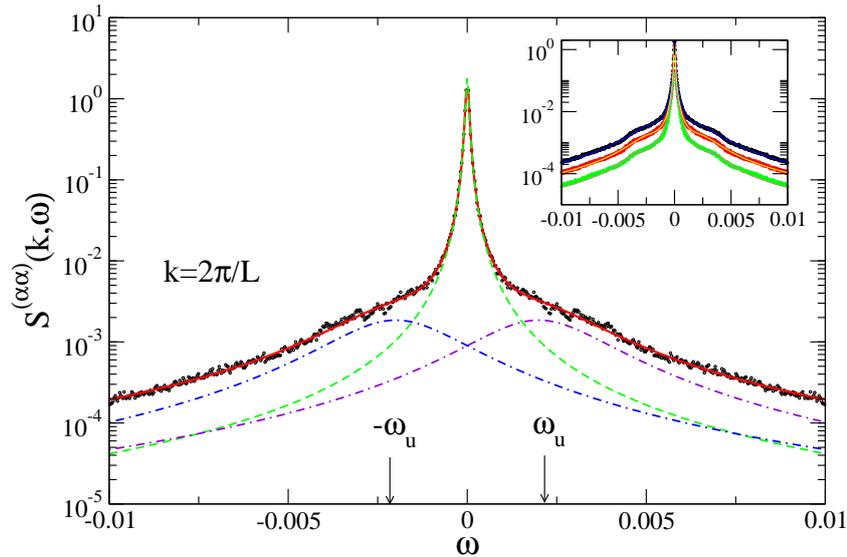


Abbildung 2.5: Dynamische Korrelationsfunktion $S^{(\alpha\alpha)}(k, \omega)$ für $\alpha = 96$ und $k = 2\pi/L$. Die durchgezogene Linie folgt aus einem Fit für die 3-Pol-Approximation. Außerdem ist die Zerlegung in drei Lorentz-Kurven dargestellt. Die kleine Abbildung vergleicht die Fits für $k = 2\pi/L$, $4\pi/L$, und $8\pi/L$ (von oben).

spricht. Diese Fits (Abbildung 2.6) beschreiben die Frequenzabhängigkeit von $S^{(\alpha\alpha)}(k, \omega)$ recht genau. Mit Hilfe dieser Fits können die Dispersionsrelationen $\omega^{(\alpha)}(k)$ für jede der hydrodynamischen Lyapunov-Moden mit dem Index α gewonnen werden. Diese Lyapunov-Moden sind durch die Wellenlänge $2\pi/k(\lambda)$ und die typische Frequenz $\omega(k(\lambda))$ charakterisiert. Weil $\frac{d\omega}{dk}$ ungleich Null ist, liegen propagierende wellenartige Anregungen vor. Die Herkunft der Frequenz $\omega(k(\lambda))$ ist noch nicht vollständig aufgeklärt. Vermutlich spiegelt sie die Rotation des orthogonalen Bezugssystems $\{e^{(\alpha)}(t)\}$ um die Referenztrajektorie wieder. Die vollständige LV-Dynamik ist dagegen noch komplizierter. Beispielsweise finden wir, dass die kohärente wellenartige Bewegung intermittent auftritt. Dieses Phänomen ist vermutlich die Ursache für die Breite der "inelastischen" Peaks von $S^{(\alpha\alpha)}(k, \omega)$ bei $\omega = \pm\omega(k)$.

Diese Resultate zeigen die Mächtigkeit der von uns eingeführten LV-Dichtekorrelationsfunktion bei der Quantifizierung raumzeitlicher Phänomene im Zusammenhang mit Lyapunov-Vektoren. Dadurch ist es erstmalig möglich, hydrodynamische Lyapunov-Moden und deren Dynamik in Systemen mit weichen Potentialen zu bestimmen. Wir schließen daraus, dass Lyapunov-Moden universell und unabhängig von der speziellen Wechselwirkung in chaotischen translationsinvarianten Vielteilchensystemen auftreten. Dieser Schluss wird auch durch die Beobachtung von hydrodynamischen Moden in ein- und zweidimensionalen Flüssigkeiten mit einer Weeks-Chandlers-Anderson (WCA) Wechselwirkung untermauert [P04].

Im Gegensatz zu den Systemen aus harten Kugeln, in denen die Lyapunov-Moden zuerst entdeckt wurden, ist das Lyapunov-Spektrum im Lennard-Jones-System nicht stufenförmig, obwohl die betreffenden Moden auch hier existieren (siehe Abbildung 2.2). Die Lyapunov-Vektoren enthalten im Vergleich zum Lyapunov-Spektrum wesentlich detailliertere Informationen, wobei die hydrodynamischen Lyapunov-Moden offensichtlich ein robustes und universelles Phänomen darstellen. Folglich sind die Lyapunov-Vektoren

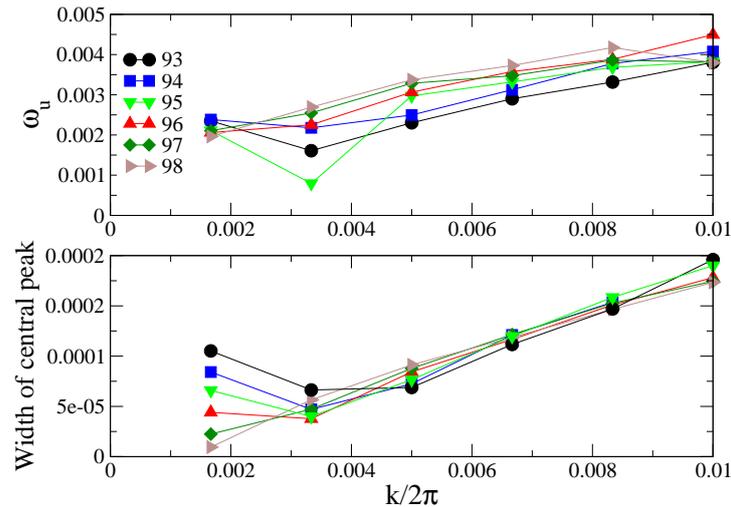


Abbildung 2.6: Dispersionsrelationen $\omega^{(\alpha)}(k)$ (oben) und die k -Abhängigkeit der Breite des zentralen Peaks (unten) für verschiedene Lyapunov-Vektoren in der 3-Pol-Approximation. Die verschiedenen Zeitskalen sind klar voneinander getrennt.

wesentlich für unsere Suche nach Verbindungen zwischen mikroskopischen und makroskopischen Beschreibungen von Vielteilchensystemen.

Um den Mechanismus der hydrodynamischen Lyapunov-Moden weiter aufzuklären, betrachteten wir zusätzlich einfache gekoppelte, chaotische Abbildungen (CML, coupled map lattice). Anhand dieser Modelle konnten wir einerseits das generische und universelle Verhalten der hydrodynamischen Lyapunov-Moden überprüfen. Andererseits können CMLs einfach simuliert und modifiziert werden, was insbesondere für die Vorbereitung von numerischen Experimenten in komplizierteren Systemen unter gut kontrollierten Bedingungen nützlich ist. Unsere vorläufigen Resultate zeigen, dass hydrodynamische Lyapunov-Moden auch in CMLs existieren (siehe Abbildung 2.7). Dies und die Arbeiten [RUN04, RU04a, RU04b] legen nahe, dass auch partielle Differentialgleichungen hydrodynamische Lyapunov-Moden aufweisen können. Das Beispiel zeigt, dass uns CMLs auch in Zukunft, insbesondere bei der Untersuchung von Unordnungseffekten, nützlich sein dürften.

In Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Professor Rürger (TP B8) konvertierten wir das zuvor erstellte sequentielle Programm zur Berechnung von Lyapunov-Spektren in eine parallelisierte Version unter Verwendung von MPI [GLS94]. In die Reorthogonalisierung, die der rechenzeitaufwändigste Teil der Simulation ist, implementieren wir drei Algorithmen: PCGS ist eine parallelisierte klassische Gram-Schmidt-Orthogonalisierung, PICGS ist ein numerisch stabiler Gram-Schmidt-Algorithmus und PBQR ist ein QR-Algorithmus für Blockmatrizen. Alle Parallelrechnungen basieren auf einem zweidimensionalen Prozessorengitter mit einer entsprechenden blockzyklischen Datenverteilung der Matrix der Offset-Vektoren. Zeilenzyklische und spaltenzyklische Verteilungen entsprechen der Blockgröße, die approximativ gewählt werden kann. Das Programm wurde sorgfältig modular aufgebaut, um auch für einfache sequentielle Operationen die Prozessor- und Knotenarchitektur optimal ausnutzen zu können. Das Interface zwischen paralleler Reorthogonalisierung und Integration muss eine invariante Datenverteilung gewährleisten. Um verschiedene Parallelalgorithmen zur Orthogonalisierung zusammen

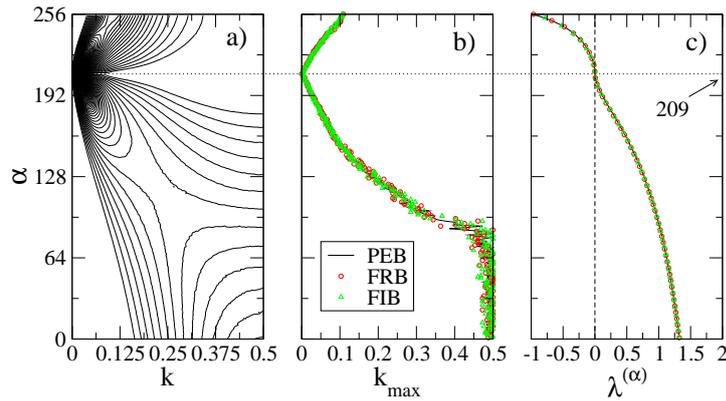


Abbildung 2.7: Ergebnisse der Simulationen der gekoppelten Kreisabbildungen für $\epsilon = 2.3$. a) Höhenlinien von $S_u^{(\alpha)}(k)$, b) Index α der LV als Funktion von k_{max} , c) das Lyapunov-Spektrum. In b) sind die Ergebnisse für feste (FIB), freie (FRB) und periodische (PEB) Randbedingungen dargestellt. Die Systemgröße ist $L = 256$.

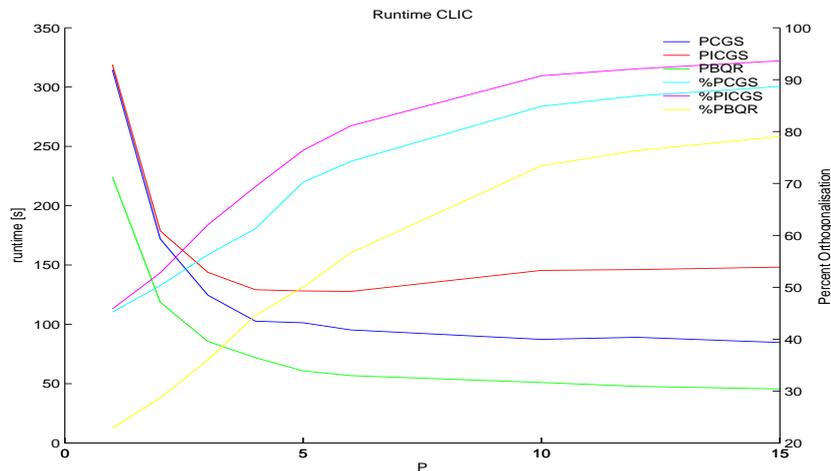


Abbildung 2.8: Rechendauer (abfallende Kurven) und Orthogonalisierungsgrad (ansteigende Kurven) als Funktion der Prozessorenzahl für das parallelisierte Programm im Cluster CLIC der TU Chemnitz für eine Simulation einer 3d binären Lennard-Jones-Flüssigkeit mit 80 A -Teilchen und 20 B -Teilchen.

mit dem Integrationsalgorithmus effizient nutzen zu können, kann eine automatische Datenverteilung nötig sein. Die Absicht dabei ist es, durch eine effiziente Kombination von Standardroutinen und parallelen Orthogonalisierungsroutinen eine optimale Ausnutzung von Prozessoren, Knoten und Netzwerk zu erreichen. Dadurch kann die Berechnung von Lyapunov-Vektoren und Spektren so effizient durchgeführt werden, dass auch Simulationen in sehr großen Systemen möglich sind. Die Rechengeschwindigkeit wurde auf einem Beowulf-Cluster (Dual-Xeon-Knoten) und einer IBM SP4 am NIC Jülich bestimmt. Solche Tests sind auch wichtig, damit das Parallelprogramm zur Berechnung der Lyapunov-Instabilität auch von anderen Arbeitsgruppen auf anderen Rechenanlagen effizient genutzt werden kann.

Das in der laufenden Förderperiode entwickelte parallelisierte Programm wird auch in der nächsten Antragsperiode von erheblicher Bedeutung sein. Erst dieses Programm ermöglicht uns aussagekräftige und extensive Untersuchungen durch zuverlässige Berechnungen in zwei- und dreidimensionalen Systemen mit ausreichend großer Teilchenzahl. Insbesondere Nichtgleichgewichtsprozesse, wie die nichtlineare Alterungsdynamik, können nun zuverlässig untersucht werden. Der Projektbearbeiter Herr Dr. Yang arbeitet momentan Herrn Dipl. Phys. Christian Drobniowski in die Thematik ein, der ihn dann im Fortgang des Projekts unterstützen soll.

2.4.2 Entwicklung raum–zeitlicher Dynamik nach periodischen Orbits, Altern und anomaler Transport

In der laufenden Förderperiode konnte dieser Teil des TP C8 aufgrund der reduzierten Mittelbewilligung (es wurde nur eine von zwei beantragten Personalstellen bewilligt) lediglich eingeschränkt mit Mitteln der Grundausrüstung bearbeitet werden. In den entsprechenden Arbeiten waren somit im Wesentlichen die Antragsteller involviert [R04a, J04, R04b, RJH04, MKJ01, MKJ02, BASJ02]. Zudem können die Diplomarbeiten von Herrn Fichtner [F03, FJR04] und Frau Hallerberg [HJR04] als Beitrag zu diesem Themenkreis gerechnet werden. Seit Ende 2003 arbeitet sich Herr Fichtner als wissenschaftlicher Mitarbeiter, über eine Haushaltsstelle (bis Ende 2004) finanziert, in die konkreten Fragestellungen dieses Projektteils ein, um ihn in der kommenden Förderperiode fundiert bearbeiten zu können.

Aufgrund unserer Arbeiten kann die folgenden Zwischenbilanz gezogen werden. Erstens konnten inzwischen der Ausgangspunkt und die möglichen Perspektiven dieses Projektteils neu definiert und klar ausgearbeitet werden [R04a]. Insbesondere die Möglichkeiten der Spektralanalyse der interessierenden dynamischen Systeme und des Escape-Rate-Formalismus wurden in [R04a] ausgelotet. Damit wurde z.B. die Wichtigkeit der Zustandsdichte am Rande des Spektrums (Lifshitz-tails) für das Langzeitverhalten dieser Systeme aufgezeigt. Daraus resultierte auch die Erkenntnis über den engen Zusammenhang dieser Problematik mit den in A14 behandelten mathematischen Problemen der Zustandsdichte für das Anderson-Modell. Zweitens war ursprünglich vorgesehen die Methoden der Periodic-Orbit-Theorie einzusetzen. In diesem Zusammenhang ist auch die abgeschlossene Diplomarbeit von Herrn Fichtner zu sehen, in der er sich mit dem Auffinden und der Stabilisierung von periodischen Orbits mittels Rückkopplung beschäftigt hat [FJR04] und die noch laufende Diplomarbeit von Frau Hallerberg zur Periodic-Orbit-Theorie der Zeta-Funktion an Phasenübergängen [HJR04]. Es stellte sich aufgrund der Ergebnisse zu den Spektren des Frobenius-Perron-Operators für ungeordnete Systeme [R04a] allerdings auch heraus, dass die Periodic-Orbit-Theorie nicht besonders geeignet zu sein scheint oder zumindest zu große Probleme mit sich bringt, um die Beschreibung der raum-zeitlichen Dynamik ungeordneter Systeme vorteilhaft zu erfassen. Daher soll der Ansatz der Periodic-Orbit-Theorie in der kommenden Periode nicht weiter verfolgt werden. Drittens hat Herr Fichtner bereits erste lauffähige Varianten (einer Untermenge) der Programmpakete erstellt, die in der kommenden Förderperiode zum Einsatz kommen sollen.

Der wissenschaftliche Ausgangspunkt für diesen Projektteil bestand in der Erkenntnis, dass schon einfache iterierte Abbildungen mit eingefrorener Unordnung einerseits anomale Transporteigenschaften, wie dynamische Lokalisierung und anomal verlangsamte Drift,

aufweisen können [R96a, R99], und andererseits eng damit verbunden Alterungsphänomene auftreten [R99, R04a]. Diese Einsicht basiert auf dem engen Zusammenhang von ausgedehnten dynamischen Systemen mit Markov-Modellen für Random Walks, falls erstere so genannte Markov-Partitionen besitzen [R96b, R95]. Dies impliziert ferner die Anwendbarkeit von fortgeschrittenen Methoden, z.B. des Thermodynamischen Formalismus in beiden Systemklassen [R95, SSR95]. Damit lassen sich etwa Gleichgewichtseigenschaften für Random Walks in Random Environments, die man für endliche Systeme auch analytisch berechnen kann [R98], auf dynamische Systeme übertragen. Dasselbe gilt für Nichtgleichgewichtseigenschaften wie das Altern oder den anomalen Transport [R04a, R04b]. Exemplarisch konnte dies an den spektralen Eigenschaften des Frobenius-Perron-Operators deutlich gemacht werden.

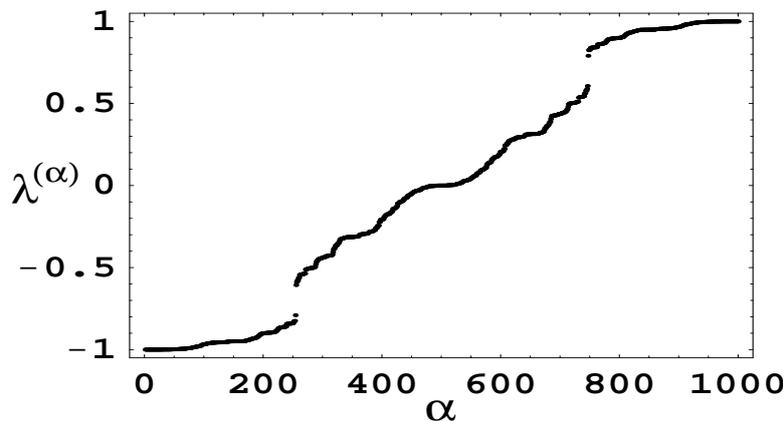


Abbildung 2.9: Das Spektrum eines dynamischen System vom Sinai-Typ. Die Eigenwerte clustern bei $\lambda = 1$ (und aus Symmetriegründen auch bei $\lambda = -1$). Sie wurden durch Diagonalisierung der Übergangsmatrix gewonnen.

Abbildung 2.9 zeigt das Spektrum $\{\lambda^{(\alpha)}\}$ dieses Operators für ein einfaches ungeordnetes dynamisches System mit Markov-Partition. Die entsprechende Übergangsmatrix des so genannten Sinai-Modells kann mit einem Lokalisierungsproblem der Quantenmechanik ungeordneter Systeme in Verbindung gebracht werden. Für das Langzeitverhalten des dynamischen Systems ist das Clustern der Eigenwerte bei $\lambda = 1$ verantwortlich. Unsere Untersuchungen zeigten das entsprechende singuläre Verhalten der Zustandsdichte auf. Dieses ist allerdings von den betrachteten Modellklassen abhängig. Es gibt zudem einen Zusammenhang mit der Entweichrate eines geeignet konstruierten offenen Systems, der auch nur für den Spezialfall des Sinai-Modells verstanden ist. Da diese Eigenschaften sowohl für anomale Transporteigenschaften als auch für Alterungsphänomene relevant sind, ist es notwendig diese Eigenschaften genauer zu untersuchen. Solche Zusammenhänge bzw. Analogien zwischen Systemen der Statistischen Physik und der Nichtlinearen Dynamik wurden in der von uns im Jahr 2002 organisierten Heraeus-Sommerschule thematisiert und sind in [RJH04] dokumentiert. Aus diesen Arbeiten folgte jedoch auch, dass die Phänomenologie der nichtlinearen dynamischen Systeme wesentlich reicher ist als die der bekannten Modelle der Statistischen Physik. Diese noch unbekannt Aspekte dynamischer Systeme, insbesondere in Bezug auf Altern und anomalen Transport, bilden die zentralen Fragestellungen, die zukünftig von Herrn Fichtner

in diesem Projektteil bearbeitet werden sollen.

Literaturverzeichnis

- [BASJ02] N. Baba, A. Amann, E. Schöll, and W. Just; Giant improvement of time delayed feedback control by spatio-temporal filtering, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 074101-1 (2002).
- [F03] A. Fichtner, *Chaoskontrolle mit zeitlich oszillierender zeitverzögerter Rückkopplung*, Diplomarbeit, TU Chemnitz, Oktober 2003.
- [FJR04] A. Fichtner, W. Just, and G. Radons, Analytical investigation of modulated time-delayed feedback control. *J. Phys. A* **37**, 3385-3391 (2004).
- [HJR04] S. Hallerberg, W. Just, and G. Radons, Analytic Properties of the Ruelle Zeta Function for Mean-Field Models of Phase Transitions, in Vorbereitung.
- [J04] W. Just, On Symbolic Dynamics of Space-Time Chaotic Models, p.347-366, in [RJH04].
- [L00] A. Latz, Non-Equilibrium Mode Coupling Theory for Supercooled Liquids and Glasses, *J. Phys. Cond. Mat* **12**, 6353-6363 (2000).
- [L01] A. Latz, Universal properties of aging in structural glasses, arXiv: cond- mat/0106086.
- [L02] A. Latz, Non-Equilibrium Projection Operator for Quenched Thermostatted Systeme, *J. Stat. Phys.* **109**, 607-622 (2002).
- [MKJ01] E. Ferretti Manfra, H. Kantz, and W. Just; Periodic orbits and topological entropy of delayed maps, *Phys. Rev. E* **63**, 046203 (2001).
- [MKJ02] E. Ferretti Manfra, W. Just, and H. Kantz; Invariant densities of delayed maps in the limit of large time delay, *Phys. Rev. E* **65**, 016211 (2002).
- [R95] G. Radons, Thermodynamic Analysis of Random Walks in Inhomogeneous Environments: Localization and Phase Transitions; *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4719-4723 (1995).
- [R96a] G. Radons, Suppression of Chaotic Diffusion by Quenched Disorder. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4748-4751 (1996).
- [R96b] G. Radons, The Thermodynamics of Random Walks with Applications to Fractals and Chaos. in: *Nonlinear Physics of Complex Systems - Current Status and Future Trends*, Lecture Notes in Physics, J. Parisi et. al. (Hrsg.), S.281-289, Springer-Verlag, Berlin, 1996.
- [R98] G. Radons, On the Equilibrium State of Random Walkers in Random Environments: Analytical Results. *J. Phys. A* **31**, 4141-4148 (1998).
- [R99] G. Radons, Disorder Phenomena in Chaotic Systems. *Adv. Solid State Physics* **38**, S.439-451 (1999).
- [R04a] G. Radons, Anomalous Transport in Disordered Dynamical Systems. *Physica D* **187**, 3-19 (2004).

- [R04b] G. Radons, Disordered Dynamical Systems, p.279-308, in [RJH04].
- [RJH04] G. Radons, W. Just, and P. Häussler (Hrsg.), Collective Dynamics of Nonlinear and Disordered Systems (Springer, Berlin, 2004), im Druck.
- [RRSY] G. Radons, G. Rünger, M. Schwind, and H.L. Yang, Parallel algorithms for the determination of Lyapunov characteristics of large nonlinear dynamical systems. Proceedings of PARA04, WORKSHOP ON STATE-OF-THE-ART IN SCIENTIFIC COMPUTING, Lyngby, June 20-23, 2004, erscheint in Lecture Notes of Computer Science (Springer, Berlin, 2004).
- [RUN03] B. Rumpf, A. C. Newell, Localization and coherence in nonintegrable systems, *Physica D* **184**, 162-191 (2003).
- [RUN04] B. Rumpf, A. C. Newell, Intermittency as a consequence of turbulent transport in nonlinear systems, *Phys. Rev. E* **69**, 026306-1-4 (2004)
- [RU04a] B. Rumpf, Simple statistical explanation for the localization of energy in nonlinear lattices with two conserved quantities *Phys. Rev. E* **69**, 016618-1-5 (2004).
- [RU04b] B. Rumpf, Intermittent movement of localized excitations of a nonlinear lattice, *Phys. Rev. E* **70**, im Druck (2004).
- [RY04a] G. Radons and H.L. Yang, Static and Dynamic Correlations in Many-Particle Lyapunov Vectors, nlin.CD/0404028, eingereicht bei *Phys. Rev. Lett.*
- [RY04b] G. Radons and H.L. Yang, Lyapunov Modes in Coupled Map Lattices, Vorabdruck.
- [SR98] J. Stiller and G. Radons, Dynamics of Randomly Coupled Phase Oscillators. *Phys. Rev. E* **58**, 1789-1799 (1998).
- [SR00] J. Stiller and G. Radons, Self-Averaging of an Order Parameter in Randomly Coupled Limit-Cycle Oscillators. *Phys. Rev. E* **61**, 2148-2149 (2000).
- [SSR95] R. Stoop, W.-H. Steeb, and G. Radons, A New Characterization of Deterministic Diffusion: Diffusion-Related Entropy Functions; *Phys. Lett. A* **202**, 195-200 (1995).
- [YR03a] Hongliu Yang and G. Radons, Lyapunov Instability of One-dimensional Lennard Jones Systems, 23th European Dynamics Days, 24th-27th Sept. 2003, Palma de Mallorca, Spain.
- [YR03b] Hongliu Yang and G. Radons, Dynamical Structures of Lyapunov Vectors, 4. Dresdner Herbstseminar des Arbeitskreises Nichtlineare Physik, MIPPKS Dresden, 9th-12th Nov. 2003.
- [YR04] H.L. Yang and G. Radons, Lyapunov instability of Lennard Jones fluids, nlin.CD/0404027, wird in *Phys. Rev. E* veröffentlicht.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

1. Im Bereich der Nichtlinearen Dynamik von Lennard-Jones-Flüssigkeiten sind u.a. noch die folgenden Fragen zu untersuchen:

- Wir haben bereits gezeigt, dass hydrodynamische Lyapunov-Moden in einer Dimension in einkomponentigen Lennard-Jones-Systemen existieren, wobei wir das Verhalten durch LV-Korrelationen charakterisiert haben. Diese Phänomene bedürfen in zwei und drei Dimensionen noch einer genaueren Untersuchung.
 - Durch welchen Mechanismus und unter welchen Umständen treten hydrodynamische Lyapunov-Moden auf?
 - Wie werden die Lyapunov-Moden durch statische Unordnung oder dynamisches Rauschen beeinflusst?
 - Wie beeinflusst das nichtergodische Verhalten im glasartigen Zustand die Lyapunov-Moden? Wie verändert sich das Lyapunov-Spektrum beim Übergang vom ergodischen in den nicht-ergodischen Zustand?
 - Bisher haben wir Lennard-Jones-Flüssigkeiten im Gleichgewichtszustand untersucht. Welche Auswirkung hat die Präparation des Systems in einem Nichtgleichgewichtszustand (Alterungsprozess) auf das Lyapunov-Spektrum und die Lyapunov-Vektoren?
 - Kann die numerische Algorithmik noch effizienter gemacht werden, z.B. durch kontinuierliche Orthogonalisierungsverfahren?
2. Im Bereich der Nichtlinearen Dynamik des Alterns und des anomaler Transports sind u.a. noch die folgenden Fragen zu untersuchen:
- Welche Systemklassen von ungeordneten dynamischen Systemen (iterierten Abbildungen) existieren? Wie unterscheiden sie sich in Bezug auf die Alterungsdynamik und die Transporteigenschaften?
 - Wie ist das singuläre Verhalten der Zustandsdichte des Spektrums des Frobenius-Perron-Operators in den verschiedenen Klassen zu charakterisieren?
 - Welchen Einfluss haben Randbedingungen auf die spektralen Eigenschaften?
 - Lassen sich das singuläre Verhalten beweisen und entsprechende Exponenten auch analytisch berechnen?
 - Gibt es immer einen Zusammenhang mit der Systemgrößenabhängigkeit der Entweichrate? Unsere Untersuchungen deuten darauf hin, dass in einfachen Systemen ein einfacher Zusammenhang existiert, für komplexere Modelle zumindest dieser einfache nicht mehr. Hier sind systematische Untersuchungen notwendig.
 - Die Modelle repräsentieren die Dynamik von Zuständen in eingefrorenen, ungeordneten Umgebungen. Welche Auswirkungen haben dynamische Fluktuationen der ungeordneten Umgebung?

Eine ausführliche Darstellung der geplanten Vorhaben ist im Finanzierungsantrag 2005-2007, Teilprojekt C8, enthalten.

Projektbereich

D

Simulation und Anwendungen in der Kontinuumsmechanik

Teilprojekt

D1

Effiziente parallele Algorithmen zur Simulation des
Deformationsverhaltens von Bauteilen aus
elastisch-plastischen Materialien

2.1 Teilprojekt D1

Effiziente parallele Algorithmen zur Simulation des Deformationsverhaltens von Bauteilen aus elastisch-plastischen Materialien

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. R. Kreißig
Professur Festkörpermechanik
Institut für Mechanik
Fakultät für Maschinenbau
TU Chemnitz

Prof. Dr. A. Meyer
Professur Numerische Analysis
Fakultät für Mathematik
TU Chemnitz

Prof. Dr. M. Kuna
Institut für Mechanik und Fluidodynamik
Fakultät für Maschinenbau, Verfahrens- und Energietechnik
TU Bergakademie Freiberg

2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. U. Benedix
Professur Festkörpermechanik
Institut für Mechanik
Fakultät für Maschinenbau
TU Chemnitz

Dr. M. Scherzer
Institut für Mechanik und Fluidodynamik
Fakultät für Maschinenbau, Verfahrens- und Energietechnik
TU Bergakademie Freiberg

Dr. A. Bucher
Professur Festkörpermechanik
Institut für Mechanik
Fakultät für Maschinenbau
TU Chemnitz

DI F. Rabold
Institut für Mechanik und Fluidodynamik
Fakultät für Maschinenbau, Verfahrens- und Energietechnik
TU Bergakademie Freiberg

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Die Anwendung numerischer Verfahren zur Berechnung des mechanischen Verhaltens von Bauteilen und Konstruktionen hat eine wesentliche Effizienzsteigerung der Entwicklungsprozesse bewirkt. Insbesondere die Ablösung aufwändiger Versuchsreihen durch numerische Fallstudien und Experimente auf der Basis computergestützter Simulationstechniken hat dazu geführt, dass der Einsatz der Finite-Element Methode (FEM) mittlerweile zum Standard in nahezu allen Industriebereichen geworden ist. Daneben gewinnt die FEM immer stärker in Forschungsgebieten wie z.B. der Biologie und Medizin an Bedeutung, in denen bis dahin wegen der Komplexität der Problemstellungen nur vereinzelt numerische Simulationen Anwendung fanden.

Bei der Entscheidung für eine spezielle Software stehen in der Praxis zwei Kriterien besonders im Blickpunkt – Effektivität (Zeitersparnis) und Genauigkeit. Die Untersuchungen im Rahmen des SFB zeigen den engen Zusammenhang dieser Merkmale. In den ersten beiden Förderungsperioden stand die Effektivitätssteigerung numerischer Simulationen durch konsequente Parallelisierung der Algorithmen im Vordergrund. Die erzielte Zeiteinsparung ermöglicht eine Approximation des realen Bauteilverhaltens durch komplexere Modelle, womit die Genauigkeit der Berechnungen verbessert wird. Die Entwicklung und Nutzung moderner adaptiver Vernetzungsstrategien, denen in der vergangenen und der laufenden Förderungsperiode verstärkte Aufmerksamkeit gewidmet wurde, sind anschaulicher Beweis für das Streben nach einem sinnvollen Kompromiss zwischen Effektivität und Genauigkeit einer numerischen Simulation. Das trifft besonders auf nicht-lineare Problemstellungen zu, die eine immer größere Praxisrelevanz erhalten.

Eine FE-Modellierung besteht im Wesentlichen aus drei großen Komplexen – der Geometriebeschreibung einschließlich Vernetzung, der Definition von Rand- und Anfangsbedingungen sowie der Approximation des realen Werkstoffverhaltens durch Materialmodelle. In der Praxis zeigt sich, dass gerade die Auswahl geeigneter konstitutiver Beziehungen und die Identifikation darin enthaltener Parameter problematisch sind, und in ungünstigen Fällen zu erheblichen Fehlern im Simulationsergebnis führen können.

Die Entwicklung zweckmäßiger Materialgesetze der Elastoplastizität bei kleinen und großen Verzerrungen sowie zuverlässiger Algorithmen zur numerischen Bestimmung von Werkstoffkenngrößen sind seit einer reichlichen Dekade Gegenstand der Forschungen am Lehrstuhl Festkörpermechanik der TU Chemnitz. In den Bereichen Mathematik und Informatik der TU Chemnitz werden seit mehreren Jahren Untersuchungen zum Aufbau und Transport effizienter Datenstrukturen sowie zur effektiven Lösung großdimensionierter linearer algebraischer Gleichungssysteme durchgeführt. Basierend auf diesen Entwicklungen war es das Ziel, im TP D1 des SFB ein FEM-Programm zur Lösung geometrisch und physikalisch nichtlinearer Aufgaben der Festkörpermechanik für sequenzielle und parallele Anwendungen zu realisieren und schrittweise für Praxisanwendungen vorzubereiten. Im Mittelpunkt stand dabei zunächst die Entwicklung effizienter Zeitdiskretisierungsverfahren und Gleichungslöser. Ein weiteres Ziel der Untersuchungen im Teilprojekt war, durch Einbettung des FEM-Programmes in einen Optimierungsalgorithmus die Anpassung von Materialmodellen an gemessene inhomogene Verschiebungsfelder und somit eine verbesserte Materialparameteridentifikation zu erreichen. Ab der zweiten Förderungsperiode wurden diese Berechnungsmethoden für die numerische Simulation und die Parameteroptimierung durch Einbeziehung der TU Bergakademie Freiberg auf Probleme der Schädigungs- und Bruchmechanik erweitert.

Während schnelle Löser bei 2D- und 3D-Elastizitätsproblemen mit hierarchischen oder BPX-Techniken seit längerer Zeit bekannt und in verschiedenen Programmrealisierungen des SFB integriert sind (vgl. TP A3), konnte die Eignung hierarchischer Techniken für Probleme der ebenen Elastoplastizität erstmals im Rahmen von Arbeiten der DFG-Forschergruppe *Scientific Parallel Computing* gezeigt und mit dem Programm SPC-PMEP in der zweiten Förderungsperiode des SFB verfügbar gemacht werden. Damit wurde eine Programmentwicklung für die Bearbeitung elastisch-plastischer Probleme mit isotroper, kinematischer und formativer Verfestigung bei kleinen Verzerrungen in einer parallelen Version realisiert, die auch sequenziell abgearbeitet werden kann.

Der große Anteil rechenintensiver Prozesse, die unabhängig voneinander an unterschiedlichen Orten der Geometrie bearbeitet werden können (z. B. während der Assemblierung in den Integrationsstützstellen der Elemente), bewirkt die natürliche Effizienzsteigerung einer FE-Berechnung durch deren Parallelisierung. Besonders deutlich wird dieser Vorteil gegenüber der sequenziellen Vorgehensweise bei der Simulation nichtlinearer Modelle mittels inkrementell-iterativer Algorithmen und der Lösung von Optimierungsproblemen mit der mehrfachen Wiederholung vollständiger Vorwärtsrechnungen. In diesem Zusammenhang konnte das Programm SPC-PMEP erfolgreich für die Materialparameteridentifikation durch Analyse inhomogener Verschiebungsfelder genutzt werden.

Reale Problemstellungen im Bereich der Elastoplastizität sowie der Bruch- und Schädigungsmechanik (z. B. Simulation von Umformvorgängen, Crash u.a.), lassen sich in der Regel nicht hinreichend zuverlässig mit geometrisch linearen Modellen beschreiben. Im Rahmen der weiteren Untersuchungen zum Teilprojekt erfolgte somit konsequenterweise die Realisierung eines FEM-Programmes zur Berechnung großer elastisch-plastischer Verzerrungen – des Programmes SPC-PMHP. Dabei wurde ein phänomenologisches Materialmodell unter Berücksichtigung einer Substruktur entwickelt und implementiert, das eine makroskopische Beschreibung von Vorgängen auf der Mikroebene ermöglicht. Basierend auf den Annahmen der rationalen Thermodynamik ergibt sich in diesem Zusammenhang ein Satz von Evolutionsgleichungen für innere Variablen zur Beschreibung einer allgemeinen plastischen Anisotropie, der für den Fall kleiner Verzerrungen in die Gleichungen der klassischen Elastoplastizität übergeht.

Von ihrer Struktur her sind die entwickelten Evolutionsgleichungen der assoziierten Fließtheorie differenzialalgebraische Gleichungen (DAE). Die DAEs zur Beschreibung des elastisch-plastischen Materialverhaltens bei großen Verzerrungen sind vergleichbar mit den entsprechenden Beziehungen im geometrisch linearen Fall. Daher konnte bei der Entwicklung von SPC-PMHP auf den algorithmischen Grundstrukturen von SPC-PMEP aufgebaut werden. Zur Lösung des globalen Steifigkeitssystems wurden die aktuellen, effizienten Solver-Entwicklungen aus dem TP A3 genutzt. Die Linearisierungstechniken zur Behandlung der DAEs beruhen wie bei kleinen Verzerrungen auf der Verwendung impliziter Einschrittverfahren. Zur Verbesserung des globalen und lokalen Konvergenzverhaltens erwies sich die Entwicklung und Implementierung geeigneter Dämpfungsalgorithmen für die Linearisierungsverfahren als sinnvoll. Die Materialschnittstelle ist wie bei SPC-PMEP so allgemein und umfassend gestaltet, dass Neuentwicklungen im Bereich der Konstitutivgleichungen ohne massive Eingriffe in die Programmstruktur implementiert werden können. Dieser Umstand wurde bereits für die Einbeziehung von Materialmodellen der duktilen Schädigungsmechanik erfolgreich genutzt. Die Untersuchungen zum elastisch-plastischen Materialverhalten bei großen Verzerrungen wurden letztendlich in der zweiten Förderungsperiode durch die Übertragung und Anpassung der

Algorithmen zur Materialparameteridentifikation auf den geometrisch nichtlinearen Fall erweitert. Somit stand zu Beginn des laufenden Berichtszeitraums ein FEM-Programm mit modernen, effizienten numerischen Algorithmen und einer flexiblen Materialschnittstelle zur Verfügung.

Neben der Auswahl geeigneter Materialmodelle hängt eine realistische numerische Simulation des mechanischen Verhaltens von Bauteilen und Baugruppen auch von der Art der Vernetzung des Gebietes ab. Um eine geforderte Genauigkeit bei der Lösung des Anfangsrandwertproblems zu erreichen, ist es zweckmäßig, in Gebieten mit großen Spannungsgradienten mit feineren Netzen zu arbeiten, während dies in Regionen mit kleineren Gradienten nicht unbedingt notwendig ist. Da die Lage und Größe der kritischen Gebiete in der Regel nur qualitativ festliegt und/oder sich während des Belastungsvorganges verändern kann, ist die Erstellung von a priori angepassten Netzen nicht immer möglich. Aus diesem Grund haben adaptive Vernetzungsstrategien im letzten Jahrzehnt eine immer größere Bedeutung erlangt. Hierbei ist zu erwähnen, dass globale Neuvernetzungsansätze wegen des kompletten Datentransfers auf das neue Netz unter Einbeziehung von Suchstrategien gewöhnlich nicht sehr effektiv und zudem mit Fehlern behaftet sind. Leistungsfähigere Methoden sind lokale, adaptive Strategien zur Netzverfeinerung und -vergrößerung speziell im Fall von nichtlinearen, inkrementellen Lösungsverfahren.

Für eine effektive Modellierung mechanischer Probleme bei großen Verzerrungen ist es günstig, die FE-Berechnung mit einem relativ groben Netz zu beginnen. Im weiteren Belastungsverlauf wird das Netz in Abhängigkeit von den vorhandenen Spannungsgradienten, die über spezielle Fehlerschätzer angezeigt werden, angepasst. Die Möglichkeit zur adaptiven Netzanpassung ist ein Merkmal hoher Leistungsstärke von FEM-Programmen. Aus diesem Grund stand im laufenden Förderungszeitraum die Weiterentwicklung adaptiver Vernetzungs- und Lösungsstrategien für nichtlineare Probleme im Mittelpunkt der Untersuchungen des Teilprojektes. Weiterhin sollte die Praxisrelevanz der FEM-Software durch eine effiziente Modellierung des Kontakts gegen starre Hindernisse, verbunden mit der adaptiven Vorgehensweise, wesentlich verbessert werden.

Die adaptive Netzverfeinerung, welche z. B. bei der Analyse eines sich schließenden Kontakts und der genauen Erfassung plastischer Zonen sowie von Gebieten mit großen Gradienten in den Feldvariablen erforderlich ist, wurde bereits im vergangenen Förderungszeitraum in enger Zusammenarbeit mit dem TP A3 für lineare Elastizität realisiert. Bei der Behandlung nichtlinearer Aufgabenstellungen wird die äußere Last in einzelnen Schritten aufgebracht. Es erfolgt eine örtliche und zeitliche Diskretisierung mit einer jeweils iterativen Lösung. In jedem Lastschritt muss das Materialgesetz auf der Ebene der Gaußpunkte integriert werden. Dabei setzen die verfügbaren Zeitdiskretisierungsverfahren für das lokale Anfangswertproblem das Vorhandensein der Feldgrößenwerte aus dem vorangegangenen Lastschritt in den Stützstellen voraus. Somit ist es bei der adaptiven Netzanpassung erforderlich, eine entsprechende Übertragung der Zustandsgrößen vom alten auf das neue Netz zu gewährleisten. Auf der Grundlage der Arbeiten zu effizienten Solvern und adaptiven Techniken in A3 und des in SPC-PMHP realisierten Materialmodells für anisotropes elastisch-plastisches Werkstoffverhalten wurde das nichtlineare, adaptive FEM-Programm SPC-PM2AdNl entwickelt. In diesem Zusammenhang konnten neuartige Algorithmen zur Übertragung der Feldgrößen realisiert werden, die auf einer zusätzlichen Lösung des Anfangswertproblems in den Elementknoten basieren.

Beispielsweise im Fall eines sich öffnenden Kontakts, sich bewegender Kontaktregionen

und veränderlicher plastischen Zonen ist es im Sinne einer effektiven Diskretisierung notwendig, das Netz wieder zu vergrößern. Auf der Grundlage hierarchischer Datenstrukturen wurden effiziente Vergrößerungsstrategien einschließlich der erforderlichen Übertragungsalgorithmen entwickelt und implementiert. Das Auslösen von Elementen bei Erreichung eines bestimmten Schädigungsgrades und das Auftrennen von Elementen beim Risswachstum verkörpern weitere Aufgabenstellungen des Teilprojekts im Rahmen der Rissbruchmechanik.

Die klassischen Fehlerschätzer und -indikatoren zur adaptiven Netzanpassung (Minimierung der Unstetigkeit der Feldgrößen an gemeinsamen Elementrändern) eignen sich für die Simulation der Ausbreitung plastischer Zonen sowie des Wachsens von Rissen und Schädigungszonen nur bedingt. Sie wurden deshalb durch lösungsabhängige Indikatoren ergänzt.

Im Rahmen der Behandlung der Kontaktaufgabe erfolgte in Zusammenarbeit mit dem TP A12 die Betrachtung des 2D-Problems bei einem starren Zielkörper. Beginnend mit der Begrenzung durch eine Gerade oder eine Kurve zweiter Ordnung wurde die Beschreibung der Kontakthindernisse im Verlaufe der Bearbeitung des Teilprojektes unter Berücksichtigung konkreter praktischer Erfordernisse auf kubische Splines erweitert. Die zunächst nur für den Beginn der Förderungsperiode vorgesehene Beschränkung auf reibungsfreie Vorgänge wurde ebenfalls aus praktischen Erwägungen für den betrachteten ebenen Fall beibehalten. Sukzessive Erweiterungen, besonders auf 3D-Probleme, sollten im Rahmen eines weiteren Förderungszeitraumes vorgenommen werden.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

Ein Hauptziel der Arbeiten in den beiden ersten Förderungsperioden des Teilprojektes lag in der Entwicklung, Implementierung und praktischen Nutzung von Materialmodellen der Elastoplastizität bei kleinen und großen Verzerrungen einschließlich der Materialparameteridentifikation. Eine besondere Aufmerksamkeit galt dabei der Modellierung einer plastischen Anisotropie.

Zur Berücksichtigung spezieller anisotroper Verfestigungseffekte wurden zunächst für kleine elastisch-plastische Verzerrungen Fließbedingungen unter Verwendung kubischer Ansätze [GK01] und von Mehrflächenmodellen [KK00] untersucht. Bucher [Buch98], [Buch01b] gelang die Herleitung eines thermodynamisch vollständig konsistenten Materialmodells der finiten Elastoplastizität unter Berücksichtigung einer Substruktur. Mit diesem Konzept wird eine phänomenologische, makroskopische Beschreibung mikrostruktureller Vorgänge angestrebt und die Erfassung isotroper, kinematischer und formativer Verfestigung im Rahmen einer quadratischen Fließbedingung ermöglicht.

Das Materialmodell mit Substruktur wurde im Rahmen einer verallgemeinerten inkrementell-iterativen Strategie zur Lösung nichtlinearer Anfangswertprobleme numerisch realisiert ([MM98], [GBKM00b], [Mich01]). Die algorithmische Vorgehensweise basiert auf einem gedämpften Newton-Raphson-Verfahren mit konsistenter Linearisierung und einfacher Lastschrittkontrolle zur numerischen Lösung der Randwertaufgabe. Das thermodynamisch konsistente Materialmodell liegt als System von Differential- und algebraischen Gleichungen (DAE) vor. Die Diskretisierung des Anfangswertproblems erfolgt unter Verwendung von Einschritt-Standard-Verfahren. Zur Lösung der lokalen, nichtlinearen algebraischen Gleichungssysteme dienen gedämpfte Newton-Methoden [Buch01b].

Die allgemeine Struktur der entwickelten Materialmodelle ermöglichte die Definition einer einheitlichen Schnittstelle ([Buch01a], [BGK01]), die offen ist für eine Vielzahl analoger Formulierungen. Auf dieser Grundlage konnten beispielsweise die Schädigungsmodelle von Gurson und Rousselier erfolgreich implementiert werden [MS01]. Außerdem finden die untersuchten Materialmodelle und numerischen Verfahren praktische Anwendung im Rahmen der Parameteridentifikation durch Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder ([Krei98a], [Krei98b], [KGK98], [KBG00], [GBK01], [SK03]).

Die erwähnten Materialmodelle wurden zunächst in das (nichtadaptive) FEM-Programm SPC-PMHP für große elastisch-plastische Verzerrungen implementiert. Gleichzeitig fanden in verschiedenen Teilprojekten des Bereiches A Untersuchungen zur Adaptivität und Kontaktmodellierung im Fall der linearen Elastizität statt. In konsequenter Fortsetzung der Aufgabenstellungen des SFB 393 bestand das Ziel des Teilprojekts D1 im laufenden Berichtszeitraum darin, zur Verbesserung der Praxisrelevanz der Programme die adaptiven Methoden einschließlich der Kontaktalgorithmen mit der nichtlinearen Materialmodellierung, der Rissausbreitung und der Schädigungssimulation zu kombinieren.

2.3.1 Adaptive Vernetzungsalgorithmen zur Elementteilung und Kantenverdopplung

Für viele Aufgaben der Rissbruchmechanik (Risswachstum, Rissablenkung, Rissstopp) sind analytische Lösungen nicht verfügbar, weshalb die Anwendung numerischer Methoden notwendig ist. Zur numerischen Simulation von Risswachstum hat sich die Finite-Elemente-Methode als geeignetes Werkzeug etabliert. Bei der Simulation von Rissausbreitung entsteht algorithmisch und implementierungstechnisch das Problem der Bildung neuer belastungsfreier Oberflächen. Der Stand der Forschung wird überwiegend durch ingenieurmäßige, pragmatische Algorithmen charakterisiert [TW03, FR2003], die eine Verschiebung der Rissspitze und eine angepasste Neuvernetzung in ihrer Umgebung realisieren. In Verbindung mit adaptiven Lösungs- und Vernetzungsalgorithmen erweist sich die Modellierung von Risswachstum jedoch als ein anspruchsvolles, schwieriges Problem, das bisher noch wenig behandelt wurde. Insbesondere wenn moderne Löser mit Multi-Level-Struktur verwendet werden sollen, darf bei der Elementteilung und Kantenverdopplung die Hierarchie des Kantenbaums nicht verloren gehen, damit die Leistungsfähigkeit des iterativen PGCM-Lösers erhalten bleibt [MRS04]. Durch Anwendung einer speziellen Projektionstechnik konnte im Rahmen der Projektbearbeitung ein neuer Löser mit Multi-Level-Struktur entwickelt werden, der bei Risswachstum effektiv eingesetzt werden kann.

2.3.2 Adaptive Algorithmen und Kriterien zur Simulation der Rissausbreitung

In der modernen Festigkeitsanalyse nimmt die Bewertung des Bruchverhaltens von Werkstoffen und Bauteilen eine zentrale Rolle ein. Die Bruchmechanik bildet deshalb einen eigenen Forschungszweig der Festkörpermechanik, um die Phänomene von Rissinitiierung, Rissausbreitung und Bruch in Bauteilen zu verstehen und zu bewerten. Das Ziel ist die Entwicklung von Materialien und Bauteilen, die eine hohe Widerstandsfähigkeit und Sicherheit gegenüber Bruchvorgängen aufweisen. Dabei spielt die Simulation von Rissausbreitung eine entscheidende Rolle.

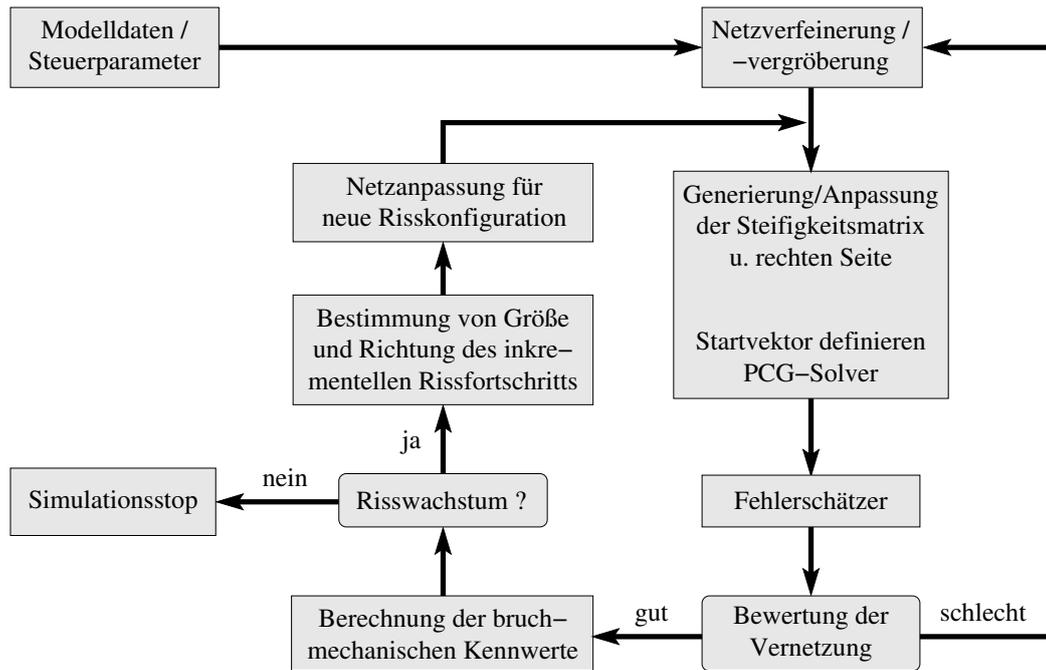


Abbildung 2.1: Programmschema

Vernachlässigt man dynamische Effekte, so ist Risswachstum als eine Folge von linearisierten quasi-statischen Randwertproblemen modellierbar und mittels FEM als eine Sequenz von Einzelrechnungen für unterschiedliche (d.h. stückweise wachsende) Risslängen simulierbar. Die Belastung kann dabei schrittweise aufgebracht werden. Nach jedem Schritt ist es erforderlich, die entsprechenden Bedingungen für Rissfortschritt an der Rissspitze zu prüfen. Sind diese Bedingungen erfüllt, wird der Riss um die inkrementelle Länge Δa in eine vorgegebene Richtung verlängert. Dabei sind Δa und die Richtung vorgegebene Parameter, deren Größen aus kontinuumsmechanischer Sicht vom Material und im Allgemeinen von der konkreten Problemstellung abhängen.

Prinzipiell erfordert die FE-Simulation des Risswachstums die wiederholte Abarbeitung folgender Teilschritte:

1. FE-Analyse der Struktur mit Riss
2. Berechnung der bruchmechanischen Kenngrößen
3. Berechnung der Größen für den inkrementellen Rissfortschritt
4. Neuvernetzung der veränderten Risskonfiguration (weiter mit Punkt 1)

Ein Ziel der Projektbearbeitung war die vollständige Integration dieser Teilschritte zu einem FE-Programm. Somit entstand ein effizientes Werkzeug zur Simulation von Risswachstum, in dessen Rahmen adaptive und bruchmechanisch gesteuerte Vernetzungsstrategien im Verbund mit modernen hierarchischen Gleichungslösern angewendet werden. Das entwickelte Programmschema ist in Abbildung 2.1 zu sehen.

Folgende Teilaufgaben mussten dazu bearbeitet werden:

- Weiterentwicklung der vorhandenen adaptiven Vernetzungs- und Lösungsalgorithmen, die eine effektive Simulation von Rissausbreitung ermöglichen
- Erarbeitung von geeigneten FEM-Techniken zur Bestimmung der bruchmechanischen Beanspruchungsparameter
- Festlegung/Findung eines geeigneten Kriteriums zur Rissausbreitung
- Erarbeitung einer bruchmechanisch gesteuerten Vernetzungsstrategie
- Einbau und Erprobung der erarbeiteten Techniken in adaptiv-hierarchische Löser

2.3.3 Realisierung von Algorithmen zur Übertragung von Zustandsgrößen bei adaptiver Netzverfeinerung

Bei geometrisch und physikalisch nichtlinearen Problemen wird die äußere Belastung in einzelnen Lastschritten aufgebracht. Wegen der Abhängigkeit von der Belastungsgeschichte ist es bei einer Netzanpassung (Verfeinerung und/oder Vergrößerung) im Rahmen der nichtlinearen FEM erforderlich, die Zustandsgrößen (Spannungen, innere Variablen) vom alten auf das neue Netz zu übertragen. Jedes einzelne Lastinkrement kann im Sinne einer adaptiven Strategie als separates Teilproblem angesehen werden, das folgende Schritte beinhaltet:

- Lösung des Anfangsrandwertproblems
- Fehlerschätzung
- Netzanpassung
- Übertragung der Feldgrößen

In Abbildung 2.2 ist die adaptive Vorgehensweise für lineare und nichtlineare Probleme schematisch dargestellt, wie sie in den FEM-Programmen SPC-PM2Ad (lineare Elastizität) und SPC-PM2AdN1 (Simulation großer elastisch-plastischer Verzerrungen) des SFB 393 realisiert wurde.

Vor allem in der Elastoplastizität großer Deformationen (Umformtechnik) hat sich ein Übertragungsalgorithmus bewährt, der besonders bei einer vollständigen Neuvernetzung Anwendung findet [Orti91, Four95]:

- L^2 -Projektion der Zustandsgrößen von den Gaußpunkten auf die Knoten des bisherigen Netzes
- Generierung eines neuen Netzes, Ermittlung der lokalen Koordinaten der Knoten des neuen Netzes im alten Netz (Suchprozess, inverse isoparametrische Abbildung)
- Bestimmung der Zustandsgrößen in den Knoten des neuen Netzes durch Interpolation mit den Formfunktionen sowie den Zustandsgrößen in den Knoten des alten Netzes
- Interpolation mit den Formfunktionen des neuen Netzes zur Berechnung der Zustandsgrößen in den Gaußpunkten des neuen Netzes

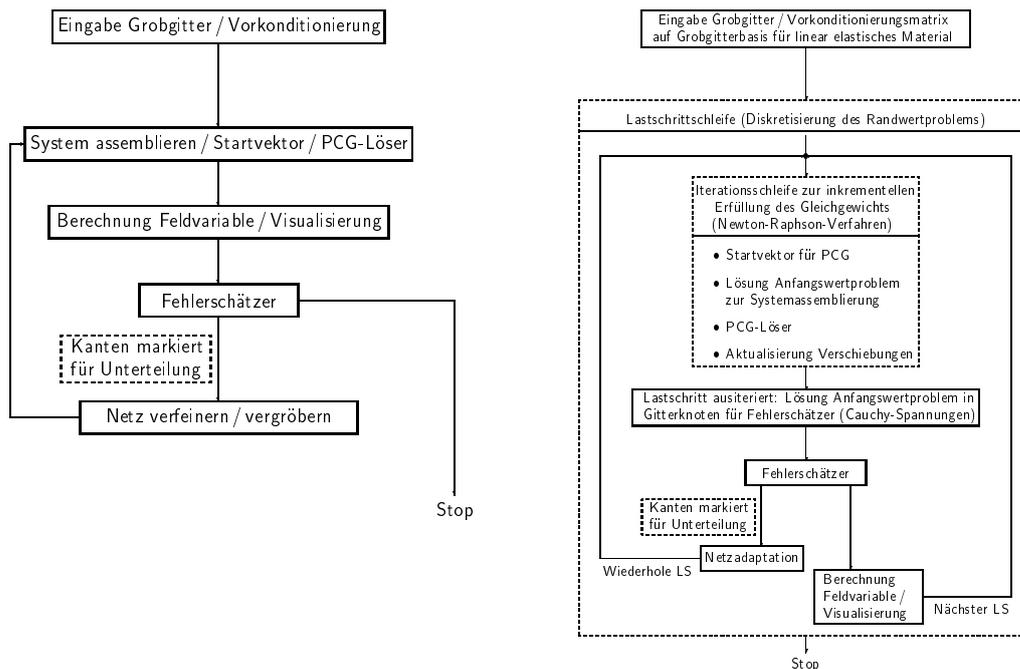


Abbildung 2.2: Allgemeine Schemata adaptiver FE-Algorithmen: Lineares Problem (links), nichtlineares Problem (rechts).

Bei den aus der Literatur bekannten adaptiven Vorgehensweisen erfolgt die Übertragung vom alten auf das neue Netz gewöhnlich mittels spezieller Extrapolationsalgorithmen. Zusätzlich wird an gemeinsamen Knoten unterschiedlicher Elemente eine Glättung der elementbezogenen Feldgrößen durchgeführt [SS03].

In der laufenden Förderungsperiode wurde zur Übertragung der Feldgrößen im Teilprojekt D1 eine neue Strategie entwickelt. Sie unterscheidet sich von herkömmlichen Vorgehensweisen hauptsächlich dadurch, dass das Anfangswertproblem nicht nur in den Gaußpunkten integriert wird, sondern auch in den Elementknoten. Damit werden die Feldgrößen in den Knoten konsistent zu denen in den Stützstellen mit der gleichen Genauigkeit ermittelt. Mit Hilfe der Formfunktionen erfolgt anschließend ihre Übertragung auf die neuen Knoten und Gaußpunkte des verfeinerten Netzes. Die ermittelten Knoten- und Gaußpunktwerte werden elementbezogen abgespeichert. Die Übertragung der Zustandsgrößen führt zur Verletzung des Gleichgewichts und möglicherweise zu lokal nicht ausreichend gut erfüllten Fließbedingungen auf dem neuen Netz.

Erfolgt keine Wiederholung des Lastschrittes, basiert die weitere Berechnung auf einer vom Fehlerschätzer als zu ungenau identifizierten Lösung. Wie beispielsweise Untersuchungen von Habraken und Cescotto [Hab90] ergeben haben, kann der Fehler dabei erheblich sein. Zur Einstellung des Gleichgewichts lässt sich dem nächsten Lastschritt ein Iterationsprozess vorschalten [Han99], der einen entsprechenden numerischen Aufwand erfordert. Weiterhin ist es auch möglich, das ‐gestörte‐ Residuum im nächsten Lastschritt zu berücksichtigen.

Im Rahmen der in D1 verfolgten Strategie wird der aktuelle Lastschritt $[t_n, t_{n+1}]$ generell mit dem verfeinerten Netz wiederholt, wenn die Fehlerschätzung eine unzureichende Güte der Lösung zum Zeitpunkt t_{n+1} ergibt. Im Rahmen der verwendeten impliziten Einschrittverfahren zur Zeitdiskretisierung müssen daher die Werte der Feldvariablen zu

Beginn des Lastschrittes (bei t_n) auf die Knoten und Gaußpunkte der neuen Elemente übertragen werden. Zusätzlich wird zur Verbesserung des Konvergenzverhaltens des Randwertproblems eine Nachiteration zur Zeit t_n unter konstanter äußerer Belastung durchgeführt.

2.3.4 Adaptive Algorithmen zur Vergrößerung von Vernetzungen

Bei adaptiver Netzverfeinerung werden Elementteilungen in Gebieten vorgenommen, die durch die Fehleranalyse als kritisch identifiziert wurden. Andere, homogenere Regionen können mit gröberer Netzen analysiert werden. In bestimmten Fällen kann sich die Lage der Zonen mit größeren Gradienten während der Belastung ändern (Abrollvorgänge, Kontaktprobleme, Risswachstum, Schädigungszonen). Um nicht unnötig feine Netze beizubehalten, gibt es in SPC-PM2AdN1 die Möglichkeit, in vorangegangenen Schritten unterteilte Elemente wieder zusammenzufügen und damit das Netz an weniger kritischen Stellen zu vergrößern.

Bei der Vergrößerung treffen an den Eckknoten der Kanten zwischen den ursprünglichen Sohlelementen unterschiedliche Knotenwerte aufeinander. Mit dem arithmetischen Mittel und der Methode der kleinsten Fehlerquadrate wurden zwei Verfahren untersucht, sie zusammenzufügen.

2.3.5 Fehlerschätzung bei nichtlinearen Problemen

Im Teilprojekt A3 wurden in den bisherigen Förderungsperioden unterschiedliche Fehlerschätzer entwickelt und getestet. Im Rahmen der linearen Elastizität wurde dabei insbesondere der residuale a posteriori Energienorm-Fehlerschätzer untersucht:

$$\eta_T^2 \approx \frac{h_T^2}{\lambda_D} \int_{\Omega_T} |\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h) + \mathbf{f}_h|^2 d\Omega_T + \sum_{E \in \partial\Omega_T} \frac{h_T}{\lambda_D} \int_E |[\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h) \mathbf{n}_E]|^2 ds_E \quad (2.1)$$

Eine verbesserte Version dieses Fehlerschätzers bezüglich anisotroper Elemente wurde in [Ku00a] veröffentlicht. Weiterhin wurde gemeinsam mit Verfürth gezeigt, dass das Elementresiduum vernachlässigt werden kann und somit allein die Kantensprünge bestimmend sind [KV00]. Diese Aussage gilt bei finiter Elastoplastizität nur noch für die Verwendung von Elementen mit linearen Formfunktionen. Daher ergibt sich bei Elementansätzen höherer Ordnung und großen elastisch-plastischen Verzerrungen die Notwendigkeit, beide Anteile des Fehlerschätzers zu berücksichtigen.

In der linearen Elastizität wird die materialabhängige Konstante λ_D gewöhnlich mit dem Elastizitätsmodul approximiert [AMW93, GKZB83]. Eine exakte Angabe für diese Interpolationskonstante ist im nichtlinearen Fall nicht möglich. Es ist aber zu erwarten, dass sie in der gleichen Größenordnung wie bei linearen Problemen liegt. Daher wird auch im Rahmen des vorgestellten Modells der finiten Elastoplastizität λ_D durch den Elastizitätsmodul angenähert. Da die Fehlerauswertung relativ zu einer vorgegebenen Schranke erfolgt, spielt bei homogenem Material die Größe der Interpolationskonstante keine Rolle für die Netzanpassung. Treten im betrachteten Gebiet beispielsweise elastische und plastische Regionen gleichzeitig auf, wird mit der genannten Approximation von λ_D der Fehler für plastifizierte Elemente unterschätzt. Ausgleichend dazu wurde deshalb zusätzlich ein Fehlerindikator bezüglich der Erfüllung der Fließbedingung implementiert.

2.3.6 Bearbeitung des Kontaktproblems unter Berücksichtigung von Adaptivität und Reibung

Beim Kontaktproblem muss das Verschiebungsfeld geeigneten geometrischen Kontaktbedingungen sowie Reibungsrandbedingungen genügen. Die mathematische Formulierung führt gewöhnlich auf Variationsungleichungen. Sie werden diskretisiert mit Finite-Element- [Kiku88] und Rand-Element-Methoden, letztere vorwiegend für den elastischen Kontakt. Für die Lösung der beiden Ansätze werden unterschiedliche Verfahren wie aktive-Mengen-Strategien [Kara89], Fixpunktiterationen [Neca80, Hasl83], Penalty- und Newton-Methoden sowie die Methode der Lagrange-Multiplikatoren [Gwin83, Wrig85, Curn88, Chris99] und auch die Methode der quadratischen Optimierung [Klar86] eingesetzt. Im Falle des elastisch-plastischen Materialverhaltens erfolgte die Anwendung von adaptiven Finite-Element-Methoden [Wrig95], bei speziellen Aufgaben aber auch der Rand-Element-Methode [Hues94]. Die Kombination von Kontaktlösern und adaptiver FEM wird ausführlich in [CSW99] behandelt.

Unter dem Begriff Kontaktkinematik werden die Penetrationsfunktion und der relative Gleitzustand beim reibungsbehafteten Kontakt zusammengefasst. Zur Beschreibung des Kontaktes zweier Körper werden diese in einen Kontakt- und einen Zielkörper eingeteilt, wobei überprüft wird, ob Knoten des Kontaktkörpers in den Zielkörper eindringen. Unter Einführung einer Abstandsfunktion (Ungleichungsnebenbedingung) kann zwischen den Fällen "kein Kontakt", "perfekter Kontakt" und "Penetration" unterschieden werden. Von den eingangs beschriebenen Lösungsmethoden werden im Rahmen kommerzieller Programme zumeist Penalty-Verfahren oder das Verfahren der Lagrange-Multiplikatoren eingesetzt. In diesen Fällen werden die Ungleichungsnebenbedingungen als Gleichungsnebenbedingungen, die sich während des inkrementellen Vorgehens ändern, dargestellt. Aus der Variationsungleichung entsteht dann eine Variationsgleichung mit Kontaktbeiträgen für die aktive Kontaktzone.

Als neue Variante für den Fall des reibungsfreien Kontaktproblems eines elastischen Körpers mit einem festen Hindernis wurde in der laufenden Förderungsperiode im TP A12 für die numerische Lösung ein Projektionsverfahren entwickelt. Dieses nutzt die implementierten Projektionsmethoden für hängende Knoten [Mey99] und spezielle Klassen von Randbedingungen [Mey02] sowie die Einbettung in die adaptive Netzverfeinerung aus (siehe dazu auch die Ausführungen zum TP A12). Im Zusammenwirken mit effektiven Vorkonditionierern zur Lösung des resultierenden Systems ergibt sich auf diese Weise ein effizienter Algorithmus für das lineare Elastizitätsproblem, der offen ist für Erweiterungen auf geometrisch und physikalisch nichtlineare Modelle.

2.3.7 Adaptive Algorithmen zur Steuerung und Simulation der Ausbreitung von Schädigungszonen

In den vergangenen zehn Jahren wurden verschiedene schädigungsmechanische Modelle für die Beschreibung des duktilen Versagens metallischer Werkstoffe entwickelt. Am bekanntesten sind die Modelle von Gurson-Tvergaard-Needleman und Rousselier, die die Entstehung, das Wachstum und die Koaleszenz von Mikroporen bis zur makroskopischen Anrissbildung als Folge der plastischen Verformung und Spannungsmehrachsigkeit beschreiben. Diese Modelle wurden bereits erfolgreich auf die Simulation von Umformprozessen (Blechumformung, Massivumformung, Crashsimulation) und von duktilem,

stabilen Risswachstum eingesetzt. Vor allem in der Zähbruchmechanik konnten damit wichtige Fragen des Einflusses der Mehrachsigkeit auf die duktilen Risswiderstandskurven in Bruchproben und Bauteilen gelöst werden. Eine Kombination von adaptiver Vernetzung und Schädigungsmechanik wurde bisher nur in wenigen Publikationen (siehe z. B. [Gel98]) vorgenommen, wobei es sich um das übliche Remeshing nach großen Netzverzerrungen in der Massivumformung handelt.

Da beide Schädigungsmodelle im vorigen Antragszeitraum in SPC-PMHP implementiert wurden und die Struktur der Materialgleichungen mit denjenigen der Elasto-Plasto-Mechanik analog ist, können die dafür im Teilprojekt entwickelten adaptiven Techniken 2.3.3 - 2.3.5 sinngemäß übernommen und effektiv angewandt werden. Damit ist es möglich, in Abhängigkeit vom Lösungsverhalten eines schädigungsmechanischen Problems, den lokalen Fehler a posteriori zu schätzen und das FE-Netz entsprechend zu verfeinern bzw. wieder zu vergrößern und auch die schädigungsmechanischen Zustandsvariablen zu übertragen. Diese Aufgabe des Projektes befindet sich z. Z. in intensiver Bearbeitung und soll bis Mitte des Jahres abgeschlossen sein. Auf dieser Basis sind Anwendungsrechnungen für Probleme mit geringen Gradienten durchführbar, z. B. in der Umformtechnik, um die Ausbreitung von Schädigungsgebieten effizient zu berechnen.

Schwieriger verhält sich die Sache hingegen bei der Simulation der duktilen Ausbreitung von Rissen, wo in der Schädigungszone starke Feldgradienten auftreten, die in Verbindung mit den entfestigenden Schädigungsgesetzen zu Lokalisierungen, zum Verlust der Elliptizität [SMS94] und somit zur Netzabhängigkeit der numerischen Lösung führen, die selbst mit Regularisierungsverfahren auf Basis nichtlokaler integraler oder Gradientenmethoden nicht vollständig vermeidbar sind, siehe z. B. [SR00, JK03, Reu03]. Deshalb müssen neben numerischen Fehlerkriterien auch werkstoffmechanische Indikatoren für die Netzanpassung formuliert werden. Das bedeutet im einfachsten Fall die Vorgabe einer einheitlichen, nach unten beschränkten Elementgröße in der Schädigungszone am Riss, die mit einer physikalischen Werkstoffstrukturlänge korreliert. Vom Standpunkt der Kontinuumsmechanik und Numerik wäre es richtiger, aber auch weitaus komplizierter, beim Erreichen des lokalen Versagens in einem Materialpunkt vor der Risspitze, das z. B. durch die Indefinitheit des akustischen Tensors angezeigt wird, den Bruchprozess durch Trennung des Kontinuums auch im numerischen Modell zu vollziehen. Dafür bieten sich die in 2.3.1 erarbeiteten Algorithmen zur Elementteilung und Kantenverdopplung an. Es wird angestrebt, diese Aufgaben noch bis Ende des Projektzeitraums zu lösen.

Literaturverzeichnis zu 2.3

- [AMW93] T. Apel, R. Mücke and J.R. Whiteman. An adaptive finite element technique with a-priori mesh grading. Report 9, BICOM Institute of Computational Mathematics, 1993.
- [BGK01] A. Bucher, U.-J. Görke and R. Kreißig. Development of a generalized material interface for the simulation of finite elasto-plastic deformations. *Int. J. Sol. Struct.*, 38/01:9423–9436, 2001.

- [Buch98] A. Bucher. Thermodynamisch konsistente konstitutive Gleichungen zur Beschreibung finiter elasto-plastischer Deformationen. In: *Modellierung und Identifikation*, S. Hartmann, P. Haupt and V. Ulbricht (Eds.), Tagungsband zum 2. Workshop der Graduiertenkollegs Identifikation von Material- und Systemeigenschaften (Kassel) und Kontinuumsmechanik inelastischer Festkörper (Dresden/Chemnitz), Gesamtschul-Bibliothek Kassel, 1998.
- [Buch01a] A. Bucher. Realisierung eines allgemeinen Materialteils für ein “paralleles” FEM-Programm zur Berechnung großer elastisch-plastischer Deformationen. In: *Tagungsband zum 3. Workshop der Graduiertenkollegs Identifikation von Material- und Systemeigenschaften (Kassel) und Kontinuumsmechanik inelastischer Festkörper (Dresden/Chemnitz)*, Gesamtschul-Bibliothek Kassel, 2001.
- [Buch01b] A. Bucher. *Deformationsgesetze für große elastisch-plastische Verzerrungen unter Berücksichtigung einer Substruktur*. Dissertation, TU Chemnitz, Institut für Mechanik, Bericht 4/01, 2001.
- [Chris99] P.W. Christensen and A. Klarbring. *Newton's method for frictional contact problems*, ECCM, 1999.
- [CSW99] C. Carstensen, O. Scherf and P. Wriggers. Adaptive finite elements for elastic bodies in contact. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 20/99:1605–1626, 1999.
- [Curn88] A. Curnier and P. Alart. A generalized newton method for contact problems with friction. *J. Mech. Theor. Appl.*, 7/88:67–82, 1988.
- [Four95] L. Fourment and J.L. Chenot. Error estimators for viscoplastic materials, Application to forming processes. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 38/95:469–490, 1995.
- [FR2003] M. Fullan and H.A. Richard. Finite-element-based fatigue crack growth simulation in real structures. *Key Engineering Materials*, 251/252:79–84, 2003.
- [GBK01] U.-J. Görke, A. Bucher and R. Kreißig. Ein Beitrag zur Materialparameteridentifikation bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen durch Analyse inhomogener Verschiebungsfelder mit Hilfe der FEM. TU Chemnitz, Preprint SFB393/01–03, 2001.
- [GBKM00b] U.-J. Görke, A. Bucher, R. Kreißig and D. Michael. Ein Beitrag zur Lösung von Anfangs-Randwert-Problemen einschließlich der Materialmodellierung bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen mit Hilfe der FEM. TU Chemnitz, Preprint SFB393/00–09, 2000.
- [Gel98] J.C. Gelin Modelling of damage in metal forming processes. *Journal of Materials Processing Technology*, 80/81:24–32, 1998.
- [GK01] G. Grewolls and R. Kreißig. Anisotropic hardening - numerical application of a cubic yield theory and consideration of variable r -values for sheet metal. *Eur. J. Mech. (A/Sol.)*, 20/01:585–599, 2001.
- [GKZB83] J.P. Gago, D. Kelly, O.C. Zienkiewicz and I. Babuška. A-posteriori error analysis and adaptive processes in the finite element method. Part I: Error analysis. Part II: Adaptive processes. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 19/83:1593–1656, 1983.
- [Gwin83] J. Gwinner. A penalty approximation for a unilateral contact problem in nonlinear elasticity. *Math. Meth. Appl. Sci.*, 11/83:447–458, 1983.

- [Hab90] A. Habraken and S. Cescotto. An automatic remeshing technique for finite element simulation of forming processes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 30/90:1503–1525, 1990.
- [Han99] C.S. Han. *Eine adaptive Finite-Element-Methode für elasto-plastische Schalenprobleme im unilateralen Kontakt*. Dissertation, Universität Hannover, IBNM-Bericht Nr. F99/2, 1999.
- [Hasl83] J. Haslinger. Approximation of the Signorini problem with friction obeying the Coulomb law. *Math. Meth. Appl. Sci.*, 5/83:422–437, 1983.
- [Hues94] A. Huesmann and G. Kuhn. Behandlung elastoplastischer Kontaktprobleme mit der Randelementmethode. *ZAMM*, 74/94:T254–T256, 1994.
- [JK03] J. Jackiewicz and M. Kuna. Non-local regularisation for FE simulation of damage in ductile materials. *Comp. Mat. Sci.*, 28/03:684–695, 2003.
- [Kara89] G. Karami. *Boundary Element Methods for Two Dimensional Contact Problems*. Springer, New York/Berlin/Heidelberg, 1989.
- [KBG00] R. Kreißig, U. Benedix and U.-J. Görke. About some statistical aspects of the identification of parameters of elasto-plastic material behaviour. *Arch. Appl. Mech.*, 71/01:123–134, 2001.
- [KKG98] S. Kretzschmar, U.-J. Görke and R. Kreißig. Identifikation von Materialparametern durch Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder. *ZAMM*, 78/98:S559–S560, 1998.
- [Kiku88] N. Kikuchi and J.T. Oden. *Contact Problems in Elasticity: A Study of Variational Inequalities and Finite Element Methods*. SIAM, Philadelphia, 1988.
- [KK00] I.Yu. Kadashevich and R. Kreißig. Description of cyclic torsion on the basis of the multi-surface model with cross-links. In: *Nelinejnye problemy mehaniki i fiziki deformirujemogo tverdogo tela*, K. F. Černycha (Ed.), Universität St. Petersburg, 2000.
- [Klar86] A. Klarbring. A mathematical programming approach to three-dimensional contact problems with friction. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 58/86:175–200, 1986.
- [Krei98a] R. Kreißig. Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder zur Identifikation der Parameter elastisch-plastischer Deformationsgesetze. *Forsch. Ingenieurwes.*, 64/98:99–109, 1998.
- [Krei98b] R. Kreißig. Numerische Methoden für die Parameteridentifikation. *ZAMM*, 78/98:S555–S558, 1998.
- [Ku00a] G. Kunert. An a posteriori residual error estimator for the finite element method on anisotropic tetrahedral meshes. *Numer. Math.*, 86(3):471–490, 2000.
- [KV00] G. Kunert and R. Verfürth. Edge residuals dominate a posteriori error estimates for linear finite element methods on anisotropic triangular and tetrahedral meshes. *Numer. Math.*, 86(2):283–303, 2000.
- [Mey99] A. Meyer. Projected PCGM for Handling Hanging Nodes in Adaptive Finite Element Procedures. TU Chemnitz, Preprint SFB393/99–25, 1999

- [Mey02] A. Meyer. Projection Techniques embedded in the PCGM for Handling Hanging Nodes and Boundary Restrictions. In: *Engeneering Computational Technology*, B.H.V. Topping and Z. Bittnar (Eds.), Saxe-Coburg Publ., Stirling, Scotland, 147–165, 2002.
- [Mich01] D. Michael. Kontinuumstheoretische Grundlagen und algorithmische Behandlung von ausgewählten Problemen der assoziierten Fließtheorie. TU Chemnitz, Preprint SFB393/01–06, 2001.
- [MM98] D. Michael and M. Meisel. Some remarks to large deformation elasto-plasticity (continuum formulation). TU Chemnitz-Zwickau, Preprint SFB393/98–28, 1998.
- [MRS04] A. Meyer, F. Rabold and M. Scherzer. Efficient Finite Element Simulation of Crack Propagation. Preprint SFB393/04–01, TU Chemnitz, 2004.
- [MS01] D. Michael and M. Springmann. Zur numerischen Simulation des Versagens duktiler metallischer Werkstoffe. Preprint SFB393/09–01, 2001.
- [Neca80] J. Necăs, J. Jarušek and J. Haslinger. *On the solution of the variational inequality to the Signorini problem with small friction*. Bolletino U.M.I., 17, 1980.
- [Orti91] M. Ortiz and J.J. Quigley. Adaptive mesh refinement in strain localization problems. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 90/91:781–804, 1991.
- [Reu03] F. Reusch. *Entwicklung und Anwendung eines nicht-lokalen Materialmodells zur Simulation duktiler Schädigung in metallischen Werkstoffen*. Dissertation, Universität Dortmund, 2003.
- [SK03] M. Springmann, M. Kuna. Identification of material parameters of the Rousselier model by non-linear optimization. *Computational Materials Science*, 26:202–209, 2003.
- [SMS94] P. Steinmann, C. Miehe and E. Stein. Comparison of different finite deformation inelastic damage models within multiplicative elasto-plasticity for ductile materials. *Comp. Mech.*, 13/94:458–474, 1994.
- [SR00] T. Svedberg and K. Runesson. An adaptive finite element algorithm for gradient theory of plasticity with coupling to damage. *Int. J. Sol. Struct.*, 48/50:7481–7499, 2000.
- [SS03] E. Stein and M. Schmidt. Adaptive FEM for Elasto-plastic Deformations. In: *Error-controlled Adaptive Finite Elements in Solid Mechanics*, E. Stein (Ed.), John Wiley & Sons, Chichester, 53–107, 2003.
- [TW03] A. Tabiei and J. Wu. Development of the DYNA3D simulation code with automated fracture procedure for brick elements. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 57/03:1979–2006, 2003.
- [Wrig85] P. Wriggers, J. Simo and R. Taylor. Penalty and Augmented Lagrangian Formulations for Contact Problems. In: *Proceedings of NUMETA Conference*, J Middleton and G. Pande (Eds.), Balkema, Rotterdam, 1985.
- [Wrig95] P. Wriggers and O. Scherf. An adaptive finite element algorithm for contact problems in plasticity. *Comp. Mech.*, 17/95:88–97, 1995.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Adaptive Vernetzungsalgorithmen zur Elementteilung und Kantenverdopplung

Weiterentwicklung der vorhandenen adaptiven Vernetzungs- und Lösungsalgorithmen

Das singuläre Lösungsverhalten an der Rissspitze erfordert immer eine Verfeinerung des Netzes in deren Umgebung, welche mit Hilfe einer adaptiven automatischen Verfeinerungstechnik realisiert wird. Hierzu wird ein fehlergesteuertes Verfahren angewandt, das auch eine spätere Netzvergrößerung ermöglicht, wenn sich die Rissspitze weiter bewegt. Der allseits bekannte residuumbasierte Fehlerschätzer

$$\eta_T^2 = \sum_{E \subset T} h_E \|\llbracket \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \rrbracket\|_{L_2(E)}^2 \quad (2.2)$$

kommt als Fehlerindikator für jedes finite Element T zum Einsatz. Er misst die Größe des Spannungssprungs $\llbracket \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \rrbracket$ entlang der Kante E eines Elements. Im Falle isotroper finiter Elemente ist die Wichtung h_E gleich dem Verhältnis der Kantenlänge zum Elastizitätsmodul. Dann gibt

$$\eta = \left(\sum_{\forall T} \eta_T^2 \right)^{1/2} \quad (2.3)$$

eine Näherung für die totale H^1 -Fehlergröße (bis auf eine unbekannte Konstante) an. Folglich wird ein Element T mit

$$\eta_T^2 > \alpha_{\text{refine}} \cdot \eta^2 \quad (2.4)$$

verfeinert, bzw. falls

$$\eta_T^2 < \alpha_{\text{coarse}} \cdot \eta^2 \quad (2.5)$$

gilt, wird das Netz in der Umgebung des Elementes T vergrößert. Im Folgenden wählen wir $\alpha_{\text{refine}} \approx 0.8$ und $\alpha_{\text{coarse}} \approx 10^{-3}$. Falls nicht genügend Elemente ($\approx 10\%$) zur Verfeinerung gefunden werden, wird α_{refine} schrittweise auf 0.05 reduziert. In Abbildung 2.3 sind die beiden implementierten Varianten zur Teilung von Dreieckelementen zu sehen.

Bei der adaptiven Herangehensweise entsteht eine Folge von Netzen. Für jedes dieser Netze muss ein lineares Gleichungssystem iterativ gelöst werden. Deshalb wurde ein sehr zeiteffizientes Lösungsverfahren angestrebt, das in folgender Weise charakterisierbar ist [MRS04, MeRaS04]:

- Für jedes Element werden nur die Elementmatrizen zusammen mit den Elementdaten gespeichert. Der Zusammenbau irgendeiner Gesamtsteifigkeitsmatrix ist nicht

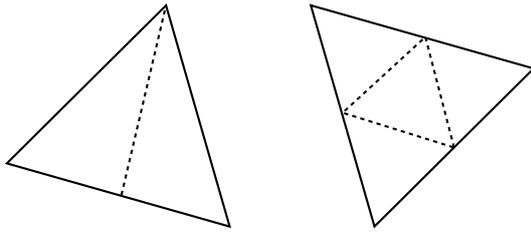


Abbildung 2.3: Elementteilungsvarianten: „grüne“ Teilung (links) und „rote“ Teilung (rechts)

notwendig. Der Lösungsalgorithmus, beruhend auf der vorkonditionierten konjugierten Gradientenmethode (PCGM), „multipliziert“ einfach Element für Element. Das besitzt den Vorteil, dass nur für neue Elemente, die während des Verfeinerungsprozesses entstehen, Elementmatrizen generiert werden müssen.

- Der Vorkonditionierer nutzt die hierarchische Datenstruktur, die durch die Unterteilung der Kanten des Netzes entsteht. Für ebene Problemstellungen führt der einfache „Hierarchische Basis“-Vorkonditionierer (HB) [Yser90] zu einem sehr schnellen Solver, weil:
 - a) Alle Informationen zur Implementierung des HB, welche von der Netzverfeinerung genutzt werden, im „Kanten-Unterteilungsbaum“ enthalten sind.
 - b) Die Anzahl der arithmetischen Operationen gleich $3N$ für N Unbekannte im vorliegenden Netz ist.
 - c) Einerseits die Konditionszahl der vorkonditionierten Steifigkeitsmatrix (gleich der Konditionszahl der finiten Elementsteifigkeitsmatrix in Bezug auf die hierarchische Basis des Ansatzraumes) wie $(\log N)^2$ wächst. Andererseits liegt ein sehr guter Startvektor vor, der in die adaptive Schleife auf jeder neuen Lösung eingebettet wird (nur hochfrequente Fehler). Dies führt zu einer fast konstanten Anzahl von Iterationen während der Verfeinerung.

Rissausbreitung mittels adaptiv-iterativer Techniken

Durch die bruchmechanische Auswertung der FE-Lösung erhält man die nötigen Informationen für das inkrementelle Risswachstum, d.h. eine Richtung und eine Länge Δa , durch die die neue Risspitze definiert wird. Damit wird im aktuellen Netz von der aktuellen Risspitze P zur neuen Risspitze P_{neu} eine Strecke L ($|L| \leq \Delta a$) erzeugt, an der die neue Rissfläche generiert werden soll. Dazu sind neue Knoten (und somit auch neue Kanten) entlang der Strecke L zu definieren. Sie können zweierlei Art von Freiheitsgraden besitzen, die den Verschiebungen für die Rissflächen u_+ und u_- entsprechen. Ein Rissuferenelement, welches „-“-Freiheitsgrade enthält, wird dann als „-“-Element bezeichnet. Entsprechend enthalten „+“-Elemente an der gegenüberliegenden neuen Rissfläche „+“-Freiheitsgrade.

Der erste Schritt zur Modellierung der Rissausbreitung ist die Generierung solcher „-“- und „+“-Elemente durch eine Teilung aller Elemente, die durch die Strecke L geschnitten werden. Dabei wird für jede geschnittene Kante $E=(\mathbf{a},\mathbf{b})$ (mit $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^2$ als die Endknoten der Kante) des aktuellen Netzes folgender Algorithmus abgearbeitet:

Es wird der Schnittpunkt Q der Strecke L mit der Kante E berechnet, für den die

Beziehung gilt:

$$\mathbf{Q} = \alpha \mathbf{a} + (1 - \alpha) \mathbf{b}. \tag{2.6}$$

Wenn $\alpha \approx 1$, dann wird der Endknoten \mathbf{a} der Kante E auf den Schnittpunkt Q verschoben. Ist $\alpha \approx 0$, wird der Endknoten \mathbf{b} nach Q verschoben. Trifft keine dieser beiden Bedingungen zu, dann wird die Kante E in die zwei Kanten $E_1=(\mathbf{a},\mathbf{Q})$ und $E_2=(\mathbf{Q},\mathbf{b})$ geteilt.

Durch das Verschieben der Endknoten der Kante zum Punkt Q werden ungünstige Elementformen, die durch die folgende Elementteilung entstehen, vermieden. Alle Elemente, bei denen zwei Kanten durch die Strecke L geschnitten werden, sind durch eine gewöhnliche „rot“-Teilung zu verfeinern. Eine „grün“-Teilung erfolgt für die Elemente, welche nur an einer Elementkante geschnitten werden. Die restlichen Elemente bleiben unverändert. Durch diesen einfachen Algorithmus erzeugt man entlang der Strecke L im Netz neue Kanten. In Abbildung 2.4 ist ein entsprechendes Beispiel zu sehen. Abschließend definiert man an den neuen Knoten entlang der Strecke L die „+“- und „-“-Freiheitsgrade.

Bis jetzt ist die hierarchische Datenstruktur durch den Teilungsbaum der Kanten vorgegeben. Durch eine Kantenverdopplung entlang der Strecke L würde diese Datenstruktur zerstört werden, so dass kein effizienter hierarchischer Vorkonditionierer zur Verfügung stünde. Deshalb werden nur die Kanten entlang der Strecke L definiert, die auf die „-“-Knoten verweisen. Für jeden „-“-Knoten existiert dann eine Kopie als „+“-Knoten in der Knotenliste mit einem gegenseitigen Verweis. Ebenso verweist ein „-“-Element auf den Freiheitsgrad eines gewöhnlichen oder „-“-Knotens und die „+“-Elemente verweisen auf gewöhnliche oder „+“-Knoten. Durch die zusätzliche Definition von „-“- und „+“-Knoten erhält man insgesamt folgende Unbekannte:

- n Knoten mit $2n$ gewöhnlichen Knotenfreiheitsgraden
- d „-“-Knoten mit $2d$ Knotenfreiheitsgraden und
- d „+“-Knoten mit zusätzlichen $2d$ Knotenfreiheitsgraden.

Für das aktuelle Netz hat das lineare Gleichungssystem, welches nun gelöst werden muss, $N = 2(n + d + d)$ Knotenfreiheitsgrade. Der hierarchische Vorkonditionierer C^{-1} [Yser90], verfügbar durch die Informationen des Kantenbaums, funktioniert jedoch nur für $2(n + d)$ Knotenfreiheitsgrade. Für die Entwicklung eines effektiven Löser dürfen

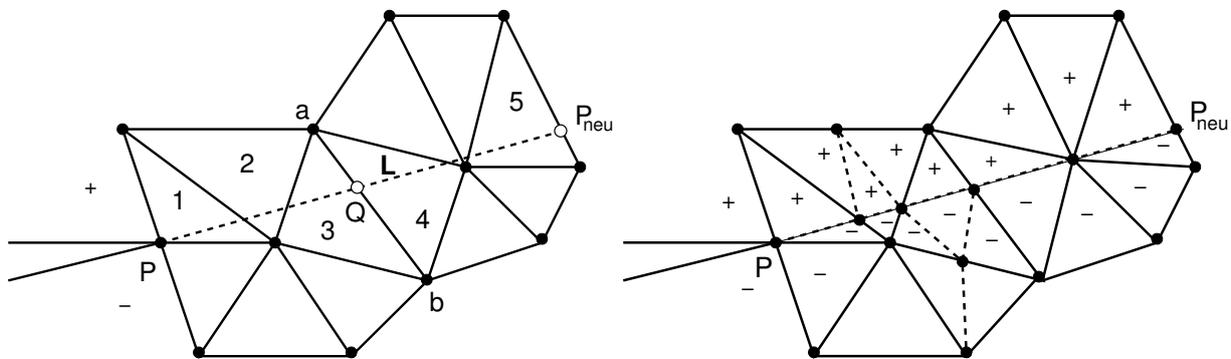


Abbildung 2.4: Netzbehandlung entlang der Strecke L: Element 1 wird „grün“, Elemente 2,3 „rot“ und Elemente 4,5 wieder „grün“ geteilt, nachdem der Knoten verschoben wurde

diese hierarchischen Informationen nicht verloren gehen (wie oben erklärt). Deshalb wird ein Restriktionsoperator \mathcal{R} mit

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}I & \mathbb{O} & \frac{1}{2}I & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & I & \mathbb{O} & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & \mathbb{O} & \mathbb{O} & I \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

definiert. Er bildet den fiktiven Raum mit $2(2n + 2d)$ Knotenfreiheitsgraden auf unseren realen Raum mit $2(n + 2d)$ Knotenfreiheitsgraden ab. Somit kann der resultierende Vorkonditionierer mittels

$$\mathcal{R} \begin{pmatrix} C^{-1} & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & C^{-1} \end{pmatrix} \mathcal{R}^T. \quad (2.8)$$

in zweifacher Anwendung von C^{-1} für das Risswachstum eingesetzt werden. Die folgende Vorgehensweise führt zur iterativen Minimierung der Residuen innerhalb des PCGM:

Es sei $\underline{r} = (\underline{r}_0^T, \underline{r}_-^T, \underline{r}_+^T)^T$ der Residuen-Vektor in der k -ten Iteration im konjugierten Gradienten-Algorithmus mit den Teilvektoren \underline{r}_0 , \underline{r}_- und \underline{r}_+ , die zu den normalen sowie „-“-Knoten und „+“-Knoten gehören. Der Vorkonditionierer ermittelt das vorkonditionierte Residuum \underline{w} als

$$\underline{w} = \mathcal{R} \begin{pmatrix} C^{-1} & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & C^{-1} \end{pmatrix} \mathcal{R}^T \underline{r}, \quad (2.9)$$

das zwei „Vorkonditionierungsaufrufe“ enthält:

$$\begin{pmatrix} \underline{w}_{0,-} \\ \underline{w}_- \end{pmatrix} := C^{-1} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\underline{r}_0 \\ \underline{r}_- \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

und (nach dem Kopieren der \underline{r}_+ zu den „-“-Daten)

$$\begin{pmatrix} \underline{w}_{0,+} \\ \underline{w}_+ \end{pmatrix} := C^{-1} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\underline{r}_0 \\ \underline{r}_+ \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Dadurch werden zwei verschiedene Werte für die Residuen an den normalen Knoten berechnet. Das Endresiduum innerhalb der behandelten Iteration ergibt sich dann als deren Mittelwert:

$$\underline{w} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\underline{w}_{0,+} + \underline{w}_{0,-}) \\ \underline{w}_- \\ \underline{w}_+ \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Die zwei Solver in (2.10) und (2.11) sind die einfachsten hierarchischen Basis-Vorkonditionierer, angewandt auf die Knotenfreiheitsgrade, welche von den Kantendaten (hierarchische Struktur) bezogen werden. Somit ist im Rahmen eines iterativen Gleichungssolvers Risswachstum modellierbar, ohne die Hierarchie der Datenstruktur zu zerstören. Dieser Solver ist effektiv für bruchmechanische Aufgaben einsetzbar.

2.4.2 Adaptive Algorithmen und Kriterien zur Simulation der Rissausbreitung

Rissausbreitungskriterium

Bei der Betrachtung ebener Probleme der Rissausbreitung sind nur die Moden I und II von Bedeutung, Mode III entfällt. Der kritische Zustand (d.h. Bruch) an der Risspitze folgt aus dem Zusammenwirken dieser beiden ebenen Moden. Zur Modellierung von Risswachstum existieren eine Reihe von Hypothesen, die sich je nach betrachtetem Material bzw. Versagensmechanismus voneinander unterscheiden. Für isotropes elastisches Materialverhalten und ebene gemischte Beanspruchungen eignet sich das klassische Kriterium der maximalen Umfangsspannung von Erdogan und Sih (1963) [ES63]. Es bestimmt die notwendigen Parameter (Größe und die Richtung der Rissausbreitung sowie die kritische Rissbelastung) anhand der Annahme, dass sich der Riss senkrecht zur maximalen Umfangsspannung $\sigma_{\varphi \max} = \sigma_{\varphi}(\varphi_0)$ ausbreiten wird, wenn der korrespondierende Spannungsintensitätsfaktor den Wert von K_{Ic} (Materialparameter) erreicht. Somit ist die Rissausbreitungsrichtung φ_0 mit

$$\varphi_0 = 2 \arctan \left(\frac{1 - \sqrt{1 + 8k^2}}{4k} \right), \quad k = \frac{K_{II}}{K_I}. \quad (2.13)$$

definiert. φ_0 hängt vom Verhältnis der beiden K-Faktoren ab und die Rissausbreitungsbedingung lautet

$$\frac{1}{4} \left[K_I \left(3 \cos \frac{\varphi_0}{2} + \cos \frac{3\varphi_0}{2} \right) - K_{II} \left(3 \sin \frac{\varphi_0}{2} + 3 \sin \frac{3\varphi_0}{2} \right) \right] - K_{Ic} = 0. \quad (2.14)$$

Letztendlich müssen die Spannungsintensitätsfaktoren K_I und K_{II} bestimmt und die Rissausbreitungsbedingung (2.14) geprüft werden. (2.13) liefert dann in Zusammenhang mit einem gegebenen Δa die neue Risspitze.

Bestimmung der K-Faktoren

Zur Bestimmung der bruchmechanischen Beanspruchungsparameter K_I und K_{II} wurden Zugänge verwendet, die ihre Ermittlung unabhängig von der Struktur der Rissvernetzung (z.B. bezüglich von Symmetrien, Elementgrößen, Knotenpositionen) gestattet. Um eine weitgehend netzunabhängige und sehr genaue Bestimmung der K-Faktoren zu erreichen, bietet sich die Berechnung des J-Integrals an. Dabei ist zu beachten, dass die direkte Anwendung der J-Integraltechnik für Mixed-Mode Belastungen die Auswertung der Spannungs- und Verschiebungsfelder direkt an der Risspitze notwendig macht (x_2 -Komponente des J-Integrals). Ohne Berücksichtigung des konkreten asymptotischen Verhaltens werden diese Felder mittels FEM immer ungenau wiedergegeben. Selbst durch eine intensive adaptive Netzverfeinerung um die Risspitze herum kann die Qualität der Approximation nicht entscheidend verbessert werden. Deshalb kam die Interaction-Integral-Technik zum Einsatz. Beim Interaction-Integral werden der FE-Lösung (Index (1)) unterschiedliche asymptotische Lösungen (Index (2)) überlagert und nur die x_1 -Komponente verwendet. Somit können die eben beschriebenen Probleme vermieden werden, da eine J-Integral-Kontur direkt bis zur Risspitze nicht mehr notwendig

ist, d.h. das Rissspitzennahfeld wird von der Auswertung ausgeschlossen. Man erhält die Bestimmungsgleichungen für die K-Faktoren der FE-Lösung:

$$K_I^{(1)} = \frac{E^*}{2K_I^{(2)}} \int_C \left[\sigma_{ij}^{(1)} \varepsilon_{ij}^{(2)} \delta_{1k} - \sigma_{ik}^{(1)} u_{i,1}^{(2)} - \sigma_{ik}^{(2)} u_{i,1}^{(1)} \right] n_k dC \quad (2.15)$$

$$K_{II}^{(1)} = \frac{E^*}{2K_{II}^{(2)}} \int_C \left[\sigma_{ij}^{(1)} \varepsilon_{ij}^{(2)} \delta_{1k} - \sigma_{ik}^{(1)} u_{i,1}^{(2)} - \sigma_{ik}^{(2)} u_{i,1}^{(1)} \right] n_k dC. \quad (2.16)$$

In (2.15) und in (2.16) werden jeweils entsprechend die Mode I - Eigenlösung und die Mode II - Eigenlösung als Referenzlösung (Index (2)) verwendet ($E^* = E/(1 - \nu^2)$ - für ebenen Verzerrungszustand).

Bruchmechanische Vernetzungsstrategie

Das FE-Netz sollte während der Simulation entsprechend der geforderten Genauigkeit der bruchmechanischen Ergebnisse optimiert sein. Da das J-Integral von der Vernetzungstopologie eher unabhängig ist, spielt nur die Netzfeinheit eine entscheidende Rolle. Die Genauigkeit der Lösung an der Rissspitze kann, neben dem verwendeten Element-Fehlerschätzer, über die Auswertung der Wegunabhängigkeit des J-Integrals beurteilt werden. Hierbei handelt es sich um ein globales Fehlermaß. Das Netz wird bis zu dem Niveau verfeinert, bei welchem die relative Abweichung des J-Integrals

$$\epsilon_J = 3 \frac{\text{MAX} (J^{(a)}, J^{(b)}, J^{(c)}) - \text{MIN} (J^{(a)}, J^{(b)}, J^{(c)})}{J^{(a)} + J^{(b)} + J^{(c)}} \quad (2.17)$$

entlang der drei unterschiedlichen Konturen (a),(b) und (c) (siehe Abbildung 2.5) kleiner als ein vorgegebener Wert ϵ ist.

Zur Erhöhung der Genauigkeit wurde versuchsweise das Netz innerhalb der Berechnungskontur für das J-Integral zwingend verfeinert. Es zeigte sich aber, dass die normale adaptive Verfeinerung um die Rissspitze oft ausreichend ist.

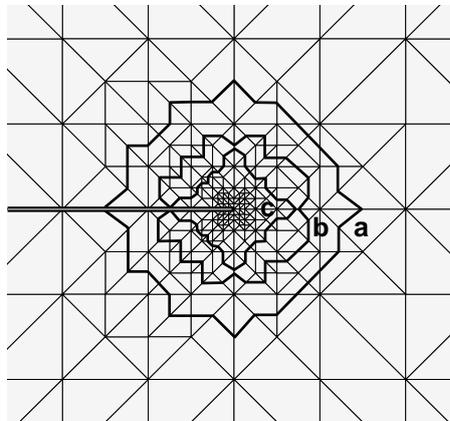


Abbildung 2.5: Finite-Element-Netz mit J-Integral-Konturen

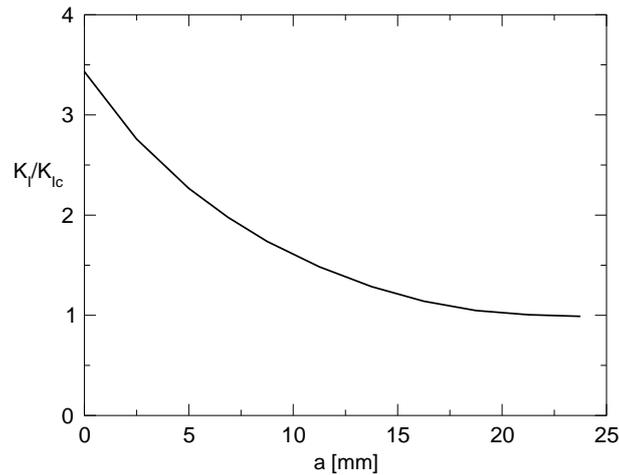


Abbildung 2.8: Änderung des Spannungsintensitätsfaktors während des Risswachstums

ein sofortiges Risswachstum hervor und der Riss wächst kontinuierlich bis zum Rissstopp. In der Abbildung 2.7 sind die adaptiv verfeinerten Vernetzungen der Probe für verschiedene Risslängen zu sehen. Die Zahl unter den Bildern gibt die Anzahl der realisierten FE-Rechnungen bis zur erreichten Risslänge an. Netzverfeinerung und Netzvergröberung während des Risswachstums sind aus den Bildern ersichtlich. Man erkennt, dass die Vernetzung an Stellen, die von der Risspitze erreicht wurden, wieder vergröbert wird, wenn ein bestimmter Abstand zur aktuellen Risspitze überschritten ist. Das vierte Bild in Abbildung 2.7 zeigt die endgültige Position der Risspitze für die vorgegebenen Materialparameter und Belastung, d.h. der Riss hat angehalten. In Abbildung 2.8 ist die Abhängigkeit des Spannungsintensitätsfaktors bezüglich der Risslänge gezeigt.

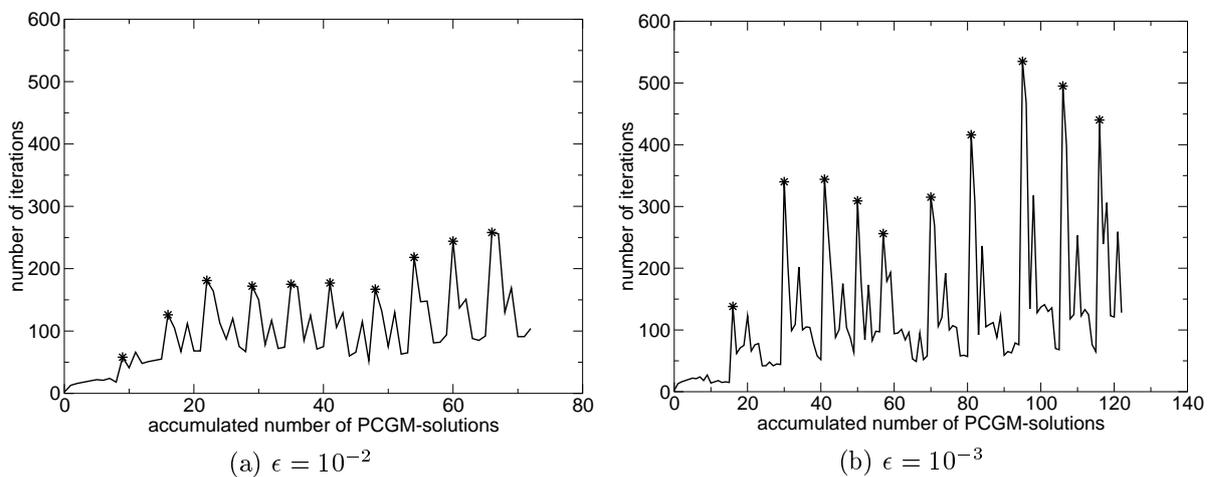


Abb. 2.9: Anzahl der Iterationen des PCGM-Solvers pro FE-Lösung für verschiedene ϵ

Eine interessante Eigenschaft des PCGM-Solvers ist in Abbildung 2.9a zu sehen, in der die Anzahl der Iterationen für jede FE-Lösung während der Rissfortschrittssimulation dargestellt ist. Die markierten Punkte kennzeichnen die FE-Lösung direkt nach einer inkrementellen Rissverlängerung. Man erkennt, dass der Solver mehr Iterationen benötigt, wenn die Risspitze weiter bewegt wird und das FE-Netz entsprechend der neuen Rissoberfläche angepasst wird. Auf der anderen Seite führt eine folgende Netzverfeinerung

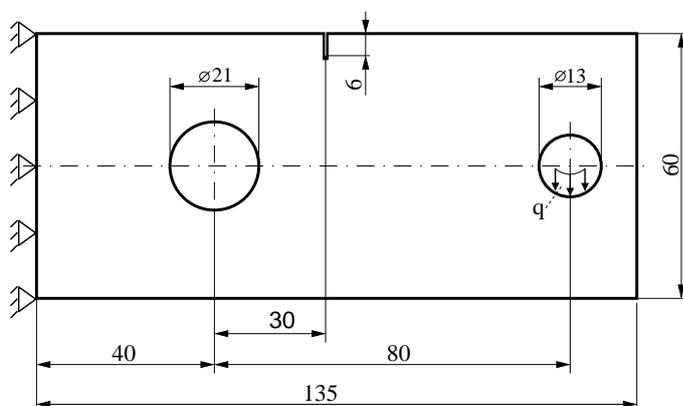
zu einem raschen Abfall der Iterationszahlen. Dieser Sachverhalt zeigt die hohe Effizienz der angewandten Techniken.

Erhöht man die geforderte Genauigkeit von $\epsilon = 10^{-2}$ auf $\epsilon = 10^{-3}$, so wird eine noch feinere Vernetzung um die Risspitze erzeugt. Das zu lösende Gleichungssystem enthält noch mehr Freiheitsgrade und ist demzufolge noch aufwändiger zu lösen. Die Entwicklung der benötigten Iterationen zur Lösung dieser größeren Gleichungssysteme ist in Abbildung 2.9b zu sehen. Im Unterschied zur Abbildung 2.9a steigen die PCGM-Iterationen für den ersten Lösungsschritt nach der inkrementellen Rissverlängerung ungefähr um das Doppelte. Für die folgenden Verfeinerungsschritte fällt jedoch die Anzahl der Iterationen auf das gleiche Niveau wie in Abbildung 2.9a zurück. Um zukünftig die "Iterationspitzen" der Bilder 2.9a und 2.9b herabzusetzen, ist die korrekte asymptotische Lösung [SM96, Sch97, Sch99, Sch04] in den hierarchischen Löser einzubeziehen.

Ermüdungsrisswachstum in einer Querkraftbiegeprobe

Ersetzt man bei einer vorgegebenen zyklischen Belastung K_I , K_{II} und K_{Ic} durch die entsprechenden Schwingbreiten der K-Faktoren ΔK_I , ΔK_{II} sowie ΔK_{th} , so lassen sich die Gleichungen 2.13 und 2.14 auch auf Ermüdungsrisswachstum anwenden. Allerdings können Effekte wie Risschließen dabei nicht berücksichtigt werden. Als Simulationsbeispiel wurde die Querkraftbiegeprobe aus [TWB03] gewählt, da hierfür entsprechende experimentelle Vergleichsergebnisse für das Ermüdungsrisswachstum vorliegen. Die Geometrie und die verwendeten Materialparameter sind in Abbildung 2.10 zu sehen. Für den Schwellwert ΔK_{th} wird ein sehr kleiner Wert vorgegeben, so dass es in jedem Fall zum Risswachstum während der Simulation kommt.

In Abbildung 2.11 sind die Ergebnisse für verschiedene Risslängen und den zugehörigen, adaptiv erzeugten, FE-Netzen zu sehen. Netzverfeinerung und Netzvergrößerung während des Risswachstums sind deutlich zu erkennen. Die Vergrößerung tritt vor allem im Bereich der Löcher auf, aber auch an den Rissflanken, kurz nachdem die Risspitze sich weiter bewegt hat. Im Gegensatz zum vorhergehenden Beispiel kann die Vernetzung entlang des entstandenen Risses nicht bis zur Startvernetzung zurück vergrößert werden. Dies ist in der Tatsache begründet, dass der Riss nicht entlang vorhandener Elementkanten des Ausgangsnetzes wächst. Durch die Teilung von Elementen beim inkrementellen Risswachstum wird eine Vergrößerung blockiert, da diese Elemente nicht wieder zusammengefügt werden dürfen.



$$\begin{aligned}
 K_{th} &= 1 \text{ MPa} \sqrt{\text{mm}} \\
 \Delta a &= 3 \text{ mm} \\
 q &= 100 \text{ Nmm}^{-1} \\
 E &= 2 \cdot 10^5 \text{ MPa} \\
 \nu &= 0.3 \\
 \epsilon &= 10^{-2}
 \end{aligned}$$

Abbildung 2.10: Querkraftbiegeprobe

Der Vergleich des berechneten Risspfades mit dem experimentell ermittelten wird in Abbildung 2.12 dargestellt. Die Simulation zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Die geringen Abweichungen sind auf einen zu groß gewählten Parameter Δa zurückzuführen.

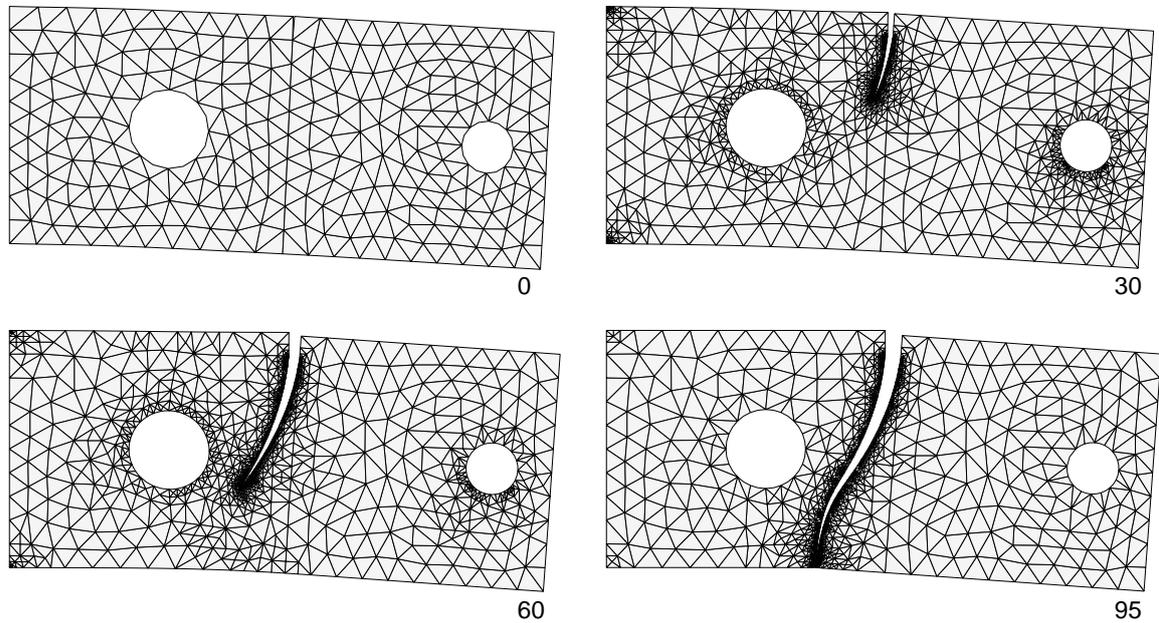


Abbildung 2.11: Phasen des Ermüdungsrisswachstums in der Querkraftbiegeprobe

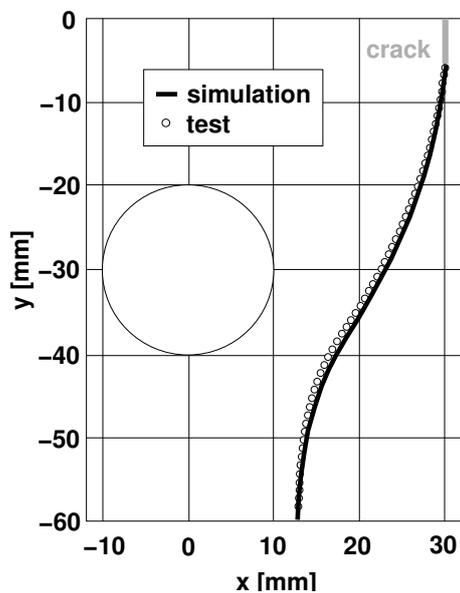


Abbildung 2.12: Vergleich von Simulation mit Experiment

2.4.3 Realisierung von Algorithmen zur Übertragung von Zustandsgrößen bei adaptiver Netzverfeinerung

Die Integration des Materialmodells erfolgt im Rahmen der vorgestellten Algorithmen nicht nur in den Gaußpunkten sondern zusätzlich auch in den Elementknoten. Diese Vorgehensweise erleichtert die Übertragung der Knoten- und Gaußpunktwerte vom Vater- auf die Sohnelemente erheblich. In [GBKM00a] und [GBK03] werden die in SPC-PM2AdNl realisierten impliziten Projektionsalgorithmen zur lokalen Lösung des Anfangswertproblems für elastisch-plastisches Materialverhalten bei großen Verzerrungen ausführlich dargestellt.

Allgemein läuft die Verfeinerung für alle realisierten Teilungsarten folgendermaßen ab:

1. Bildung der Sohnelemente (Definition der Kanten und Knoten).
2. Übernahme der Knotenwerte vom Vater- auf die Sohnelemente für die Punkte, bei denen Vater- und Sohnknoten exakt zusammenfallen.
3. Berechnung der Knotenwerte für die neu hinzugekommenen Sohnknoten mittels der Formfunktionen des Vaterelements. Die Übertragung der Knotenverschiebungen

$$\mathbf{u}^{Sonj}(\xi, \eta) = \sum_{k=1}^{Nel} h_k(\xi, \eta) \mathbf{u}_k^{Fath} \quad (2.18)$$

führt auf Funktionen, die über die Elementkanten hinweg kontinuierlich sind. Für alle anderen Feldvariablen y_i mit $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ (außer dem Verzerrungstensor im ebenen Verzerrungszustand (EVZ)) ist die Übertragungsvorschrift

$$\mathbf{y}^{Sonj}(\xi, \eta) = \sum_{k=1}^{Nel} h_k(\xi, \eta) \mathbf{y}_k^{Fath} \quad (2.19)$$

eine sinnvolle Interpolationsmethode. Im Gegensatz zur Übertragung der Knotenverschiebungen führt der Transfer von \mathbf{y} entlang der Elementgrenzen auf nicht stetige Funktionen.

4. Nach der Übertragung der Knotenwerte für die Sohnelemente werden die Werte in ihren Gaußpunkten mit Hilfe der Formfunktionen dieser neu generierten Elemente bestimmt.

Die detaillierte Beschreibung der Elementteilungsprozeduren kann [BMGK04b] entnommen werden. An dieser Stelle sei noch ein Sekundärergebnis in Zusammenhang mit der zusätzlichen Lösung des Anfangswertproblems in den Elementknoten erwähnt. Durch diese Vorgehensweise sind neben den Verschiebungen auch lokale Knotenvariablen (Verzerrungen, Spannungen, innere Variablen) a priori verfügbar. Das wurde zu einem Vergleich unterschiedlicher Quadraturformeln für die benötigten Volumenintegrale genutzt. Neben dem in der Regel verwendeten Gauß-Schema gibt es vereinzelte FEM-Anwendungen des so genannten Gauß-Lobatto-Verfahrens. Dieses zeichnet sich dadurch aus, dass die Grenzen eines eindimensionalen Integrationsgebietes als Stützstellen vorgegeben

sind. Die Anzahl und Position weiterer Integrationspunkte sowie die Integrationsgewichte werden in Abhängigkeit von der zu erreichenden Genauigkeit optimiert. Folglich liegen beim Gauß-Lobatto-Verfahren einzelne Stützstellen auf den Kanten eines Finiten Elementes. Insbesondere fallen die Eckknoten immer mit der Position von Integrationspunkten zusammen. Damit reduziert sich die Anzahl der Stützstellen im Inneren des Integrationsgebietes. Wie jedoch in Abbildung 2.13 am Beispiel eines vollständig integrierten 8-Knoten-Viereckelementes deutlich zu sehen ist, nimmt die Gesamtzahl der Stützstellen gegenüber dem Gauß-Verfahren bei gleicher Approximationsgüte für die Berechnung der Integrale zu (16 Integrationspunkte bei Gauß-Lobatto gegenüber 9 bei Gauß).

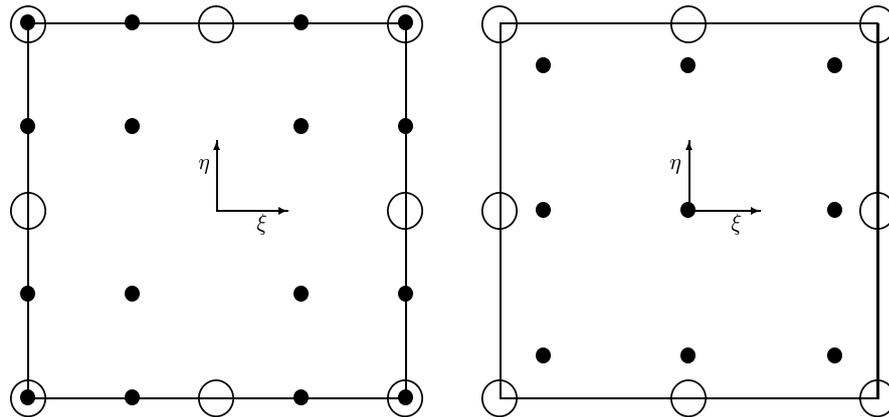


Abbildung 2.13: Position der Integrationsstützstellen (●) und Elementknoten (○) eines 8-Knoten-Viereckelementes bei vollständiger Integration: Gauß-Lobatto-Schema (links), Gauß-Quadratur (rechts).

Numerische Beispielrechnungen mit den in Abbildung 2.13 gezeigten Elementen haben eine sehr gute Übereinstimmung der Simulationsergebnisse gezeigt. Die Verwendung eines reduzierten Gauß-Lobatto-Schemas führte zu größeren Lösungsfehlern (vergleichbar wiederum mit reduzierter Gauß-Integration). Dem Vorteil der verbesserten Effektivität (acht Stützstellen fallen mit den Elementknoten zusammen, lediglich ein Integrationspunkt – im Ursprung des lokalen Elementkoordinatensystems – wäre zusätzlich zu bearbeiten) steht in diesem Fall die nicht akzeptable Genauigkeit gegenüber. Andererseits ist die Verwendung der Gauß-Lobatto-Quadratur bei vollständiger Integration sogar mit einem zusätzlichen Aufwand verbunden, da das Anfangswertproblem in insgesamt 20 Punkten im Element zu lösen ist (gegenüber 17 beim Gauß-Verfahren). Dabei ist zu berücksichtigen, dass im Rahmen der vorgestellten adaptiven Strategie Knotenvariablen immer elementbezogen (und somit bis auf wenige Ausnahmen mehrfach) berechnet und gespeichert werden. Die Unstetigkeiten in den Variablen werden somit bei deren Übertragung auf neue Elemente bewusst beibehalten, um Fehler durch Glättungsalgorithmen zu vermeiden.

2.4.4 Adaptive Algorithmen zur Vergrößerung von Vernetzungen

Das FE-Programm SPC-PM2AdN1 erlaubt nur das Vergrößern solcher Elemente, die aus einer früheren Unterteilung hervorgegangen sind. Das bedeutet nichts anderes, als dass in dem Elementbaum, mit dessen Hilfe die Geschichte der Netzanpassung und die

damit verbundene Entwicklung der Elementanzahl nachvollzogen werden kann, von den Blättern zu den Zweigen zurückgegangen wird (vgl. Abb. 2.14).

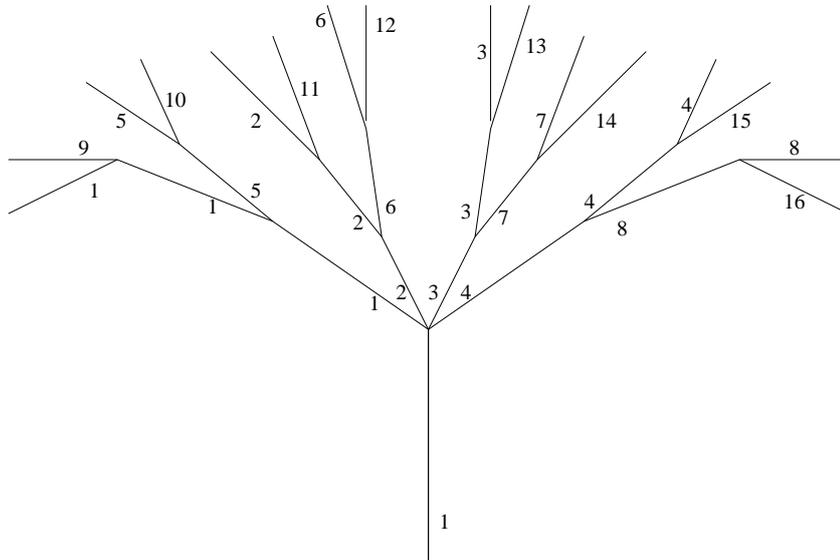


Abbildung 2.14: Elementbaum: Zweige und Blätter. Erste Elementverfeinerung - rot, nachfolgende Unterteilungen - grün. Ziffern: Elementnummern.

Beim Vergrößern müssen Knotenwerte verschiedener Elemente, die zu ein und demselben Knoten gehören, wieder zusammengefügt werden. Für die Art und Weise der Übertragung der Sohnwerte auf das neue Vaterelement existieren verschiedene Methoden. Hier wurden die folgenden zwei verwendet:

- Die Übertragung der Sohnwerte auf das Vaterelement und das damit verbundene Zusammenfügen der Feldvariablen verschiedener Elemente in ein und demselben Knoten erfolgt über das arithmetische Mittel. Diese Vorgehensweise ist die einfachste Art der Übertragung.
- Durch Anwendung der Methode der kleinsten Quadrate kann ein verbesserter Algorithmus zur Bestimmung der Vaterknotenwerte abgeleitet werden. Bei dieser Verfahrensweise ist es möglich, auch Werte von Sohnknoten mit einfließen zu lassen, die im Weiteren durch die Elementvergrößerung gelöscht werden. Dieses Vorgehen ist zweckmäßiger, da mehr Informationen für die Bestimmung der Vaterknotenwerte ausgewertet werden.

Ein weiterer wichtiger Schritt des Vergrößerungsalgorithmus ist die Berechnung der Feldgrößen in den Gaußpunkten des neu gebildeten Vaterelements. Diese Werte werden wie bei der Elementverfeinerung basierend auf den Formfunktionen des neuen Elements ermittelt.

Die entwickelten Vergrößerungsalgorithmen für Vier- und Dreieckelemente wurden in [BMGK04b] ausführlich dargestellt.

2.4.5 Fehlerschätzung bei nichtlinearen Problemen

Fehlerschätzer bezüglich des Gleichgewichts

Für die Simulation des nichtlinearen Werkstoffverhaltens, basierend auf den in SPC-PM2AdN1 realisierten Materialmodellen der anisotropen Elastoplastizität unter Berücksichtigung einer Substruktur (siehe dazu u. a. [Buch01b], [BGK04]) wird der residuale a posteriori Fehlerschätzer gemäß Gleichung (2.1) verwendet.

Kantenorientierte Fehlerschätzer η_E bezüglich der Unstetigkeit der Residualkräfte an gemeinsamen Elementrändern werden an den Einzelkanten in einer Schleife über alle Elemente berechnet. Ein wichtiger Anteil eines elementorientierten Fehlerschätzers für das Element T ist die Summe der Fehler über alle Kanten E , die die Elementberandung $\partial\Omega_T$ bilden (zweiter Teil von Gl. (2.1)):

$$\begin{aligned} \eta_{TE}^2 &= \sum_{E \in \partial\Omega_T} \eta_E^2 = \sum_{E \in \partial\Omega_T} \frac{h_T}{\lambda_D} \|\llbracket \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \rrbracket\|_{L_2(E)}^2 \\ &= \sum_{E \in \partial\Omega_T} \frac{h_T}{\lambda_D} \int_E \|\llbracket \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h) \mathbf{n}_E \rrbracket\|^2 ds_E \\ &= \sum_{E \in \partial\Omega_T} \frac{h_T}{\lambda_D} \int_E (\llbracket \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h) \mathbf{n}_E \rrbracket, \llbracket \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h) \mathbf{n}_E \rrbracket) ds_E, \end{aligned} \quad (2.20)$$

(vgl. [Ku97, Ku00a, Ku01a, Ku01c]) mit dem Kantensprung der Spannungen $\llbracket \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \rrbracket$. Im Weiteren kann der kantenorientierte Fehler nach Anwendung der Mittelpunktsregel für die Integration vereinfacht werden zu

$$\eta_E^2 = \frac{1}{\lambda_D} \|\llbracket \boldsymbol{\sigma} \mathbf{E}^\perp \rrbracket\|_{\mathbf{x}_M}^2. \quad (2.21)$$

Hierbei sind \mathbf{x}_M die Koordinaten des Kantenmittenknotens. Der Vektor \mathbf{E}^\perp ist entlang der Kantenaußennormale gerichtet. Sein Betrag entspricht der Kantenlänge.

An Kanten mit hängenden Knoten existieren gleichzeitig eine Vaterkante E_{Fath} (die zu einem ungeteilten Element gehört) und ihre beiden Sohnkanten E_{Son1} und E_{Son2} , die zu den neu entstandenen Söhnen des Nachbarelementes gehören. Die Bestimmung von Fehlerschätzern an solchen Kanten erfordert eine besondere Behandlung, da an der Vaterkante bezüglich der Seitenmittenknoten der Söhne keine Werte für die Spannungen vorliegen. Durch eine geeignete Approximation müssen diese näherungsweise ermittelt werden (siehe Größen \mathbf{f}_{FS1} und \mathbf{f}_{FS2} in Abbildung 2.15).

Für die Berechnung der Fehlerschätzer für diese Vater- und Sohnkanten wird wie folgt verfahren: Der Fehlerschätzer der Vaterkante lautet

$$\begin{aligned} \eta_{E_{Fath}}^2 &= \frac{h_{T_{Fath}}}{\lambda_D} \|\llbracket \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \rrbracket\|_{L_2(E_{Fath})}^2 \\ &= \frac{h_{T_{Fath}}}{\lambda_D} \int_{E_{Fath}} \|\llbracket \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \rrbracket\|^2 ds_{E_{Fath}} \\ &\approx \frac{l_{E_{Fath}}}{\lambda_D} \int_{E_{Fath}} \|\llbracket \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \rrbracket\|^2 ds_{E_{Fath}} \end{aligned} \quad (2.22)$$

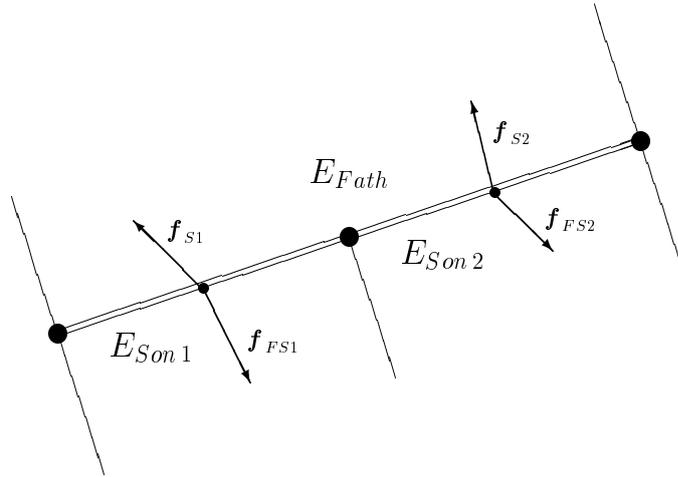


Abbildung 2.15: Kantenkräfte an hängenden Knoten.

Mit $l_{E_{Son1}} = l_{E_{Son2}} = l_{E_{Son}} = \frac{1}{2} l_{E_{Fath}}$ kann Gleichung (2.22) auch geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \eta_{E_{Fath}}^2 &= 2 \frac{l_{E_{Son}}}{\lambda_D} \int_{E_{Fath}} |[\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}]|^2 dS_{E_{Fath}} \\ &= 2 \frac{l_{E_{Son}}}{\lambda_D} \left\{ \int_{E_{Son1}} |[\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}]|^2 dS_{E_{Son1}} + \int_{E_{Son2}} |[\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}]|^2 dS_{E_{Son2}} \right\} \end{aligned} \quad (2.23)$$

Durch Anwenden der Mittelpunktsregel entsteht

$$\eta_{E_{Fath}}^2 = \frac{2}{\lambda_D} \{ \eta_{E_{Son1}}^2 + \eta_{E_{Son2}}^2 \} \quad (2.24)$$

Bei Randkanten mit vorgegebenen Verschiebungsrandbedingungen wird kein lokaler Fehler betrachtet. Der lokale residuale Fehler an Kanten mit Krafterandbedingungen wird aus dem Sprung der inneren und äußeren Kräfte berechnet.

Fehlerindikator bezüglich der Fließbedingung

Wie bereits erwähnt, wird durch den oben beschriebenen Fehlerschätzer bei Approximation von λ_D mit dem Elastizitätsmodul der Fehler in vollständig oder teilweise plastisierten Elementen unterschätzt. Aus diesem Grund wurde zusätzlich ein Fehlerindikator bezüglich der Fließbedingung in SPC-PM2AdN1 implementiert, der besonders sensibel auf die Entwicklung der plastischen Zonen reagiert.

Bei der thermodynamisch konsistenten Herleitung des Materialmodells der finiten Elastoplastizität ergibt sich unter anderem die so genannte Kuhn-Tucker-Bedingung:

$$\lambda F = 0 \quad (2.25)$$

Während wegen $\lambda = 0$ im elastischen Fall, bei Entlastung und neutraler Belastung die Bedingung (2.25) immer gültig ist, führen die verwendeten impliziten Iterationsverfahren für die Lösung des Anfangswertproblems bei Belastung im plastischen Fall nicht zu

einer exakten Erfüllung der Fließbedingung im Rahmen ihrer FE-Approximation F_h . Wie genau die plastische Zone im aktuellen FE-Netz abgebildet wird, kann mit Hilfe des Fehlerindikators

$$\eta_{KT}^2 = \|\lambda F - \lambda_h F_h\|_{L_2(\Omega)}^2 = \|\lambda_h F_h\|_{L_2(\Omega)}^2 \quad (2.26)$$

bezüglich der Bedingung (2.25) angegeben werden. Die Verwendung dieses Fehlerindikators führt insbesondere an den Rändern der plastischen Zone zu einer Netzverfeinerung, während in deren Kern Netzvergrößerungen bis hin zum Ausgangsgitter auftreten können.

Strategien zur Fehlerauswertung

In SPC-PM2AdN1 wurden zwei Strategien zur Fehlerauswertung realisiert:

- kantenorientiert bzw.
- elementorientiert.

Während der Gleichgewichtsfehlerschätzer im Rahmen beider Strategien eingesetzt werden kann, ist der Fließbedingungsfehlerindikator lediglich für die elementorientierte Fehlerauswertung geeignet.

Bei der kantenorientierten Vorgehensweise wird ausschließlich der Kantensprunganteil des Gleichgewichtsfehlers ausgewertet. Alle Kanten, die die Beziehung

$$\eta_E^2 \geq \tau_{Tol} \cdot \tilde{\eta}^2 \quad (2.27)$$

erfüllen, werden für eine Unterteilung markiert. Als Vergleichswert $\tilde{\eta}$ werden der maximale Kantenfehler

$$\tilde{\eta} = \max_{\forall E} \eta_E \quad (2.28)$$

oder alternativ die Fehlersumme

$$\tilde{\eta} = \sum_E \eta_E \quad (2.29)$$

genutzt. Die Art der Elementteilung ist abhängig von der Anzahl und Lage der markierten Kanten im Element.

Im Gegensatz zur kantenorientierten Strategie werden bei der elementorientierten Methode die Elemente markiert. Hierbei können der Fehlerschätzer η_T in der Definition (2.1) und der Fehlerindikator η_{KT} nach (2.26) wahlweise einzeln oder gemeinsam (jedoch unabhängig voneinander) ausgewertet werden. Markiert werden alle Elemente, deren Fehler folgende Beziehungen erfüllen:

$$\eta_T^2 \geq \tau_{Tol_T} \cdot \tilde{\eta}_T^2, \quad \eta_{KT}^2 \geq \tau_{Tol_{KT}} \cdot \tilde{\eta}_{KT}^2. \quad (2.30)$$

Entsprechend der Vorgehensweise beim kantenorientierten Fehlerschätzer können $\tilde{\eta}_T$ bzw. $\tilde{\eta}_{KT}$ den Summenfehler oder den Maximalfehler über alle Elemente darstellen.

Beispiele

Der Test der beschriebenen adaptiven Vernetzungsalgorithmen wurde am Beispiel einer gezogenen Scheibe mit Loch umfassend in [BMGK04b] dokumentiert.

Der residuale Fehlerschätzer gemäß Gleichung 2.1 beinhaltet neben dem Anteil für die Kantensprünge zusätzlich einen Elementresiduumsanteil. Bei linearen Elementen entfällt dieser Anteil wegen

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad (2.31)$$

bei quadratischen Elementansätzen kann er nicht a priori vernachlässigt werden. In Abbildung 2.16 ist die Verteilung der beiden Anteile für das Problem der Scheibe mit Loch dargestellt. Bei einer gleichbleibenden Vernetzung entwickeln sich die Anteile proportional zueinander, bei adaptiver Netzanpassung schwankt das Verhältnis. In beiden Fällen überwiegt das Elementresiduum klar.

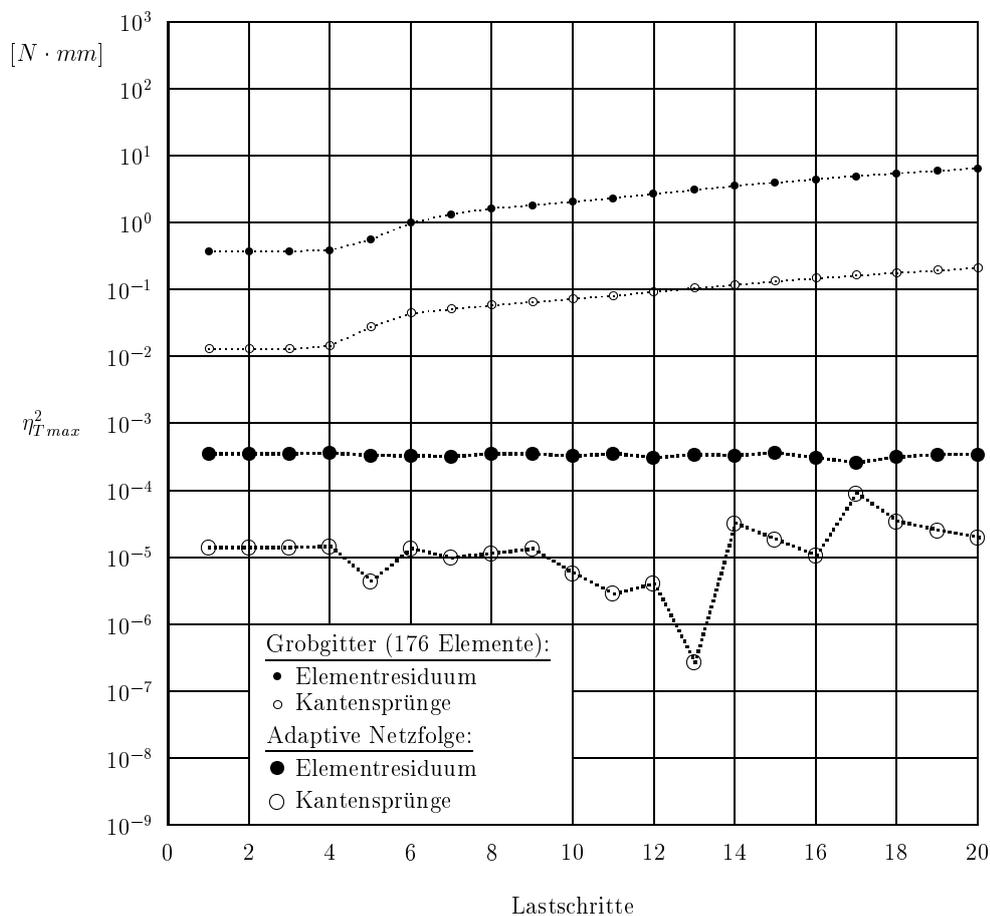


Abbildung 2.16: Scheibe mit Loch. Entwicklung der Fehleranteile Elementresiduum und Kantensprung beim Grobgitter und bei adaptiver Verfeinerung (1330 Elemente im 20. LS). Verschiebung des oberen Scheibenrandes pro Lastschritt um 10^{-2} mm.

Die Effizienz adaptiver Vernetzungsalgorithmen wird anhand der Abbildung 2.17 verdeutlicht. Es ist leicht zu erkennen, dass bei der adaptiven Vorgehensweise eine drastische Fehlerreduzierung bereits mit wesentlich weniger Elementen im Vergleich zu globalen Verfeinerungen erreicht werden kann.

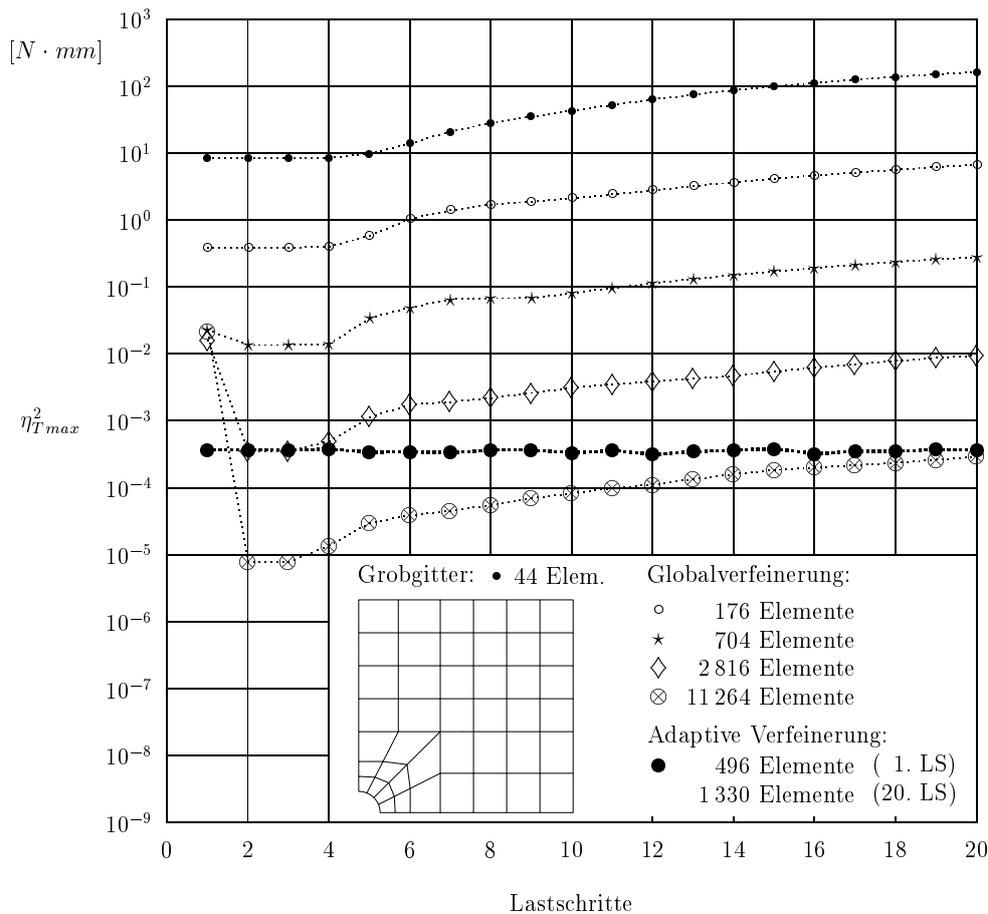


Abbildung 2.17: Scheibe mit Loch: Entwicklung des maximalen Gesamtfehlers η_T^2 bei unterschiedlichen Vernetzungen

2.4.6 Bearbeitung des Kontaktproblems unter Berücksichtigung von Adaptivität und Reibung

Zu Beginn der Behandlung des Kontakts erfolgte die Betrachtung des 2D-Problems bei einem starren Zielkörper unter der Voraussetzung von Reibungsfreiheit. Für das nichtlineare Materialverhalten wurden dabei die im TP A12 für das lineare Elastizitätsproblem entwickelten hocheffizienten Kontaktalgorithmen angepasst. Deren theoretische und algorithmische Grundlagen sind im Berichtsteil zu A12 und in [MeUn04] ausführlich dargestellt.

Im Rahmen der gewählten Vorgehensweise wird zu Beginn eines jeden Lastschritts für alle noch freien Knoten auf Kanten, die als mögliche Kontaktträger in Frage kommen, geprüft, ob diese in das Hindernis eingedrungen sind. Hierzu wurde als starrer Zielkörper zuerst der Halbraum mit konstantem Normalenvektor betrachtet. Weiterhin erfolgte die Einarbeitung von gekrümmten Hindernissen in 2D als quadratische Form ($F(x_1, x_2) \geq 0$) und als Splinekurve.

Penetrierte Knoten werden exakt auf den Zielkörper zurückgezogen. Anschließend werden die Verschiebungen dieser Knoten mit einem Projektor auf spezielle Teilräume (z. B. Erfüllung von homogenen Dirichlet-Randbedingungen) in Richtung der lokalen Tangentialebene am Kontaktpunkt so lange restringiert, wie der Kontaktfall vorliegt. In Abbil-

Abbildung 2.18 zeigt beispielhaft den Kontakt einer gestauchten Scheibe mit einem durch Splines begrenzten Hindernis dargestellt.

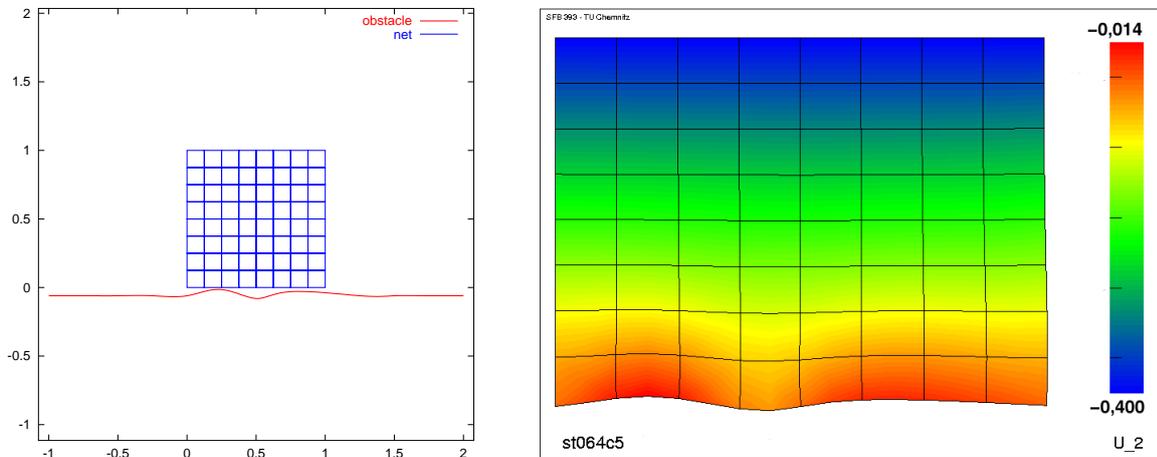


Abbildung 2.18: Stauchen einer Rechteckscheibe gegen ein gekrümmtes, starres Hindernis. Vernetzung einer Hälfte des Scheibenquerschnitts mit 64 Elementen und Geometrie des mit Splines beschriebenen Hindernisses (links). Vertikalverschiebungen bei 40% Stauchung im Fall des reibungsfreien Kontakts (rechts).

Durch die Projektion penetrierter Knoten auf das Hindernis und die damit verbundene Änderung einzelner Komponenten des Verschiebungsvektors kommt es zu einer zusätzlichen, deutlichen Verletzung des zu Beginn des Lastschrittes in der Regel nicht ausiterierten Gleichgewichts. Zur Vermeidung von Oszillationen durch wechselweises Lösen und Penetrieren während der Gleichgewichtsiterationen (die im Extremfall eine Konvergenz der Lösung des Randwertproblems verhindern können) werden Knoten, die erstmals (bzw. erneut nach zwischenzeitlicher Freigabe) in Kontakt kommen, für den gesamten Lastschritt als in Kontakt befindlich markiert und durch den Projektor im PCG-Löser auf dem Hindernis gehalten. Dieser einfache und effiziente Algorithmus zur iterativen Einstellung des Gleichgewichts, verbunden mit einer entsprechenden Korrektur der Position aller inneren Netzknoten, hat sich bei moderaten Lastschrittgrößen als außerordentlich stabil erwiesen. Die Größe der Belastungssinkremente ist jedoch bei Kontaktproblemen ohnehin zur Vermeidung der Penetration innerer Netzknoten begrenzt. Für Knoten, die sich bereits in Kontakt mit dem Zielkörper befinden, wird am Vorzeichen der Normalkraft zu Beginn des Lastschrittes überprüft, ob sich diese unter Umständen wieder gelöst haben. In diesem Fall werden die Verschiebungsrestriktionen aufgehoben und im Verlauf der weiteren Iterationen des Randwertproblems im Belastungssinkrement nehmen frei gegebene Knoten ihre Gleichgewichtslage ein.

Zum weiteren Vorgehen bei der Realisierung der Kontaktmodellierung im geometrisch und physikalisch nichtlinearen Fall wird auf den Abschnitt "Offene Fragen / Ausblick" verwiesen.

Literaturverzeichnis

Eigene referierte Literatur

- [BGK04] A. Bucher, U.-J. Görke and R. Kreißig. A material model for finite elasto-plastic deformations considering a substructure. *Int. J. Plast.*, 20/04:619–642, 2004.
- [BMGK04a] A. Bucher, A. Meyer, U.-J. Görke and R. Kreißig. About a nodal based transfer algorithm and error estimators in nonlinear adaptive FEM. In: Proceedings of the IV European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, ECCOMAS 2004, Jyväskylä, 2004.
- [BMGK04b] A. Bucher, A. Meyer, U.-J. Görke and R. Kreißig. Entwicklung von adaptiven Algorithmen für nichtlineare FEM. Preprint SFB393/04–03, TU Chemnitz, 2004.
- [GBK03] U.-J. Görke, A. Bucher and R. Kreißig. An efficient algorithm for the integration of the initial value problem in anisotropic finite elastoplasticity considering a substructure. In: *Dislocations. Plasticity on Metal Forming*, A. S. Khan (Ed.), Proceedings of Plasticity 03, Neat Press, 346–348, 2003.
- [Ku00a] G. Kunert. An a posteriori residual error estimator for the finite element method on anisotropic tetrahedral meshes. *Numer. Math.*, 86(3):471–490, 2000.
- [Ku01a] G. Kunert. A local problem error estimator for anisotropic tetrahedral finite element meshes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 39:668–689, 2001.
- [Ku01c] G. Kunert. A posteriori l_2 error estimation on anisotropic tetrahedral finite element meshes. *IMA J. Numer. Anal.*, 21:503–523, 2001.
- [Mey90] A. Meyer. A parallel preconditioned conjugate gradient method using domain decomposition and inexact solvers on each subdomain. *Computing*, 45/90:217–234, 1990.
- [MeUn04] A. Meyer and R. Unger. Projection methods for contact problems in elasticity. Preprint SFB393/04–04, TU Chemnitz, 2004.
- [MRS04] A. Meyer, F. Rabold and M. Scherzer. Efficient Finite Element Simulation of Crack Propagation. Preprint SFB393/04–01, TU Chemnitz, 2004.
- [Sch97] M. Scherzer. Stress fields at interface-corners and cracks for non-linear deformations. In: *Damage and Failure of Interfaces*, Proc. of the First International Conference – DFI-1, Vienna, Austria, H.-P. Rossmannith (Ed.), Balkema, 67–74, 1997.

Eigene referierte Literatur (zur Veröffentlichung angenommen)

- [Sch04] M. Scherzer and M. Kuna. Combined analytical and numerical solution of 2D interface corner configurations between dissimilar piezoelectric materials. *International Journal of Fracture*, 2004 (accepted for publication).

Eigene nicht referierte Literatur

- [BMGK03] A. Bucher, A. Meyer, U.-J. Görke and R. Kreißig. A contribution to hierarchical adaptive strategies in nonlinear FEM, *Computational Mechanics*, 2003 (submitted).

- [GBKM00a] U.-J. Görke, A. Bucher, R. Kreißig and D. Michael. Implicit integration of deformation laws for large elasto-plastic deformations. In: *Proceedings of the IV. IASS-IACM Colloquium*, Chania-Kreta, 2000.
- [MeRaS04] A. Meyer, F. Rabold and M. Scherzer. Efficient Finite Element Simulation of Crack Propagation. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 2004 (submitted).
- [Ku97] G. Kunert. Error estimation for anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes. Preprint SFB393/97-16, TU Chemnitz, 1997.
- [RMSK04] F. Rabold, A. Meyer, M. Scherzer and M. Kuna. Finite-Elemente-Simulation von Risswachstum mittels effizienter adaptive-iterativer Solver. In: *36. Tagung des DVM-Arbeitskreises Bruchvorgänge, Themenschwerpunkt: Schädigungsmechanismen und Bruch*, DVM-Bericht 236, Deutscher Verband für Materialforschung und -Prüfung e.V., 171–181, 2004.
- [SM96] M. Scherzer and A. Meyer. Zur Berechnung von Spannungs- und Deformationsfeldern an Interface-Ecken im nichtlinearen Deformationsbereich auf Parallelrechnern. Preprint SFB393/96-03, TU Chemnitz, 1996.

Dissertationen

- [Buch01b] A. Bucher. *Deformationsgesetze für große elastisch-plastische Verzerrungen unter Berücksichtigung einer Substruktur*. Dissertation, TU Chemnitz, Institut für Mechanik, Bericht 4/01 2001.
- [Kada04] I. Yu. Kadashevich. *Modellierung der zyklischen Verfestigung unter Verwendung eines Mehrflächenmodells der Plastizität mit kinematischen Bindungen einschließlich der Parameterbestimmung*. Dissertation, TU Chemnitz, Institut für Mechanik, Bericht 1/04 2004.

Habilitationen

- [Sch99] M. Scherzer. *Physikalisch und geometrisch nichtlineare Problemstellungen der Festkörper- und Bruchmechanik an Interface-Konfigurationen*. Habilitationsschrift, Technische Universität Bergakademie Freiberg, 1999.

Andere Arbeiten

- [ES63] F. Erdogan and G.C. Sih. On the crack extension in plates under plane loading and transverse shear. *Journal of Basic Engineering*, 85/63:519–527, 1963.
- [TWB03] H. Theilig, M. Wünsche and R. Bergmann. Numerische und experimentelle Untersuchungen zur Entwicklung gekrümmter Ermüdungsriss bei proportionaler zyklischer Belastung. In: *35. Tagung des DVM-Arbeitskreises Bruchvorgänge, Themenschwerpunkt: Schädigungsmechanismen und Bruch*, DVM-Bericht 235, 239–248, 2003.
- [Yser90] H. Yserentant. Two Preconditioners Based on the Multilevel Splitting of Finite Element Spaces. *Numer. Math.*, 58/90:163–184, 1990.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Entsprechend der Zielsetzung im Berichtszeitraum für das Teilprojekt D1 des SFB 393 der TU Chemnitz wurde die bisher entwickelte FEM-Software für geometrisch und physikalisch nichtlineare Aufgaben um adaptive Strategien zur Netzanpassung und effiziente Methoden zur Kontaktmodellierung erweitert. Das in diesem Zusammenhang entstandene FEM-Programm SPC-PM2AdNl zeichnet sich damit gegenüber der Vorgängerversion SPC-PMHP durch eine deutlich verbesserte Praxisrelevanz aus. Basierend auf thermodynamisch konsistenten Ansätzen der Elastoplastizität großer Verzerrungen mit anisotropem Verfestigungsverhalten und unter Einbeziehung von Schädigungsmodellen können vielfältige Aufgaben der Struktur- und Rissbruchmechanik numerisch simuliert werden.

Neuartige, knotenbasierte Algorithmen für die Übertragung der Zustandsgrößen auf neu generierte Elemente im Rahmen einer hierarchisch strukturierten Netzverfeinerung wurden entwickelt, in die inkrementell-iterativen Lösungsverfahren integriert und erfolgreich getestet. Der größere numerische Aufwand durch die zusätzliche Lösung des Anfangswertproblems in den Elementknoten ist deshalb gerechtfertigt, weil damit die Zustandsgrößen in den Elementknoten (als Basisvariablen für die Übertragungsstrategien) mit der gleichen Genauigkeit vorliegen wie in den Integrationsstützstellen. Es ist geplant, durch vergleichende Untersuchungen mit anderen Übertragungsmethoden (basierend auf Extrapolationsalgorithmen und/oder Glättung der Knotenvariablen) bis zum Ende der Förderungsperiode den Nachweis zu erbringen, dass diese, theoretisch konsistentere, Verfahrensweise auch zu numerisch genaueren Ergebnissen und einem verbesserten Konvergenzverhalten führt.

Der ursprünglich vorgesehene Fehlerschätzer zur Minimierung der Unstetigkeit der Spannungslösung an gemeinsamen Elementkanten wurde für die verwendeten Elemente mit quadratischen Ansätzen um den Anteil des Elementresiduums ergänzt. Lösungsabhängige Fehlerindikatoren, die eine verbesserte Erfassung der Grenzen plastischer Gebiete und des Wachsens von Rissen und Schädigungszonen ermöglichen, wurden implementiert und untersucht. Offen, und auch in der Literatur nicht beleuchtet, ist dabei die für die Effizienz der Netzanpassung bei nichtlinearen Modellen wesentliche Frage der Wahl geeigneter Abbruchschranken für die Fehlerschätzer und -indikatoren. Hier sind bisher nur heuristische Vorgehensweisen möglich, die zudem stark problemabhängig sind.

Nichtlineare Aufgabenstellungen sind nicht selten durch eine Ortsabhängigkeit kritischer Regionen (die eine Netzverfeinerung erfordern) im Verlauf der Belastungsgeschichte gekennzeichnet. Typische Beispiele sind die Bewegung der Kontaktzone beim Rollkontakt oder die Ausbreitung von Rissen. Im Sinne einer effektiven Diskretisierung ist es somit notwendig, an geeigneten Stellen das Netz zu vergrößern. Unter Nutzung der hierarchischen Datenstrukturen erfolgt die Netzvergrößerung in SPC-PM2AdNl durch Zusammenfügen vorher geteilter Elemente. Die Bildung des arithmetischen Mittels und die Methode der kleinsten Fehlerquadrate wurden für die Übertragung der Zustandsgrößen auf Knoten im Väterelement, die aus mehreren Knoten früherer Sohnelemente gebildet werden, untersucht. Ein Vergleich der numerischen Genauigkeit und des Einflusses auf das Konvergenzverhalten dieser beiden Verfahren ist Gegenstand weiterer Untersuchungen. Im Rahmen der Aufgabenstellungen im Berichtszeitraum wurde weiterhin das Auslösen von Elementen bei Erreichung eines bestimmten Schädigungsgrades und das Auftrennen von Elementen beim Risswachstum realisiert.

Für die Kontaktmodellierung im nichtlinearen Fall wurde zunächst das 2D-Problem bei einem starren Hindernis betrachtet. Dabei wurden die im TP A12 für geometrisch und physikalisch lineare Probleme der Elastizität entwickelten effizienten Verfahren auf der Grundlage geeigneter Projektoren für penetrierte Knoten erfolgreich in das Konzept der inkrementell-iterativen Vorgehensweise bei großen Verzerrungen integriert. Die ursprünglich vorgesehene Begrenzung des Hindernisses mittels Geraden und Kurven zweiter Ordnung wurde um deren Approximation durch kubische Splines erweitert. Ausschlaggebend dafür waren praktische Erwägungen, die auch dazu führten, auf die geplante, sukzessive Erweiterung der Kontaktmodellierung zur Berücksichtigung der Reibung zu verzichten. Stattdessen wurden der verbesserten Beschreibung der Geometrie der Hindernisse und der oben erwähnten zusätzlichen Untersuchungen bezüglich der Fehlerschätzer und der Übertragungsalgorithmen insbesondere bei Netzvergrößerung der Vorrang gegeben. Durch Verzögerungen der Arbeiten zur Lösung des Kontaktproblems durch FE-Diskretisierungen vom Nitsche-Typ im TP A12 (siehe dort) wurde auch die vorgesehene Anpassung dieser Untersuchungen auf nichtlineare Probleme zurückgestellt. Beginnend mit der Übertragung und Modifikation der Fehlerschätzer an Kontaktkanten aus den Untersuchungen zur linearen Elastizität im TP A12 wird gegenwärtig die Kopplung der Kontaktmodellierung mit der adaptiven Vorgehensweise für den nichtlinearen Fall vorbereitet.

Mit SPC-PM2AdN1 liegt ein FEM-Programm zur numerischen Simulation von ebenen geometrisch und physikalisch nichtlinearen Problemstellungen vor, das sich auf der Basis hierarchischer Datenstrukturen durch schnelle Lösungsverfahren, effiziente adaptive Strategien zur Netzverfeinerung und -vergrößerung und eine flexible Materialschnittstelle auszeichnet, die mit verallgemeinerten, modernen numerischen Verfahren zur iterativen Lösung des Anfangswertproblems verknüpft ist. Damit lassen sich bereits jetzt unterschiedliche praktische Aufgaben aus der Struktur- und Rissbruchmechanik lösen. Es liegt nahe, diese effektiven und anpassungsfähigen Programmstrukturen zu nutzen, um in einer weiteren Förderungsperiode den Anwendungsbereich des Programmes zu vergrößern. Dafür bieten sich in Zusammenarbeit und basierend auf Vorarbeiten anderer Teilprojekte eine Erweiterung der Materialbibliothek beispielsweise um gekoppelte Aufgabenstellungen und eine Berücksichtigung räumlicher Probleme an. In diesem Zusammenhang rückt auch die Frage der Parallelisierung des Programmes wieder verstärkt in den Vordergrund.

Teilprojekt

D2

Effiziente parallele Algorithmen für die numerische
Simulation stark phasengekoppelter, disperser
Mehrphasenströmungen

2.1 Teilprojekt D2

Effiziente parallele Algorithmen für die numerische Simulation stark phasengekoppelter, disperser Mehrphasenströmungen

2.1.1 Antragsteller

Dr.-Ing. Thomas Frank *

29.01.1963

bis 2002:

Professur Technische Thermodynamik
Forschungsgruppe Mehrphasenströmungen

Prof. Dr. Günter Wozniak

28.06.1958

Professur Strömungsmechanik

Fakultät für Maschinenbau und Verfahrenstechnik

Technische Universität Chemnitz

09107 Chemnitz

Tel.: (0371) 531-4643

(0371) 531-1707

Fax: (0371) 531-4644

(0371) 531-1847

Email: DrTh.Frank@arcor.de

guenter.wozniak@mbv.tu-chemnitz.de

* Die Stelle von Herrn Dr. Th. Frank als wissenschaftlicher Assistent an der TU Chemnitz war befristet bis zum 30.09.2003, wobei er mit 1.1.2003 in die Industrie wechselte.

2.1.2 Projektbearbeiter

Die Bearbeitung wurde von DI Klaus Pachler im Rahmen der im vorangegangenen Antrag definierten Ziele weitergeführt, wobei sich der zu betrachtende Zeitraum von 2002 bis Mitte 2003 erstreckt.

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Die Parallelisierung der Lagrange Methode für instationäre Vorgänge mit starker Phasenkopplung wurde im Zeitraum 1999 bis 2001 erarbeitet. Dabei wurde gezeigt, dass sowohl der Navier–Stokes Löser die erforderliche Genauigkeit erreicht, als auch dass der Partikellöser instationär verwendbar ist [8]. Daraus ergab sich die Anforderung den aktuellen Algorithmus auch für andere Anwendungen, wie beispielsweise für die Tropfenströmung mit Stoff- und Wärmeübergang oder die “Large Eddy Methode“, zu verwenden. Ein neues numerisches Verfahren muss vor allem anhand realer Berechnungsbeispiele seine theoretischen Vorteile unter Beweis stellen. Gerade die Parallelisierung von Strömungslösern liefert bei ingenieurtechnischen Anwendungen nicht immer die erwarteten Effizienzsteigerungen.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

Die Vorgehensweise im Berichtszeitraum teilt sich in die Weiterentwicklung des Lagrange Löser infolge eines Verdunstungsmodells für innermotorische Verbrennungsvorgänge und die Anwendung bei einer Kohlestaubbeindüsung und bei einer LES–Simulation eines

Gaszyklons, siehe Pachler [8].

Hier soll die algorithmische Implementierung eines Verdunstungsmodells exemplarisch anhand eines Einkomponentenmodells (Uniform-Temperatur-Modell) gezeigt werden, wobei die Parallelisierung mit Hilfe von MPI berücksichtigt wird. Es wird auf die Ansätze von Dukowicz [9] und Ranz und Marshall [10] zurückgegriffen. In diesem Modell wird die Lewis-Zahl¹ für die Grenzschicht gleich eins gesetzt (wie beim d^2 -Gesetz), was die Berechnung einer Diffusionszahl in diesem Modell überflüssig macht. Diese Annahme ist eine starke Vereinfachung, weil sich im allgemeinen die Lewis-Zahl über die Tropfenlebensdauer und radial innerhalb des Tropfens von 50 bis etwa 1 verändert. In der Grenzschicht der Gasphase schwankt die Lewis-Zahl bezogen auf die Referenzwerte zeitlich von 3 bis 1, siehe Kneer [11].

Der Wärmeübergang eines Tropfens bei Zwangskonvektion wird durch folgende semiempirische Korrelation von Ranz und Marshall [10] beschrieben:

$$Nu = 2 + 0,6 Re^{1/2} Pr^{1/3} \quad (2.1)$$

Gleichung (2.1) beschreibt einen stationären Wärmeübergang², der auf einer globalen Betrachtung des Partikelschwarms beruht. Die Berechnung behandelt jedoch diskrete Tropfen innerhalb eines numerischen Gitters, was zu numerischen Problemen bei stark transienten Verdunstungsprozessen führen kann. Außerdem wird ein für den Zeitschritt eingefrorenes Strömungsfeld angenommen, um eine explizite Kopplung Strömung / Tropfen zu ermöglichen. Die daraus resultierenden Zeitschrittweiten werden jedoch aus Effizienzgründen nicht immer berücksichtigt.

2.4.2.1 Erhaltungsgleichung für Enthalpie und Masse eines Tropfens

Die Verdunstungsmodellierung wird anhand der Filmtheorie, siehe Baehr [12], unter der Annahme einseitiger Diffusion durchgeführt. Die Tropfenenergiegleichung für das Uniform-Temperatur-Modell lautet:

$$\frac{d}{dt}(m_d \bar{h}_d) = h_{v,s} \frac{dm_d}{dt} + Q \quad (2.2)$$

Gleichung (2.2) beschreibt die Änderung der mittleren Tropfenenthalpie infolge der zugeführten Energie Q und der Verdunstung, siehe erster Term auf der rechten Seite.

Die latente Wärme h_L lässt sich als Enthalpiedifferenz zwischen der dampfförmigen und der flüssigen Phase an der Grenzfläche (Tropfenoberfläche) darstellen ($h_L = h_{v,s} - h_{d,s}$). Wenn man die Dampfenenthalpie $h_{v,s}$ in Gleichung (2.2) einsetzt, die linke Seite von Gleichung (2.2) nach der Kettenregel differenziert und die Annahmen des Uniform-Temperatur-Modells, nämlich $\bar{h}_d \simeq h_{d,s}$, $T_d \simeq T_{d,s}$ und $c_{p,d} = \text{const}$ für den ganzen Tropfen, verwendet, erhält man mit $\bar{h}_d \simeq c_{p,d} T_d$:

$$(m_d c_{p,d}) \frac{dT_d}{dt} = h_L \frac{dm_d}{dt} + Q \quad (2.3)$$

¹ $Le = \frac{\lambda}{\rho c_p \Gamma}$, quantifiziert das Verhältnis der thermischen zur stofflichen Diffusion.

² Die Nusselt-Zahl kann auch über das Verhältnis einer für den Wärmeübergang charakteristischen Länge L zur thermischen Grenzschichtdicke ausgedrückt werden. $Nu = L/\delta_T$

Gleichung (2.3) verbindet die Energieerhaltung mit der Verdunstung. Die zugeführte Wärme Q wird mit der Korrelation von Ranz und Marshall [10] und der Nusselt-Zahl nach Gleichung (2.1) berechnet:

$$Q = \pi d_d \lambda_{v,ref} (T_{inf} - T_S) Nu \quad (2.4)$$

Die Bestimmung der Nusselt-Zahl in Gleichung (2.4) erfordert Referenzwerte nach Sparrow [13] für die spezifische Wärme oder die thermische Leitfähigkeit.

Der Stoffübergang dm_d/dt von Gleichung (2.3) wird nach Dukowicz [9] folgendermaßen umgeformt:

$$\frac{dm_d}{dt} = Q \frac{\dot{m}_{v,s}}{q_S} \quad \text{wobei auch} \quad \frac{dm_d}{dt} = 4\pi \rho_d r_d^2 \frac{dr_d}{dt} \quad \text{gilt} \quad (2.5)$$

$\dot{m}_{v,s}$ ist der lokale Stofffluss, q_S ist der lokale Wärmestrom an der Phasengrenzfläche und A ist die Tropfenoberfläche. Mit $Q = -q_S A$ und $\dot{m}_d = -\dot{m}_{v,s} A$ lässt sich Gleichung (2.3) umformen:

$$(m_d \bar{c}_{p,d}) \frac{dT_d}{dt} = Q \left(1 + h_L \frac{\dot{m}_{v,s}}{q_S} \right) \quad (2.6)$$

Der Dampfmassenstrom $\dot{m}_{v,s}$ bzw. der Wärmestrom q_S an der Tropfenoberfläche lässt sich nach der Stoff- bzw. dem Fickschen Gesetz über Gradientenansätze approximieren:

$$\begin{aligned} \dot{m}_{i,s} &= (\rho_i \vec{v} - \rho \Gamma \nabla y_i)_S \quad \text{mit} \quad \dot{m}_{A,s} = 0 \quad \text{bzw.} \quad \vec{v} \simeq 0 \\ \dot{m}_{v,s} &= -(\rho \Gamma)_S \frac{\nabla_S y_v}{1 - y_{v,S}} \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$q_S = -\lambda_S \nabla_S T \quad (2.8)$$

Gleichungen (2.7) und (2.8) enthalten nur noch den unbekanntem Temperaturgradienten $\nabla_S T$, der mit Hilfe der Filmerhaltungsgleichungen berechnet wird.

Die Modellierung von Dukowicz besteht im Wesentlichen aus der Formulierung von Analogien zwischen Stoff- und Wärmefluss im Bereich des den Tropfen umhüllenden Dampffilms zur Bestimmung des Ausdrucks $\dot{m}_{v,s}/q_S$ in Gleichung (2.6). Die Erhaltungsgleichungen für Masse, Spezieskonzentration i (Luft und Dampf) und Energie im Film nach Dukowicz [9] sind:

$$\nabla(\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.9)$$

$$(\rho \vec{v}) \nabla Y_i = \nabla(\rho \Gamma \nabla Y_i) \quad (2.10)$$

$$(\rho \vec{v}) \nabla h = \nabla \frac{\lambda}{c_p} \nabla h + \nabla(\rho \Gamma - \frac{\lambda}{c_p}) \sum_i h_i \nabla Y_i \quad (2.11)$$

Wenn man die Gleichungen (2.9), (2.9) und (2.11) umformt und $Le=1$ annimmt, erhält man eine Beziehung zwischen Spezies- und Enthalpiegradienten. Damit lässt sich nun

der gesuchte Temperaturgradient $\nabla_S T$ ausdrücken, was folgende Beziehung für den Ausdruck $\dot{m}_{v,s}/q_S$ aus Gleichung (2.5) ergibt:

$$\frac{\dot{m}_{v,s}}{q_S} = - \frac{B_Y}{h_{inf} - h_S - (h_{v,s} - h_{A,s})(Y_{v,inf} - Y_{v,s})} \quad \text{mit } B_Y = \frac{Y_{v,s} - Y_{v,inf}}{1 - Y_{v,s}} \quad (2.12)$$

Im Programm ermöglicht Gleichung (2.12) die Bestimmung der Durchmesser- bzw. Temperaturänderung, was numerisch mit einem Runge–Kutta–Algorithmus vierter Ordnung durchgeführt wird. B_Y wird als Massenübergangszahl bezeichnet und auch zur Modifikation des Wärmestroms, Gleichung (2.4), infolge Verdunstung verwendet. Bei Erreichen der Siedetemperatur des Tropfens geht die gesamte zugeführte Energie in den Verdunstungsprozess über, wobei der rechte Klammerausdruck in Gleichung (2.6) Null wird. Für den Fall $Y_{v,inf} = 0$ und einer beliebigen Le–Zahl erhält man für die Massenübergangszahl:

$$B_Y = \left(\frac{\lambda}{\rho \Gamma c_p} \right)_S \frac{h_{A,inf} - h_{A,s}}{h_L} \quad (2.13)$$

2.4.2.2 Erhaltungsgleichung für den Speziestransport

Verdunstungsprozesse führen zu einem Phasenübergang, wobei die vorher flüssigen Tropfenanteile als Dampf im Trägerfluid eine eigene Spezies darstellen. Es gibt also neben der ursprünglichen Spezies Luft, die wiederum im Wesentlichen aus rund 78% Stickstoff, 21% Sauerstoff und dem Rest aus Edelgasen besteht, eine zweite Spezies Dampf, die in der Form eines Massenbruchs quantifiziert wird:

$$\bar{Y} = \frac{\delta m_p}{\bar{\rho} V} \quad (2.14)$$

$\bar{\rho}$ ist die Mischdichte bezogen auf ein Kontrollvolumen, die über eine modifizierte Gaskonstante berechnet wird, δm_p ist die Dampfmasse, die aus der Verdunstung der Tropfenphase entstanden ist und Y ist der Massenbruch Dampfmasse bezogen auf die Gesamtmasse des Kontrollvolumens. Um die räumliche und zeitliche Ausbreitung der Dampfphase darzustellen, verwendet man eine Bilanzgleichung für Y in differentieller Form. Es gelten die gleichen Regeln bezüglich Mittelung infolge der Turbulenzmodellierung, wie beispielsweise für die Enthalpiegleichung oder die Turbulenzgleichungen (RANS–Ansatz). \bar{Y} ist der Mittelwert des Massenbruchs, siehe Gleichung (2.14), α_F ist die Volumenfraktion der Fluidphase und σ_f ist die turbulente Schmidt–Zahl für die Speziesgleichungen:

$$\frac{\partial (\alpha_F \bar{\rho} \bar{Y})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_F \bar{\rho} \bar{u}_j \bar{Y}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha_F \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_f} \right) \frac{\partial \bar{Y}}{\partial x_j} \right] + \bar{Q}_p V (1 + \bar{Y}) \quad (2.15)$$

\bar{Q}_p ist der Stoffübergang von der Partikel- in die Fluid-Phase. Der vorletzte Term in Gleichung (2.15) ist der Quellen–Senkenterm der Speziestransportgleichung, während der letzte Term die Änderung der Gesamtfluidmasse (Luft plus Dampf) berücksichtigt und zum Polkoeffizienten addiert wird. Die Überprüfung der korrekten Bilanzierung lässt sich leicht über einen Vergleich zwischen dem Massenstrom aus der Tropfenphase und der im Fluid vorhandenen Dampfmasse durchführen. In der Regel sind die verdunsteten Massen recht klein gegenüber der Gesamtgasmasse, was jedoch Fehler, vor allem in Hinblick auf die Simulation von Zünd- und Verbrennungsvorgängen, keineswegs vernachlässigbar macht.

2.4 Ergebnisse

Zur Validierung des Verdunstungsmodells wurde eine Dieseleinspritzung in einer Messkammer nachgerechnet. Der Vergleich wurde anhand der Ergebnisse von zwei kommerziellen CFD-Lösern bzw. von Messungen durchgeführt. Abb. 2.1 zeigt das Berechnungsgitter und den flüssigen Dieselstrahl.

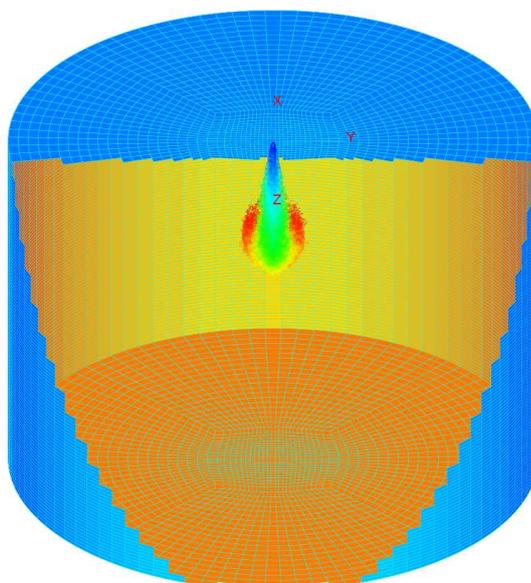


Abbildung 2.1: Berechnungsgitter mit Strahlstartposition

Klingsporn [14] hat in seiner Arbeit Berechnungen mit Fluent durchgeführt, die er mit Messungen von Reuter [15], Koß [16] und Breuer [17] verglichen hat. In dieser Arbeit werden Eindringtiefen mit obigen Messungen und Verdunstungsraten mit der Simulation von Klingsporn [14] verglichen. Abb. 2.2 vergleicht berechnete Strahleindringtiefen von FIRE und Mistral-3D mit Messdaten. Die Berechnung hinkt in der Zeit von 0,1 bis 0,5 ms der Messung nach, was durch mögliche Unterschiede der Rand- und Anfangsbedingungen zu erklären wäre. Die Startphase der Einspritzung (bis etwa 0,1 ms) wird gut wiedergegeben, während der Mittelteil (von 0,1 bis 0,5 ms) eine zu kurze Eindringtiefe aufweist. Der Endteil (von 0,5 bis 1,0 ms) zeigt wegen der Parallelität zwischen den Verläufen von Rechnung und Messung eine gute Übereinstimmung. Die Unterschiede zwischen FIRE und Mistral-3D sind auf unterschiedliche Gasgeschwindigkeiten und Totalviskositäten zurückzuführen. Abb. 2.3 vergleicht Verdunstungsraten zwischen Fluent [14], FIRE und Mistral-3D, wobei Fluent und Mistral-3D einen höheren Stoffübergang als FIRE aufweisen. Als Referenz wird die akkumulierte Einspritzmenge dargestellt. FIRE und Mistral-3D verwenden das gleiche Verdunstungsmodell, was hier gut zum Ausdruck kommt, wobei, wie schon erwähnt wurde, FIRE die Gasphase realistischer abbildet. Die Verteilung der totalen Viskosität erreicht die größten Werte in der Grenzschicht zwischen Tropfen- und Gasphase wegen der großen Geschwindigkeitsgradienten. Im Nahbereich des Spritzlochs bzw. des Einlasses bildet sich eine rotationssymmetrische Zone erhöhter turbulenter Viskosität, die dem Gebiet des größten integralen Längen- bzw. Zeitmaßstabs entspricht.

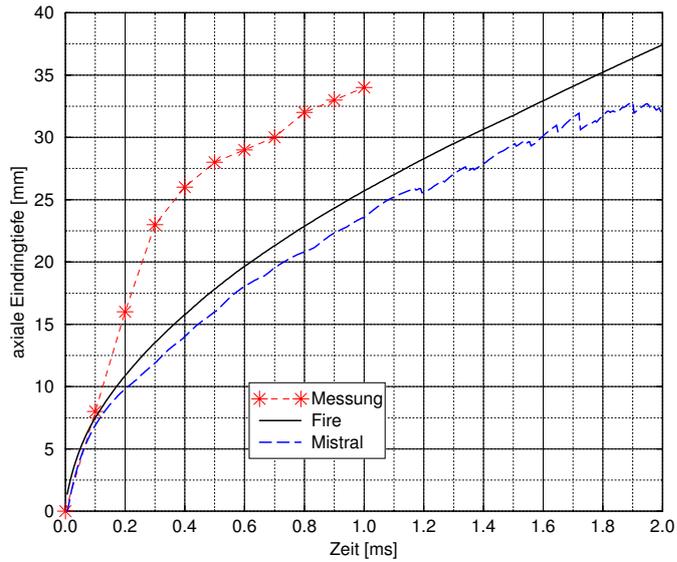


Abbildung 2.2: Vergleich der Strahleindringtiefen

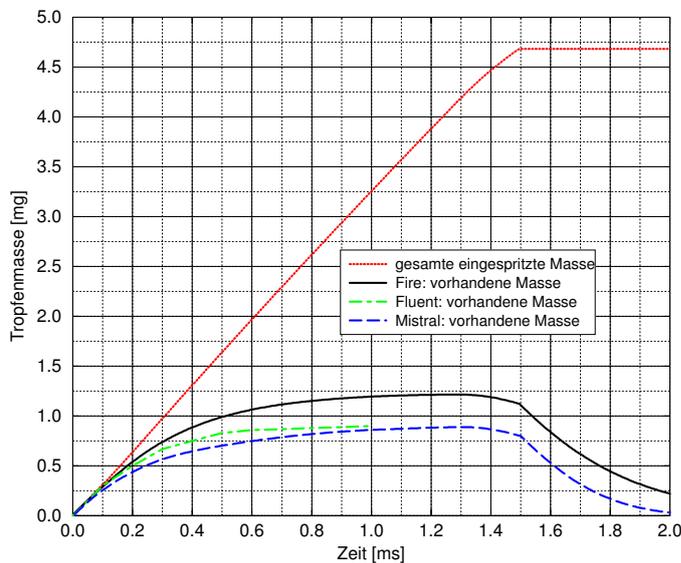


Abbildung 2.3: Vergleich der Verdunstungsraten

Mistral-3D zeigt sowohl in der Gas- als auch in der Tropfenphase ein ähnliches Verhalten wie FIRE, wobei sich Unterschiede einerseits durch die unterschiedliche Behandlung der Gasdichte, andererseits durch Unterschiede infolge der Turbulenzproduktionsrate ergeben. Die maximale Gasgeschwindigkeit von rund 50 m/s liegt deutlich unter dem Wert von FIRE mit knapp 80 m/s, was Unterschiede im Tropfentransport verursacht. Das Druckfeld beider Codes zeigt große Übereinstimmung. In Abb. 2.4 werden die Gastemperatur, die etwas über den Werten von FIRE liegt, sowie der Kraftstoffmassenbruch von der Dampfphase dargestellt.

Die Partikelphase wird nach einem Mittelungsprozess wie ein Kontinuum dargestellt, wobei auch Schwankungsgrößen, wie die w -Geschwindigkeit in Abb. 2.6 angezeigt werden. In Abb. 2.5 erkennt man aus der räumlichen Tropfengrößenverteilung, dass die größten Tropfen an der Strahlspitze zu finden sind, was typisch für eine vorgegebene Starttropfengrößenverteilung ist. Bei Verwendung eines Aufbruchmodells würde man

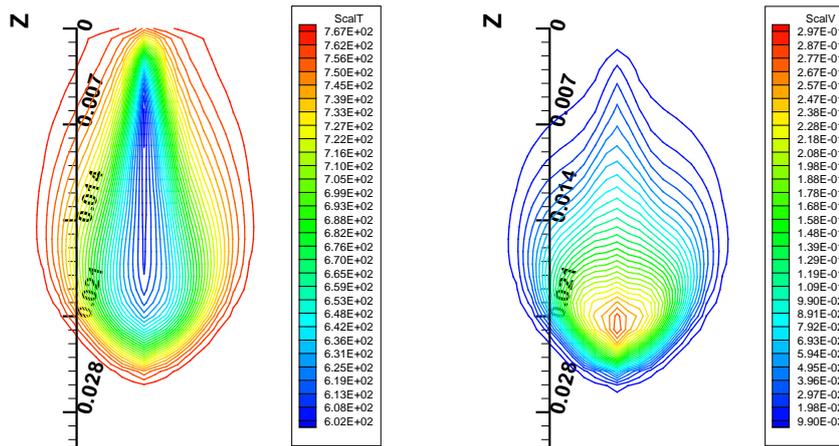


Abbildung 2.4: links mittlere Gastemperatur, rechts Kraftstoffmassenbruch bei 1 ms nach SOI, zur Orientierung vertikaler Maßstab in Meter, Berechnung mit MISTRAL-3D

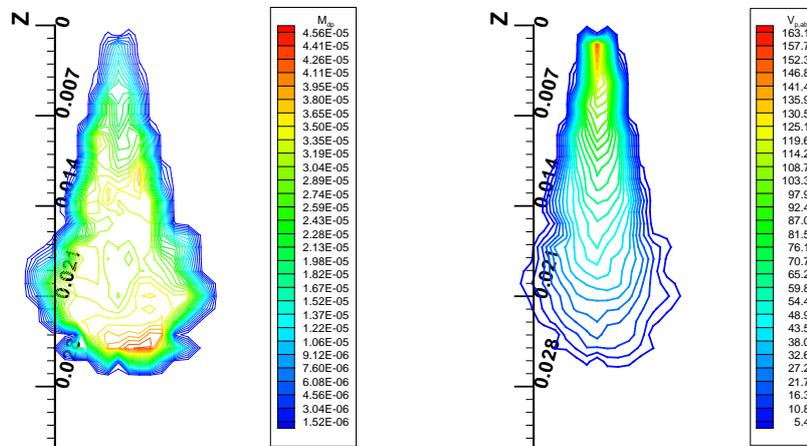


Abbildung 2.5: links mittlerer Tropfendurchmesser d_{10} , rechts mittlere Tropfengeschwindigkeit bei 1 ms nach SOI, zur Orientierung vertikaler Maßstab in Meter, Berechnung mit MISTRAL-3D

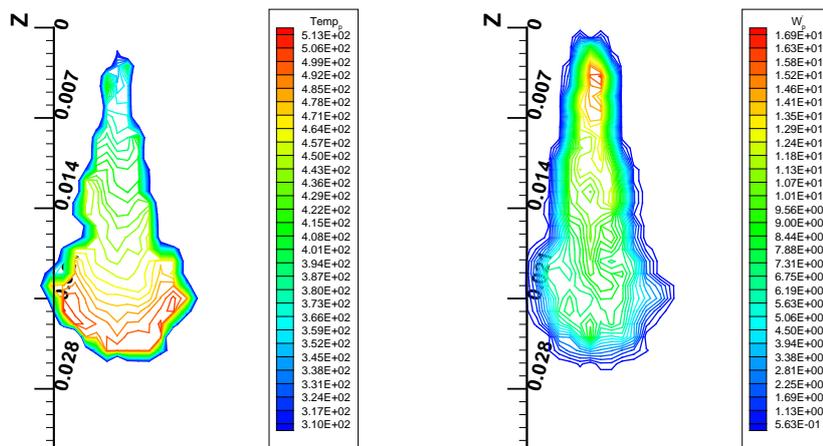


Abbildung 2.6: links mittlerer Tropfentemperatur, rechts mittlere Tropfenschwunggeschwindigkeit in z-Richtung bei 1 ms nach SOI, zur Orientierung vertikaler Maßstab in Meter, Berechnung mit MISTRAL-3D

keine so ausgeprägte Sortierung bezüglich der Lage anhand der Tropfengrößen feststellen können.

Der maximale Impulseintrag vom Einspritzstrahl in die Gasphase kann nahe dem Spritzloch angenommen werden. Mit zunehmender Gasphasendichte werden die Tropfen stärker abgebremst. Kleine Tropfen geben schneller als große Tropfen den Eigenimpuls an die Gasphase ab. Am Ende der Einspritzung und im vorderen Bereich des Strahls werden die Tropfen hauptsächlich von der vorher beschleunigten Gasphase transportiert, während sich stromaufwärts die Tropfenphase deutlich schneller als das Gas bewegt. Ohne Phasenwechselwirkung wird die Eindringtiefe kürzer, die Verdunstungsrate wegen der fehlenden Kühlung der Gasphase jedoch deutlich größer.

Die Simulation wurde mit einem einheitlichen Euler-Zeitschritt von $\Delta t = 5.E-6$ durchgeführt. Der Lagrange-Löser benötigte durchschnittlich 10 bis 20 Subzeitschritte für die Integration der Tropfen. Die Anzahl der Subzeitschritte wird wesentlich von der Stärke der Phasenwechselwirkung und der Stokes-Zahl bestimmt. Die maximale Anzahl der Rechenpartikel betrug etwa 15 000. Die Berechnung mit Mistral-3D wurde auf dem CLIC unter 8, 16 und 32 Prozessoren durchgeführt. Bei gleichbleibender Gesamtzahl eingespritzter Tropfen wurden Effizienzen von 50, 30 und 12 % für den Partikellöser erreicht. Der Grund für den starken Abfall der parallelen Leistung bei 32 Prozessoren liegt in der geringen Gesamtlast, was wiederum zu großen Lastunterschieden zwischen den einzelnen Prozessoren führt. Außerdem musste für diesen Testfall aus technischen Gründen auf das langsamere Fast-Ethernet Netzwerk ausgewichen werden. Trotzdem erkennt man, dass durch das Verdunstungsmodell mehr Rechenleistung am Einzelknoten notwendig ist, was die Effizienz bis zu einer gewissen netzwerkabhängigen Anzahl von Prozessoren verbessert.

Literaturverzeichnis

- [1] Th.Frank, K.Bernert, K.Pachler, H.Schneider:
Efficient Parallel Simulation of Disperse Gas-Particle Flows on Cluster Computers, INTERNATIONAL PARALLEL CFD 2001 Conference, Egmond aan Zee, The Netherlands, May 21-23, 2001, pp. 1-8. To be published in : Parallel Computational Fluid Dynamics - Recent Developments and Advances, Edited by : P. Wilders, A. Ecer, J. Periaux, N. Satofuka, Elsevier Science B.V., ISBN: 0-444-50672-1, Amsterdam, NL, 2002
- [2] Th.Frank, K.Bernert, K.Pachler, H.Schneider:
MISTRAL/PartFlow-3D ein vollständig parallelisiertes Berechnungsverfahren für disperse Fluid-Partikel-Strömungen, GVC-Fachauschussitzung Mehrphasenströmungen, Kurzfassungen der Vorträge, No. 2.09, pp. 1-2, Magdeburg, 5.-7. März 2002
- [3] K.Pachler, Th.Frank, K.Bernert:
Simulation of Unsteady Gas-Particle Flows including Two- and Four-Way-Coupling on a MIMD Computer Architectur, 10th Workshop on TWO-PHASE FLOW PREDICTIONS, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale), 9.-12. April 2002, pp. 418-423. ed. by M. Sommerfeld, ISBN: 3-86010-641-4, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale), April 2002
- [4] H.Schneider, Th.Frank, K.Pachler, K.Bernert:
A Numerical Study of the Gas-Particle Flow in Pipework and Flow Splitting Devices of Coal-Fired Power Plant, 10th Workshop on TWO-PHASE FLOW PREDICTIONS,

- Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale), 9.–12. April 2002, pp. 227–236. ed. by M. Sommerfeld, ISBN: 3-86010-641-4, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale), April 2002
- [5] Th.Frank, J.A.Denev, K.Pachler:
Large Eddy Simulation (LES) der Gas-Feststoff-Strömung in einem Standardzyklon, Arbeitssitzung des GVC-Fachausschusses Mehrphasenströmungen, Kurzfassungen der Vorträge, No. , pp. 1–2, Baden-Baden, 5.–7. März 2003
- [6] K.Bernert, Th.Frank, H.Schneider, K.Pachler:
Numerical Simulation of Disperse Multiphase Flows With an Application in Power Engineering, INTERNATIONAL JOURNAL of NUMERICAL METHODS in FLUIDS, John Wiley & Sons, Ltd. Vol. 41, Issue 12, pp. 1253–1271, ISSN: 1097-0363, DOI: 10.1002/fld.423, April 2003
- [7] J.A.Denev, Th.Frank, K.Pachler:
Large Eddy Simulation (LES) of Turbulent Square Channel Flow using a PC-Cluster Architecture, 4. INTERNATIONAL CONFERENCE on LARGE-SCALE SCIENTIFIC COMPUTATIONS, Sozopol, Bulgaria, June 4.–8. 2003
- [8] K.Pachler:
Parallele Berechnung 3-dimensionaler, instationärer Gas-Partikel-Strömungen unter Berücksichtigung von Kollisionen und Aggregatzustandsänderungen der dispersen Phase, Dissertation, TU-Chemnitz, eingereicht September 2003, Verteidigung Juli 2004
- [9] J.K. Dukowicz: Quasi-Steady Droplet Phase Change in the Presence of Convection, Los Alamos Informal Report, LA-7997-MS
- [10] W.E. Ranz, W.R.Marshall: Evaporation From Drops, Part I, Part II, Chemical Engineering Progress, Vol. 48, No. 3–4, S. 141–146, 173–180, 1952
- [11] R.Kneer: Grundlegende Untersuchungen zur Sprühstrahlausbreitung in hochbelasteten Brennräumen: Tropfenverdunstung und Sprühstrahlcharakterisierung, PhD Thesis, Karlsruhe, 1993
- [12] H.D. Baehr: Thermodynamik, 6. Auflage, Springer-Verlag, 1988
- [13] Sparrow, E.M., Gregg, J.L.: The variable fluid property problem in free convection, Transactions of the ASME, Vol 80, S. 879–886, 1958
- [14] Klingsporn, M.: Modellierung der Mehrkomponenten-Verdunstung bei der dieselmotorischen Einspritzung, PhD Thesis, RWTH Aachen, 1995
- [15] Reuter, U.: Kammerversuche zur dieselmotorischen Einspritzung, PhD Thesis, RWTH Aachen, 1989
- [16] Koß, H.J.: Spektroskopische Untersuchungen zur Kraftstoffeinspritzung, PhD Thesis, RWTH Aachen, 1993
- [17] Breuer, A.: Experimentelle Untersuchungen der Einspritzstrahldynamik mit Hilfe der Phasen-Doppler-Anemometrie, PhD Thesis, RWTH Aachen, in Vorbereitung
-

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Die im Projekt D2 erbrachten Ergebnisse, vollständige Parallelisierung des NS- als auch des Lagrange-Lösers, haben die praktische Durchführbarkeit der Implementation eines Strömungslösers für massiv parallele Rechencluster umfassend dargestellt. Es wurden mit dem Programmpaket MISTRAL/PartFlow-3D sowohl Grundlagenexperimente, als auch reale Anwendungen aus der Kraftwerkstechnik erfolgreich simuliert. Schnittstellen für kommerzielle Netzgeneratoren und Postprozessoren machten Berechnungen von komplexen Geometrien möglich und stellten die Robustheit dieses Programmpaketes unter Beweis. Somit wurde gezeigt, dass die Lagrange Methode zur Simulation von Partikelströmungen auch im Wechselspiel mit einem Navier-Stokes-Löser effizient parallelisierbar ist ohne Einschränkungen bei den zu modellierenden physikalischen Subprozessen machen zu müssen [8].

Die Weiterentwicklung der LES-Methode mit dem instationären Lagrange-Löser, wie sie auf der Gasseite schon begonnen wurde [7], wäre eine sehr interessante Aufgabenstellung. Dazu sind Modellierungsarbeiten bezüglich der Turbulenzwechselwirkung für die Partikelphase notwendig (Subgrid scale models). Außerdem muss die Zweiwegkoppelung disperse-kontinuierliche Phase bezüglich der direkt bzw. modellmäßig aufgelösten Energiespektren untersucht werden. Der vorhandene inkompressible Löser könnte um einen kompressiblen Ansatz erweitert werden, was bei großen Dichte- oder Temperaturgradienten unerlässlich ist. Damit könnte erstmals eine Tropfenschwarmverdunstung mit Hilfe der LES-Methode auf einem Parallelcluster untersucht werden. Es wäre möglich den Einfluss der Turbulenz einschließlich den Stoff- und Wärmeübergang besser als mit dem aktuell verwendeten $k-\varepsilon$ -Modell zu simulieren. Aktuell laufen Programme zur Erforschung der Verbrennung im Bereich von Gasturbinen mit Hilfe der LES, die jedoch keine Parallelisierung vorweisen können. Eine Zusammenarbeit wäre von beiderseitigem Nutzen.

Teilprojekt

D5

Implementierung und Validierung der
Kumulantenmethode zur Simulation von gaskinetischen
Prozessen auf massiv parallelen Rechnern

2.1 Teilprojekt D5

Implementierung und Validierung der Kumulantenmethode zur Simulation von gaskinetischen Prozessen auf massiv parallelen Rechnern

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Karl Heinz Hoffmann
29.7.1953
Professur für Theoretische Physik,
insbesondere Computerphysik
Fakultät für Naturwissenschaften
Technische Universität Chemnitz
09107 Chemnitz
Tel.: (0371) 531-3212
Fax: (0371) 531-3233
hoffmann@physik.tu-chemnitz.de

Prof. Dr. Arnd Meyer
08.03.1952
Professur Numerische Analysis
Fakultät für Mathematik
Technische Universität Chemnitz
09107 Chemnitz
Tel.: (0371) 531-2659
Fax: (0371) 531-2657
a.meyer@mathematik.tu-chemnitz.de

2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. S. Seeger
Prof. Dr. K. H. Hoffmann
Prof. Dr. A. Meyer
Dr. P. Blaudeck

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

In bisherigen Arbeiten des SFB 393 wurde die Simulation von Strömungsprozessen anhand des Navier-Stokes-Systems durchgeführt. Für die numerische Behandlung dieses Systems sind theoretisch fundierte, effiziente (d. h. adaptive, sich auf die Lösung anpassende) Lösungsstrategien bekannt. Diese Gleichungen werden mittlerweile routinemäßig gelöst und benötigen einen handhabbaren numerischen Aufwand.

Auf der anderen Seite bietet die kinetische Theorie mit der Boltzmann-Gleichung eine gute Beschreibung für Strömungszustände von Fluiden, bei denen die Abweichung von lokalen Gleichgewichtszuständen nicht mehr vernachlässigt werden kann, z. B. wenn die mittlere freie Weglänge in der Größenordnung charakteristischer Strömungslängen liegt. Im Vergleich zur Lösung der Euler- und Navier-Stokes-Gleichung ist der Berechnungsaufwand zur Lösung der Boltzmann-Gleichung immens, hauptsächlich durch die Beschreibung durch Phasenraumdichten und numerische Steifheit.

Dies lässt eine erhebliche Lücke in der Möglichkeit, numerische Ergebnisse für Strömungen in dem zwischen den beiden oben genannten Beschreibungen liegenden Übergangsbereich zu erhalten. Dies sind Probleme, bei denen (in bestimmten Bereichen) eine Modellierung durch die Navier-Stokes-Gleichungen nicht mehr ausreicht, eine Beschreibung mittels Boltzmann-Gleichung jedoch zu aufwendig ist. Oft beschränkt sich die Notwendigkeit einer Fluidbeschreibung durch die kinetische Theorie auf einen vergleichsweise kleinen Teil des Gesamtgebietes, z. B. dort, wo starke Gradienten in makroskopischen Feldern auftreten. In vielen praktisch relevanten Anwendungen ist man jedoch nicht an

solch detaillierter Beschreibung durch Phasenraumdichten f_s interessiert. Hier reichen oft einige “wenige” Feldvariablen zur Charakterisierung der Strömungsverhältnisse aus. Es ist daher von großem Interesse, Methoden zu entwickeln, die eine systematische Anpassung der Komplexität in der Modellierung zwischen Boltzmann-Gleichung auf der einen und Euler-Gleichungen auf der anderen Seite ermöglichen. Diese Verfahren müssen es erlauben, nicht nur die Gebietsdiskretisierung adaptiv an die Geometrie und Strömungsverhältnisse anzupassen, sondern auch – im Sinne einer adaptiven Approximation der Boltzmann-Gleichung – das zu lösende System partieller Differentialgleichungen. Wann diese Verfeinerung notwendig wird, und wie die Kopplung aneinandergrenzender Modellierungsbereiche zu behandeln ist, stellen dabei interessante und neue Fragestellungen dar. Hier haben Simulationsmethoden basierend auf gaskinetischen Modellierungen in den vergangenen Jahren mögliche Ansatzpunkte aufgezeigt.

Das Teilprojekt D5 befasst sich mit eben dieser systematischen Ableitung von Fluidmodellen aus der Boltzmann-Gleichung und deren numerischer Simulation. Die dabei verwendete Kumulantenmethode erlaubt es ausgehend von der Boltzmann-Gleichung, auf einfache Weise deterministische Modelle verschiedener Ordnung für die Bewegung von Fluiden zu erhalten.

Ziel dieser Antragsphase war die Anwendung dieser Methode zur Modellierung von Fluiden auf laminare 2D-Probleme und der Vergleich mit den Ergebnissen bekannter Methoden. Da die zu lösenden Gleichungen in beliebiger Ordnung abgeleitet werden können, lassen sich diese zusammen mit dem verwendeten Ansatz als schrittweise Näherung der Boltzmann-Gleichung durch immer “detailliertere” Fluidmodelle auffassen. Die Betrachtung dieser Gleichungshierarchien soll langfristig die Entwicklung effizienter numerischer Verfahren zur Lösung von Strömungsproblemen im Übergangsbereich ermöglichen.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

Grundlage einer gaskinetischen Modellierung einer chemisch nicht reagierenden Mischung von N_s verschiedenen Spezies ist die Boltzmann-Gleichung [CIP94] für die einzelnen Phasenraumdichten $f_s(t, \underline{x}, \underline{c})$:

$$\partial_t f_s + \underline{c} \cdot \partial_{\underline{x}} f_s + \underline{a} \cdot \partial_{\underline{c}} f_s = \sum_r^{N_s} S_{rs}[f_r, f_s]. \quad (2.1)$$

Das Hauptproblem einer Lösung dieser Integro-Differentialgleichung liegt darin, dass zum einen N_s Funktionen von 7 Veränderlichen zu bestimmen sind und zum anderen komplizierte Integrale über diese Funktionen bei der Auswertung der Kollisionsterme S_{rs} zu berechnen sind. Eine Übersicht über Lösungsmethoden zur direkten numerischen Integration dieser Gleichungen ist im Antrag und in [Ari01], [NGS91] gegeben. Im Vergleich zu Strömungssimulationen nach dem Navier-Stokes-Modell sind diese Verfahren jedoch extrem aufwendig, so dass ihre Anwendung nur im Regime stark verdünnter Gase lohnt, in denen die Kontinuumsnäherungen nicht anwendbar sind.

Ein weiterer Ansatz, der im letzten Jahrzehnt daher besonders stark verfolgt wird, ist die Reduktion der Boltzmann-Gleichung auf für die makroskopische Dynamik relevante Größen [KNS00]. Hier haben Lattice-Boltzmann-Methoden (LBM) [Luo00], [Suc01] vielversprechende Alternativen [KNS00], [TKSR00], [JK00] zu bisherigen Methoden aufgezeigt. Die Grundidee der LBM besteht in einer radikalen Vereinfachung der Phasen-

raumdichte f_s so, dass gerade die klassischen Feldvariablen Dichte ρ , Strömungsgeschwindigkeit \underline{v} und Spannungen $\underline{\tau}$ richtig reproduziert werden können. Bei geschickter Wahl der Ortsdiskretisierung ergibt sich durch das Modell diskreter Geschwindigkeiten ein sehr schnelles numerisches Verfahren zur Simulation isothermer Strömungen. Allerdings lassen sich LBM nur schwer unter Beibehaltung ihrer guten Anwendungseigenschaften auf Modelle höherer Ordnung verallgemeinern, z. B. für nicht-isotherme Strömungen.

Kennt man die Phasenraumdichte $f_s(t, \underline{x}, \underline{c})$, lassen sich makroskopisch relevante Größen $\overline{\Psi}(t, \underline{x})$ als Mittelwerte zugeordneter mikroskopischer Funktionen $\Psi(t, \underline{x}, \underline{c})$ bestimmen, für die aus (2.1) Bilanzgleichungen hergeleitet werden können:

$$\partial_t \overline{\Psi} + \partial_{\underline{x}} \cdot \underline{c} \overline{\Psi} = \sum_r^{N_s} \varpi[f_1, \dots, f_{N_s}] + \overline{\partial_t \Psi} + \partial_{\underline{x}} \cdot \underline{c} \overline{\Psi} - \underline{a}_s \partial_{\underline{c}} \overline{\Psi} \quad (2.2)$$

Eine besondere Rolle spielen dabei Momente $\overline{\Psi} = \overline{c^\alpha}$, da aus diesen für $\alpha = 0, 1, 2$ gerade die 'klassischen' Feldvariablen ρ_s , \underline{v}_s und T_s berechnet werden können. Erweitert man die Feldvariablen um höhere Momente, erhält man eine Hierarchie von Bilanzgleichungen, in welcher der Flux der n -ten Bilanzgleichung jeweils die Dichte in der $(n+1)$ -ten Gleichung darstellt. Der Abbruch dieser Hierarchie nach N Momenten führt zum Abschlussproblem, d. h. es müssen die $(N+1)$ -ten Momente und die Produktionsterme als Funktionen der Momente bis zur Ordnung N ausgedrückt werden.

Die verschiedenen in der Literatur bekannten Ansätze erlauben einen Abschluss der Momentengleichungen durch Annahmen über die spezielle Form von f_s . Bei der Momentenmethode [Gra58] entwickelt man die Phasenraumdichte nach Momenten und bestimmt die Entwicklungskoeffizienten aus der Forderung, dass die Ansatzfunktion und f_s in den ersten N Momenten übereinstimmen sollen. Nach der Erweiterten Thermodynamik (ET) [MR98] betrachtet man die Momentengleichungen als Nebenbedingungen zur Forderung nach Existenz und Stabilität des thermodynamischen Gleichgewichts. Man erhält so aus dem Formalismus der ET f_s als Funktion von Lagrange-Multiplikatoren, die wieder aus der Forderung nach Übereinstimmung der ersten N Momente bestimmt werden. Eine ähnliche Herangehensweise bietet die erweiterte Momentenmethode [Eu92]. Bei allen Methoden muss jedoch letztlich die Annahme gemacht werden, dass das System sich *nahe am thermodynamischen Gleichgewicht* befindet, da die Entwicklungskoeffizienten bzw. Lagrange-Multiplikatoren nur in linearer Näherung bestimmt werden können. Auch gestaltet sich die Bestimmung der Momente des Kollisionsoperators als Funktion der N Momente schwierig, da dieser von zweiter Ordnung in den Phasenraumdichten ist. Wird auch im Stoßoperator die Annahme gemacht, dass sich das Fluid nahe dem Gleichgewicht befindet, lassen sich auch die Produktionsterme näherungsweise bestimmen (linearisierte Boltzmann-Gleichung) [Wal58]. Sowohl beim Abschluss der Momentengleichungen als auch bei der Berechnung der Produktionsterme bestehen die Probleme hauptsächlich darin, dass höhere Momente von Funktionen des Typs $e^{p(\underline{c})}$ mit einem Tensorpolynom $p(\underline{c})$ – sogenannten Normallösungen – bestimmt werden müssen. Die Tatsache, dass die vernachlässigten Terme gerade bei Gaszuständen ausserhalb des thermodynamischen Gleichgewichts eine Rolle spielen (z.B. starke Temperatur-Gradienten), erfordert entsprechende Sorgfalt bei der Interpretation der Ergebnisse aus Anwendungen auf Probleme, in denen viele Momente berücksichtigt werden.

Literaturverzeichnis zu 2.3 (eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

- [Ari01] V. V. Aristov.
Direct methods for solving the Boltzmann equation and study of nonequilibrium flows. Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, 2001.
- [Bob75] A. V. Bobylev.
Exact solutions of the Boltzmann equation.
Dokl. Akad. Nauk SSSR, 225(6):1296–1299, 1975. in Russian.
- [BPS95] A. V. Bobylev, A. Palczewski, and J. Schneider.
On approximation of the Boltzmann equation by discrete velocity models.
CR Acad. Sci. I - Math., 320(5):639–644, March 1995.
- [BR99] A. V. Bobylev and S. Rjasanow.
Fast deterministic method of solving the Boltzmann equation for hard spheres.
Eur. J. Mech. B Fluids, 18(5):869–997, 1999.
- [BR00] A. Bobylev and S. Rjasanow.
Numerical solution of the Boltzmann equation using a fully conservative difference scheme based on the FFT. *Transp. Theor. Stat. Phys.*, 29(3–5):289–310, 2000.
- [CC70] S. Chapman and T. G. Cowling.
The mathematical theory of Nonuniform Gases.
Cambridge University Press, Cambridge, 1970.
- [Cer00] C. Cercignani.
Rarefied Gas Dynamics: from basic concepts to actual calculations.
Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, 2000.
- [CIP94] C. Cercignani, R. Illner, and M. Pulvirenti.
The Mathematical Theory of Dilute Gases,
volume 106 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, 1994.
- [CR96] P. Cordero and D. Risso.
Microscopic computer simulation of fluids.
In *4th Granada Lectures in Comp. Physics (Proceedings)*: pp. 83–134, 1996.
- [Eu92] B. C. Eu.
Kinetic Theory and Irreversible Thermodynamics, Chapter 10.7: Modified Moment Method, pp 365–386. John Wiley & Sons, New York, 1992.
- [Gra58] H. Grad.
Principles of the Kinetic Theory of Gases,
in *Handbuch der Physik* (Band XII), 205–293. Springer-Verlag, Berlin, 1958.
- [HMM99] S. Hess and M. M. Mansour.
Temperature profile of a dilute gas undergoing a plane Poiseuille flow.
Physica A, 272:481–496, 1999.
- [JK00] M. Junk and A. Klar.
Discretizations for the incompressible Navier-Stokes equations based on the lattice Boltzmann method. *SIAM J. Sci. Comput.*, 22(1):1–19, 2000.

- [KNS00] A. Klar, H. Neunzert, and J. Struckmeier. Transition from kinetic theory to macroscopic fluid equations: A problem for domain decomposition and a source for new algorithms. *Transp. Theor. Stat. Phys.*, 29(1-2):93–106, 2000.
- [KW77] M. Krook and T. Wu.
Exact solutions of the boltzmann equation.
Phys. Fluids, 20(10):1589–1595, 1977.
- [Luo00] L.-S. Luo.
Some recent results on discrete velocity models and ramifications for lattice Boltzmann equation. *Comp. Phys. Comm.*, 129(1–3):63–74, 2000.
- [MBG97] M. M. Mansour, F. Baras, and A. L. Garcia.
On the validity of hydrodynamics in plane Poiseuille flows.
Physica A, 240:255–267, 1997.
- [MR98] I. Müller and T. Ruggeri.
Rational Extended Thermodynamics, volume 37 of *Springer Tracts in Natural Philosophy*. Springer-Verlag, New York, 2nd edition, 1998.
- [NGS91] H. Neunzert, F. Gropengiesser, and J. Struckmeier.
Computational methods for the Boltzmann equation,
Applied and Industrial Mathematics, 111-140. Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, 1991.
- [RC97] D. Risso and P. Cordero.
Dilute gas couette flow: Theory and molecular dynamics simulation.
Phys. Rev. E, 56(1):489–497, 1997.
- [Suc01] S. Succi.
The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond.
Numerical Mathematics and Scientific Computation. Oxford Univ. Press, 2001.
- [TKSR00] J. Tölke, M. Krafczyk, M. Schulz, and E. Rank.
Discretization of the Boltzmann equation in velocity space using a Galerkin approach. *Comp. Phys. Comm.*, 129(1–3):91–99, 2000.
- [TS94] M. Tij and A. Santos.
Perturbation analysis of a stationary nonequilibrium flow generated by and external force. *J. Stat. Phys.*, 76(5/6):1399, 1994.
- [TS95] M. Tij and A. Santos.
Combined heat and momentum transport in a dilute gas.
Phys. Fluids, 7(11):2858–2866, 1995.
- [Wal58] L. Waldmann.
Transporterscheinungen in Gasen von mittlerem Druck,
in *Handbuch der Physik* (Band XII), 295–514. Springer-Verlag, Berlin, 1958.
- [Wil62] D. R. Willis.
Comparison of kinetic theory analysis of linearized Couette flow.
Phys. Fluids, 5(2):127, 1962.
- [ZGA03] Y. Zheng, A. Garcia, and B. Alder.
Comparison of kinetic theory and hydrodynamics for poiseuille flow.
in volume 663 of *AIP Conference Proceedings*, pp. 149–156, Canada, 2003. Whistler.

2.4 Ergebnisse

Die in den Vorarbeiten zu diesem Bewilligungszeitraum entwickelte Kumulantenmethode [SH00], [SH02] umgeht die Schwierigkeiten bei der Herleitung der Gleichungssysteme mit den o.g. Momentenmethoden durch einen Kumulanten-Ansatz

$$\varphi_s^{\text{CM}} = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp \left(\sum_{\alpha=0}^{N_\alpha} \frac{\mathbf{i}^\alpha}{\alpha!} \underline{\chi}^\alpha \cdot C_s^\alpha \right) \quad (2.3)$$

für die charakteristische Funktion

$$\varphi_s = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int d\underline{c} f_s(t, \underline{x}, \underline{c}) e^{+\mathbf{i}\underline{\chi} \cdot \underline{c}}. \quad (2.4)$$

Dadurch lassen sich die Bewegungsgleichungen für die Kumulanten durch einfache Differentiation analytisch berechnen. Die erhaltenen Gleichungen wurden mit den aus Momentenmethoden erhaltenen verglichen und zeigen für niedrige Approximationsordnungen die gleiche Form. Für höhere Ordnungen treten für die Kumulantengleichungen jedoch zusätzliche, nicht-lineare Beiträge auf, wodurch die Advektionsform

$$\partial_t \underline{C}_s + \underline{\underline{A}}_s(\underline{C}_s) \cdot \partial_{\underline{x}} \underline{C}_s = E_s + \sum_r^{N_s} \underline{B}_{rs}(\underline{C}_r, \underline{C}_s) \quad (2.5)$$

mit dem Advektionstensor $\underline{\underline{A}}_s(\underline{C}_s)$, den externen Kräften E_s und Produktionstermen \underline{B}_{rs} eine besonders einfache, quasi-lineare Struktur hat, denn der Advektionstensor ist linear in den Kumulanten und besitzt eine einfache Blockstruktur:

$$\left[\underline{\underline{A}}_s \right]_x = \begin{pmatrix} C^x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ C^{xx} & C^x & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ C^{xy} & 0 & C^x & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ C^{xxx} & 2C^{xx} & 0 & C^x & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ C^{xxy} & C^{xy} & C^{xx} & 0 & C^x & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ C^{xyy} & 0 & 2C^{xy} & 0 & 0 & C^x & 0 & 0 & 1 & 0 \\ C^{xxxx} & 3C^{xxx} & 0 & 3C^{xx} & 0 & 0 & C^x & 0 & 0 & 0 \\ C^{xxxy} & 2C^{xxy} & C^{xxx} & C^{xy} & 2C^{xx} & 0 & 0 & C^x & 0 & 0 \\ C^{xxyy} & C^{xyy} & 2C^{xxy} & 0 & 2C^{xy} & C^{xx} & 0 & 0 & C^x & 0 \\ C^{xyyy} & 0 & 3C^{xyy} & 0 & 0 & 3C^{xy} & 0 & 0 & 0 & C^x \\ \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

Ausgehend von dem bestehenden MATHEMATICA-Paket [SH02] zur Berechnung der Gleichungen wurde im letzten Bewilligungszeitraum ein erheblich verbessertes, modulares Programmpaket erstellt [See03b], welches die automatisierte Erstellung der Kumulantengleichungen für nichtreagierende Mischungen von Maxwell-Gasen bis zu hohen Ordnungen erlaubt. Durch Differentiation von (2.3) werden zunächst die Beziehungen zwischen Momenten und Kumulanten bis zur gewünschten Ordnung bestimmt. Anschließend

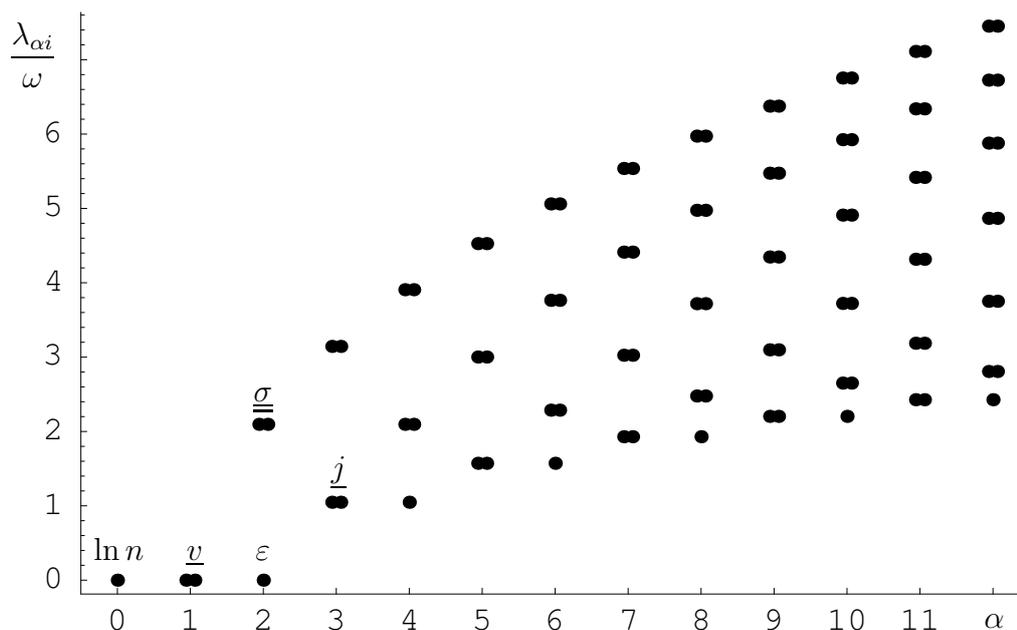


Abbildung 2.1: Eigenwertspektrum der in den Kumulanten linearisierten Maxwell-Produktionsterme bis zur 12. Ordnung. Für jede Ordnung α sind die Eigenwerte des entsprechenden Blocks der Jacobi-Matrix gezeigt.

werden die Produktionsterme für die Momentengleichungen und daraus die Produktionsterme für (2.5) abgeleitet. Dazu wird zuerst die Fourier-Transformierte des Stoßoperators als Funktional der charakteristischen Funktionen berechnet. In Verbindung mit dem Kumulantenansatz erhält man wieder durch schrittweise Differentiation die Produktionsterme für die Momentengleichungen als Funktion der Kumulanten. Da die Abbildung der Kumulanten auf die Momente eineindeutig und analytisch invertierbar ist, können im Anschluss die Formulierungen der Bewegungsgleichungen für die Momente sowohl in Erhaltungs- bzw. Divergenzform als auch für die Kumulantengleichungen in quasi-linearer bzw. Advektionsform bestimmt werden.

Betrachtet man die Gleichungen mit Produktionstermen für das Wechselwirkungsmodell des Maxwell-Gases, so gibt die Betrachtung von in den Kumulanten linearisierten Produktionstermen Aufschluss über den Bezug der Kumulanten zur klassischen, kontinuumsmechanischen Fluid-Beschreibung. Interessanterweise ist die Jacobi-Matrix der Produktionsterme bezüglich der Kumulanten im Gleichgewicht blockdiagonal. Dies führt dazu, dass entsprechende Eigenwerte und -variablen unabhängig von der Ordnung der Kumulantengleichungen N_α bestimmt werden können [See03a]. Abbildung 2.1 zeigt das so erhaltene Eigenwertspektrum. Die ursprüngliche Motivation für die Kumulantenmethode zeigt sich bestätigt, denn die Eigenwerte (und damit die Relaxationsraten für die entsprechenden Eigenvariablen) wachsen mit zunehmender Kumulantenordnung. Allerdings ist ein erheblicher Überlapp der Eigenwertspektren verschiedener Ordnungen zu beobachten. Die Eigenvariablen $e_{\alpha i}$ lassen sich als Linearkombination der Kumulanten berechnen, wobei die Relationen aufgrund der Blockdiagonalität der Jacobi-Matrix der

Produktionsterme unabhängig von der Ansatzordnung sind:

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} e_{00} \\ e_{11} \\ e_{12} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} C^0 \\ C^x \\ C^y \end{pmatrix} \\
 \begin{pmatrix} e_{20} \\ e_{211} \\ e_{212} \end{pmatrix} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C^{xx} + C^{yy} \\ C^{xx} - C^{yy} \\ 2C^{xy} \end{pmatrix} \\
 \begin{pmatrix} e_{311} \\ e_{312} \\ e_{321} \\ e_{322} \end{pmatrix} &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C^{xxx} + C^{xyy} \\ C^{yyy} + C^{xxy} \\ C^{xxx} - 3C^{xxy} \\ C^{yyy} - 3C^{xxy} \end{pmatrix} \\
 \begin{pmatrix} e_{40} \\ e_{411} \\ e_{412} \\ e_{421} \\ e_{422} \end{pmatrix} &= \frac{1}{8} \begin{pmatrix} C^{xxxx} + 2C^{xxyy} + C^{yyyy} \\ 4C^{xxxx} - 4C^{yyyy} \\ 4C^{xxyy} + 4C^{xyyy} \\ C^{xxxx} - 6C^{xxyy} + C^{yyyy} \\ 4C^{xxyy} - 4C^{xyyy} \end{pmatrix} \\
 &\vdots
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

Genauere Betrachtungen [See03a] zeigen drei verschiedene Arten von Eigenvariablen, die man entsprechend der Zuordnung zu klassischen Variablen unterscheiden kann:

- einzelne, *energieartige* Eigenvariablen $e_{\alpha 0}$, welche immer zum niedrigsten Eigenwert für geradzahlige Ordnungen α auftreten. Diese Eigenvariablen sind symmetrisch bezüglich einer Vertauschung der Koordinatenachsen;
- paarweise *flussartige* Eigenwerte $e_{\alpha n1}$ und $e_{\alpha n2}$, welche stets paarweise zu ungeradzahligem Ordnungen α auftreten und für die die Eigenvariablen ebenfalls symmetrisch bezüglich einer Vertauschung der Koordinatenachsen sind;
- paarweise *spannungsartige* Eigenwerte $e_{\alpha n1}$ und $e_{\alpha n2}$, die zu geradzahligem α auftreten und für deren Eigenvariablen sowohl symmetrisches als auch antisymmetrisches Verhalten auftritt.

Schreibt man die Kumulantengleichungen in diesen Eigenvariablen der Produktionsterme, so kann man die Eigenvariablen niedrigster Ordnung als die Feldvariablen der klassischen Hydrodynamik identifizieren [SH02]. Abbildung 2.1 verdeutlicht diese Zuordnung der Eigenvariablen e_{00} zur Dichte n , e_{1i} zur Strömungsgeschwindigkeit \underline{v} , e_{20} zur spezifischen Energie ε , e_{21i} zum Spannungstensor $\underline{\underline{\sigma}}$ und e_{31i} zum Wärmestrom \underline{j} . Dazu ist keine Kenntnis „klassischer“ Modellierungen notwendig, denn es werden lediglich Systeme nahe dem Gleichgewicht betrachtet, für die sich über den ersten Schritt einer Maxwell-Iteration aus dem erhaltenen Differentialgleichungssystem *direkt* die Navier-Stokes- bzw. Eulergleichungen ableiten lassen. Der Zusammenhang der Relaxationszeiten mit den Transportkoeffizienten ergibt dabei die Motivation für ein hyperbolisches Equivalent zum Navier-Stokes-Modell.

Diese Herleitung des Bezugs zum Navier-Stokes-System über die Technik der Maxwell-Iteration kann benutzt werden, um Randbedingungen für die Kumulanten zu konstruieren: Fasst man sich im Fluid aufbauende Wärmeströme und Scherspannungen als Reaktion auf Gradienten in den Eigenvariablen niedrigerer Ordnung auf, so kann man entsprechend der erhaltenen Beziehungen aus den Gradienten niedriger Ordnung die Randwerte für Eigenvariablen höherer Ordnung rekonstruieren (siehe Abschnitt 2.4.3).

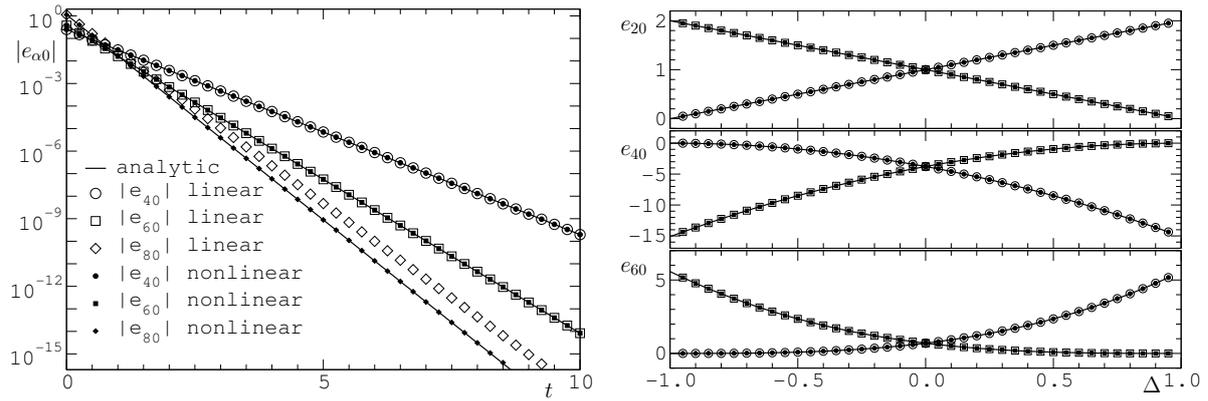


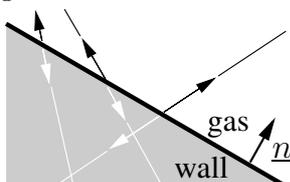
Abbildung 2.2: Eigenvariable für die analytische und numerische BKW-Lösung mit nichtlinearen und linearisierten Produktionstermen. *links*: Zeitentwicklung für das Maxwell-Gas. *rechts*: zur Zeit $t = 1$ für eine binäre Mischung bei verschiedenen Massenverhältnissen Δ .

2.4.1 Vergleich mit der analytischen Bobylev/Krook-Wu-Lösung

Für den Fall einer räumlich homogenen Mischung kann die einzige bekannte, nichttriviale, analytische Lösung der Boltzmann-Gleichung angegeben werden, die so genannte Bobylev/Krook-Wu-Lösung [Bob75], [KW77]. Mit dieser lassen sich für bestimmte Anfangsbedingungen explizite Lösungen der raumhomogenen Boltzmann-Gleichung durch elementare Funktionen angeben. In [SH04b] wurde diese Lösung auf den Kumulanten-Ansatz übertragen und so die entsprechenden analytischen Lösungen für die Kumulanten bestimmt. Mittels einer Runge-Kutta-Integration 4. Ordnung wurde die numerische Lösung für die nichtlinearen und die in den Kumulanten linearisierten Produktionsterme bestimmt und mit der analytischen Lösung verglichen. Durch die hohe Symmetrie der Lösung haben zwar mehrere Kumulanten höherer Ordnung eine nichttriviale Zeitentwicklung, betrachtet man jedoch die Zeitentwicklung der Eigenvariablen bezüglich der linearisierten Produktionsterme, so sind nur die energieartigen Eigenwerte von Null verschieden. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung bei Verwendung der exakten, nicht-linearen Produktionsterme sowohl für das einkomponentige Gas als auch für eine binäre Mischung über einen weiten Bereich unterschiedlichen Massenverhältnisses der Spezies (siehe Abbildung 2.2). Bei Verwendung der nach den Kumulanten linearisierten Produktionsterme sind jedoch für Kumulanten höherer Ordnung Abweichungen zu beobachten.

2.4.2 Couette-Strömung mit adiabatischen Rändern

In den Vorarbeiten zur letzten Antragsperiode wurden die aus der kinetischen Theorie bekannten adiabatischen noslip-Randbedingungen für den Kumulantenansatz hergeleitet: Bei adiabatischen noslip-Randbedingungen wird ein auf die Wand prallendes



Teilchen elastisch retro-reflektiert, d. h. beide Geschwindigkeitskomponenten normal und tangential zur Wand werden negiert. Dadurch können Normal- und Scherspannungen zwischen Fluid und Wand entstehen und das Fluid hat am Rand die Wandgeschwindigkeit.

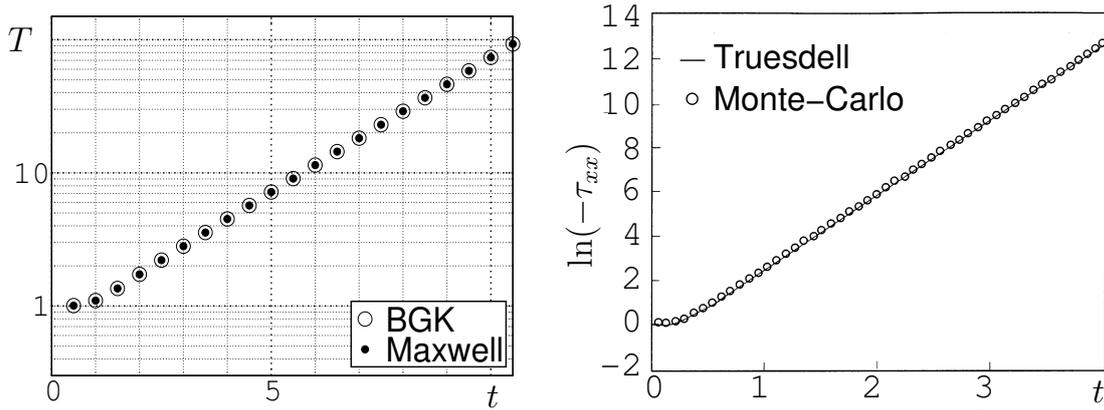


Abbildung 2.3: Zeitentwicklung der Temperatur in der Mitte des Kanals für die Couette-Strömung mit adiabatischen Randbedingungen. *links*: Temperatur T für BGK- und Maxwell-Gas nach der Kumulantenmethode. *rechts*: Spannungskomponente τ_{xx} (für dieses Problem $\propto T$) als Ergebnis einer Monte-Carlo-Simulation und die exakte Lösung nach Truesdell [Cer00].

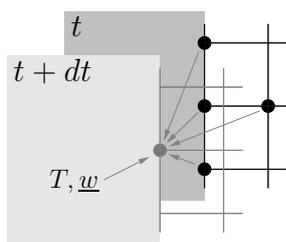
Aus diesen Annahmen folgen Symmetrieeigenschaften der Phasenraumdichte und damit auch der charakteristischen Funktion, aus welchen Randbedingungen an die Werte und Gradienten für die Kumulanten folgen [SH00], [See03a].

Mit diesen adiabatischen noslip-Randbedingungen wurde das Problem der Couette-Strömung simuliert [See03a] und mit Ergebnissen für den 3D-Fall nach [Cer00] verglichen. Obwohl ein quantitativer Vergleich aufgrund unterschiedlicher Dimensionalität und Strömungsverhältnisse nicht sinnvoll möglich ist, zeigen die Ergebnisse (siehe Abbildung 2.3) eine gute qualitative Übereinstimmung der Ergebnisse nach der Kumulantenmethode, analytischer Ergebnisse der kinetischen Theorie und direkter Simulation durch Molekulardynamik.

2.4.3 Thermische Randbedingungen

Ein wichtiges Ergebnis der Arbeiten in der letzten Antragsperiode sind Formulierungen von Randbedingungen [See03a], [SH04a] für die Kumulantengleichungen, welche eine Simulation stationärer Strömungen mit dissipativen Effekten erlauben. Zum einen thermische Randbedingungen, welche lediglich die Temperatur und Geschwindigkeit der Wand in die Strömung einprägen und zum anderen Navier-Stokes-Randbedingungen, bei denen Wärmestrom und Impulsfluss am Rand konsistent zu den Gradienten der entsprechenden Kumulanten niedriger Ordnung berechnet werden. Bei den thermischen

noslip-Randbedingungen werden Randpunkte im wesentlichen wie innere Gitterpunkte behandelt: die Gradienten senkrecht zur Wand werden durch einseitige Differenzen approximiert und die Werte für die Eigenvariablen e_{1i} und e_{20} durch die Komponenten der Wandgeschwindigkeit \underline{w} bzw. aus der Wandtemperatur T berechnete Werte ersetzt. Anschließend erfolgt ein Update wie für einen normalen Fluidknoten.



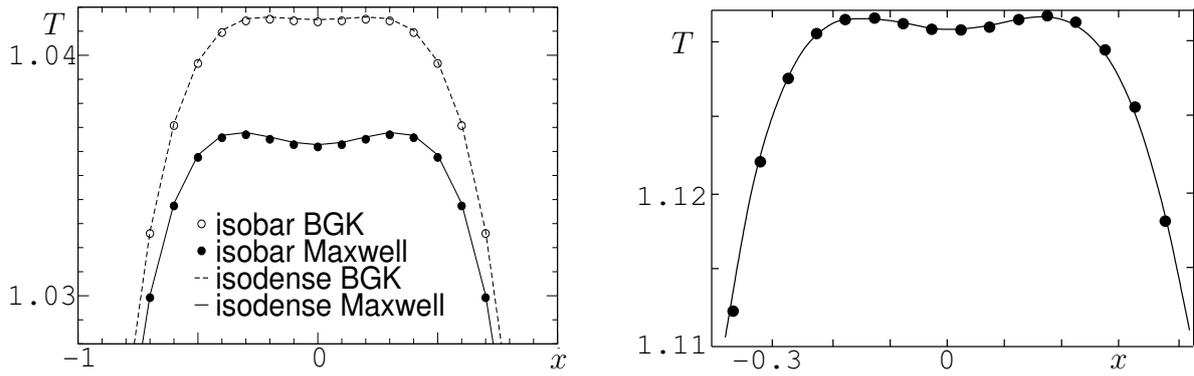
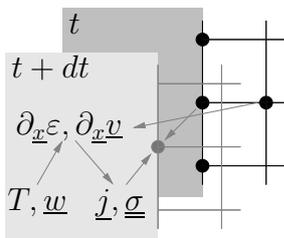


Abbildung 2.4: Temperaturprofil für die Poiseulle-Strömung. *links*: Kumulantenmethode ($N_\alpha = 3$, für BGK- und Maxwell-Gas) *rechts*: Molekulardynamik-Simulation (Punkte) und analytische Ergebnisse (Linie) nach [HMM99]

Bei den Navier-Stokes Randbedingungen werden zunächst für den Randknoten und den benachbarten Fluidknoten die Eigenvariablen bezüglich der Produktionsterme bestimmt.

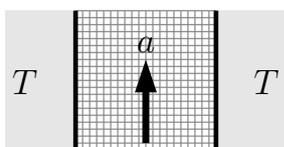


Für die der Strömungsgeschwindigkeit und spezifische Energie entsprechenden Eigenvariablen e_{1i} und e_{20} des Randknotens werden die Wandgeschwindigkeit w und die aus der Wandtemperatur T berechnete spezifische Energie angenommen. Über einseitige Differenzenquotienten zum Fluidknoten werden die Gradienten in den Eigenvariablen berechnet und nach den aus der Maxwell-Iteration erhaltenen

Beziehungen die den Spannungen $\underline{\sigma}$ und dem Wärmestrom j entsprechenden Eigenvariablen e_{21i} und e_{31i} bestimmt. Durch Rücktransformation erhält man die neuen Werte für die Kumulanten am Randknoten.

Anhand von Couette- und Poiseulle-Strömungen wurden diese thermischen Randbedingungen für verschiedene Gasmodelle untersucht [See03a] und es zeigt sich, dass für beide die wesentlichen Eigenschaften (lineares bzw. parabolisches Profil der Strömungsgeschwindigkeit, dissipative Effekte im Innern und Wärmetransport zu den Wänden) qualitativ richtig wiedergegeben werden. Allerdings konnten bestimmte, für Strömungen verdünnter Gase typische qualitative Eigenschaften nur mit der einen oder anderen Art Randbedingungen beobachtet werden. Trotzdem wird mit diesen Randbedingungen ein direkter Vergleich der Implementation der Kumulantenmethode mit den in den A-Teilprojekten verwendeten Verfahren möglich, welcher jedoch zum gegenwärtigen Zeitpunkt noch nicht vollständig abgeschlossen ist.

2.4.4 Poiseulle-Strömung

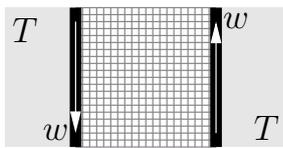


Für die durch eine konstante externe Kraft angetriebene Kanalströmung sagen Modelle basierend auf der kinetischen Theorie ein lokales Minimum im Temperaturprofil quer zur Strömungsrichtung voraus (siehe Abbildung 2.4).

Dieser qualitative Unterschied zum Navier-Stokes-Modell tritt bereits für laminare Strömungen mit niedrigen Reynolds- und Machzahlen sowohl bei einer direkten Molekulardynamik-Simulation [MBG97] als auch bei einer störungstheoretischen Betrachtung der

Boltzmann-Gleichung mit BGK-Wechselwirkungsterm [TS94] und Momentenmethoden [HMM99] auf. Diese qualitative Eigenschaft ist auch bei Antrieb der Kanalströmung durch einen Druckgradienten vorhanden, obwohl hierbei eine bessere Übereinstimmung mit Navier-Stokes zu beobachten ist [ZGA03]. Auch bei Modellierung durch die Kumulantenmethode wird dieses lokale Temperaturminimum reproduziert [See03a], allerdings nur bei Verwendung der Navier-Stokes-Randbedingungen. Für die thermischen noslip-Randbedingungen wird ähnlich zu Navier-Stokes ein Maximum im Temperaturprofil beobachtet.

2.4.5 Couette-Strömung



Auch für die laminare Scherströmung eines verdünnten Gases zwischen zwei unendlich ausgedehnten Platten, welche sich entgegengesetzt mit der Geschwindigkeit w bewegen, werden verschiedene Eigenschaften der Strömung verdünnter Gase durch das Navier-Stokes-Modell falsch wiedergegeben.

Zum einen ist das Profil der x -Komponente der Geschwindigkeit sogar für die linearisierte Boltzmann-Gleichung keine exakt lineare Funktion mehr [Wil62], zum anderen tritt ein nicht verschwindender Wärmestrom in Strömungsrichtung auf, obwohl kein Temperaturgradient in dieser Richtung vorhanden ist. Auch diese durch Navier-Stokes nicht beschriebene qualitative Eigenschaft wird durch direkte numerische Simulation [RC97], Momentenmethoden [TS95] und die kinetische Theorie [CC70] vorhergesagt. Abbildung 2.5 zeigt die Ergebnisse einer Molekulardynamik-Simulation für ein stark verdünntes Gas und einer Simulation mit der Kumulantenmethode [See03a]. Diese reproduziert die qualitative Eigenschaft etwa gleich starker Wärmestromkomponenten, die Ausbildung einer Randschicht ist jedoch nicht zu beobachten, wobei offen ist, ob dies an den verwendeten Randbedingungen oder der kleineren Knudsen-Zahl liegt. Interessanterweise werden etwa gleich starke Wärmeströme in x und y -Richtung bei Simulation mit der Kumulantenmethode nur mit thermischen noslip-Randbedingungen beobachtet. Bei Navier-Stokes Randbedingungen ist der Wärmestrom quer zur Strömung um Größenordnungen stärker [See03a], das Wärmestromprofil entspricht also eher dem Navier-Stokes-Modell.

2.4.6 Stabilität/Hyperbolizitätsbereich

Für starke externe Kräfte (Poiseulle) bzw. hohe Wandgeschwindigkeiten (Couette) treten numerische Instabilitäten der verwendeten Verfahren auf. Ausgehend von der Beobachtung, dass diese sich von den Rändern aus in das Strömungsgebiet hinein ausbreiten, wurden Untersuchungen zum Hyperbolizitätsbereich der Kumulanten-Gleichungen bis zu hohen Ordnungen angestellt [See03a]. Dazu wurde das Eigenwertspektrum der Komponenten des Advektionstensors bei Variation der Eigenvariablen bezüglich der in den Kumulanten linearisierten Produktionsterme betrachtet. Ein charakteristisches Spektrum ist in Abbildung 2.6 dargestellt. Für dieses wurde die der Wärmestromkomponente j_x entsprechende Eigenvariable e_{311} variiert und für alle anderen Eigenvariablen Gleichgewichtswerte angenommen.

Die Form der Spektren im Vergleich mit dem entsprechenden Profil aus der Strömungssimulation (siehe Abbildung 2.6) lässt darauf schließen, dass diese Instabilitäten durch zu hohe Wärmeflüsse hervorgerufen werden. Dies kann zum einen dadurch bedingt sein,

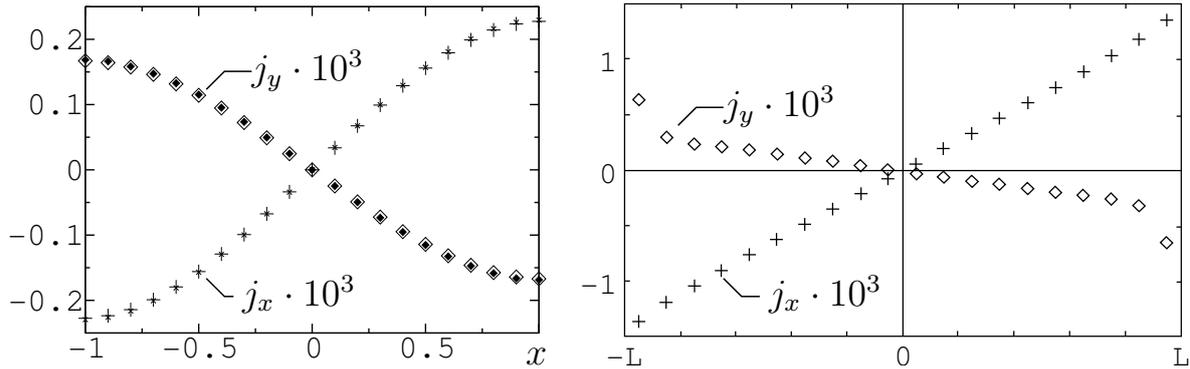


Abbildung 2.5: Wärmestromprofil (quer zur Strömung) für die Couette-Strömung. *links*: Kumulantenmethode für BGK- und Maxwell-Gas (kleine Symbole) mit thermischen Randbedingungen, *rechts*: Molekulardynamik-Simulation mit thermischen noslip-Randbedingungen (nach kin. Theorie) [CR96].

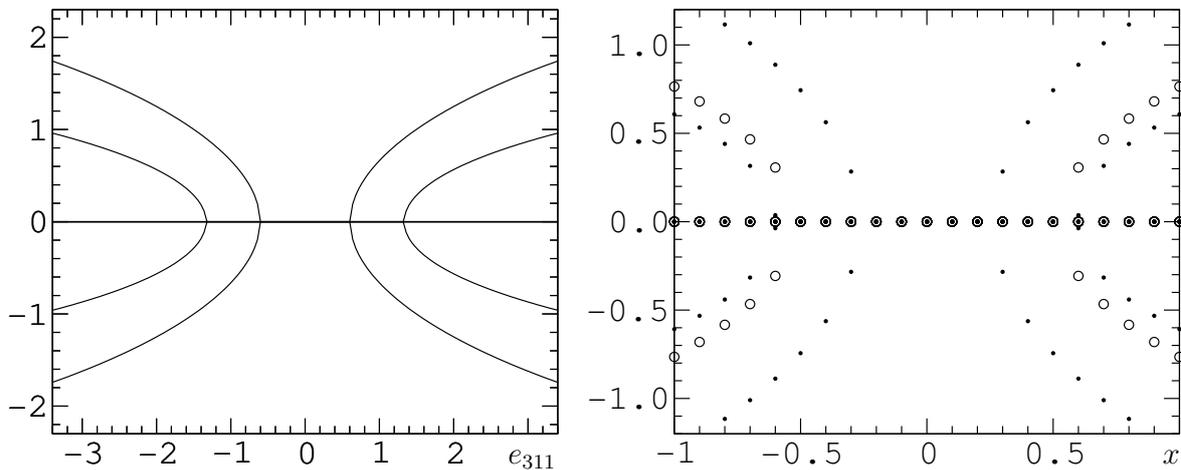


Abbildung 2.6: Imaginärteil der Eigenwerte der x -Komponente des Advektionstensors. *links*: Variation der Wärmestromkomponente j_x (entspricht e_{311}). *rechts*: Querschnitt über eine Couette-Strömung mit starker Scherung für BGK-Gas (Kreise) und Maxwell-Gas (Punkte).

dass die Randbedingungen für solch starke Nichtgleichgewichtszustände nicht geeignet sind (die Navier-Stokes-Beziehungen wurden unter der Annahme von Zuständen nahe dem Gleichgewicht erhalten) oder die Ordnung der Kumulantengleichungen zu niedrig ist. Dies muss in weitergehenden Arbeiten geklärt werden.

2.4.7 Effiziente Diskretisierung

In den parallel dazu durchgeführten Arbeiten zur Anwendbarkeit effizienter, d.h. adaptiver Diskretisierungsstrategien für die Kumulantengleichungen zeigte sich [See03a], dass sich eine wesentliche Voraussetzung für die Anwendbarkeit moderner Verfahren mit dem bisherigen, nichtlinearem Ansatz für die charakteristische Funktion nur schwierig erreichen lässt. Hauptproblem ist dabei die analytische Formulierung einer Entropie-

dichte, mittels derer eine symmetrische Form der Gleichungen konstruiert werden kann, für die sich die aus dem H-Theorem ableitbaren fundamentalen Stabilitätseigenschaften auf die diskrete Lösung übertragen. Im Rahmen dieser noch andauernden Arbeiten konnte gezeigt werden [See03a], dass Momenten- und Kumulantenmethoden als eine spezielle Form der Methode der gewichteten Residuen (WRM) zur Diskretisierung der Boltzmann-Gleichung aufgefasst werden können. Allerdings gehen viele Eigenschaften der WRM dadurch verloren, dass für die Momenten-/Kumulantenmethoden nichtlineare Ansatzfunktionen für die Lösung verwendet werden müssen. Vorbetrachtungen zeigen, dass bei geeigneter Wahl der Ansatzfunktionen für die charakteristische Funktion eine analytische Form für die Entropiedichte und damit nach der Kumulantenmethode symmetrische Gleichungen angegeben werden können, die unter Beibehaltung der Stabilitätseigenschaften diskretisierbar sind.

Literaturverzeichnis

- [SH04a] S. Seeger and K. H. Hoffmann.
Thermal boundary conditions for the cumulant method.
Submitted to Europhys. Lett., May 2004.
- [SH04b] S. Seeger and K.H. Hoffmann.
The cumulant method for the space-homogeneous Boltzmann equation.
submitted to Continuum Mech. Thermodyn., March 2004.
- [See03a] S. Seeger.
The Cumulant Method.
Phd thesis, Chemnitz University of Technology, Chemnitz, September 2003.
<http://archiv.tu-chemnitz.de/pub/2003/0120>.
- [See03b] S. Seeger.
Cumulant method implementation for MATHEMATICA.
<http://www.tu-chemnitz.de/pub/2003/0120>, March 2003.
- [SH02] S. Seeger and K. H. Hoffmann.
The cumulant method applied to a mixture of Maxwell gases.
Continuum Mech. Thermodyn., 14(2):321–335, 2002.
- [SH00] S. Seeger and K. H. Hoffmann.
The cumulant method for computational kinetic theory.
Continuum Mech. Thermodyn., 12:403–421, 2000.
- [Sp00] P. Späth.
Renewed Theory, Interfacing, and Visualization of Thermal Lattice Boltzmann Schemes. Dissertation, TU Chemnitz, July 2000.
- [See97] S. Seeger.
Gitter-Boltzmann-Schemata für 2D-Hydrodynamik.
Diplomarbeit, TU Chemnitz, November 1997.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

In der letzten Bewilligungsphase ist eine verbesserte Implementierung eines Programmsystems zur Lösung der Kumulantengleichungen erfolgt. Die Validierung der Methode anhand komplizierterer Testprobleme zeigt die grundsätzliche Anwendbarkeit der Kumulanten-Methode, wirft aber auch neue Fragestellungen auf, die wir weiter untersuchen wollen.

Hauptziele für den abschließenden Bewilligungszeitraum sind daher zum einen die Anwendung einer aus der Kumulantenmethode abgeleiteten Gewichtete-Residuen-Formulierung der Herleitung der Kumulantengleichungen und zum anderen die Herleitung thermodynamisch korrekt gestellter Randbedingungen, die parallel zueinander bearbeitet werden sollen.

Zunächst soll ausgehend von den bisherigen Arbeiten zum Hyperbolizitätsbereich der Lösung untersucht werden, inwieweit die an den Rändern auftretenden Phasenraum-dichten durch den Kumulantenansatz richtig approximiert werden können. Dabei soll untersucht werden, wie sich aus der kinetischen Theorie bekannte Formulierungen für Randbedingungen an die Phasenraum-dichte auf die für die Ableitung der Kumulantengleichungen benötigte charakteristische Funktion übertragen lassen. Diese Untersuchungen haben zum Ziel, Randbedingungen aus der mikroskopischen Beschreibung heraus systematisch und theoretisch fundiert ableiten zu können. Auf der anderen Seite lassen sich auch aus dem thermodynamischen Verständnis geschlossener bzw. offener thermodynamischer Systeme Randbedingungen in Form von Extremalprinzipien ableiten. Diese stellen eine alternative "makroskopische" Formulierung dar, welche jedoch eng an eine praktisch benutzbare Formulierung der entsprechenden Größen (z. B. Entropiedichte) geknüpft ist. Die Untersuchungen zu dieser Herangehensweise und ihrer Anwendbarkeit auf die Kumulantengleichungen sind eng mit den Arbeiten zur Formulierung möglicher Entropiefunktionale verknüpft und sollen deshalb parallel verfolgt werden.

Gleichzeitig soll die Anwendung moderner numerischer Methoden auf die Lösung der raum-inhomogenen Kumulanten-Gleichungen weiter vorangetrieben werden. Es ist bekannt, dass bei Angabe einer Entropiedichte als Funktion der Ansatzparameter die Gleichungen symmetrisiert und damit unter Übertragung der grundlegenden Stabilitätseigenschaften auf die numerische Lösung diskretisiert werden können. Für Formulierungen basierend auf einem Ansatz für die charakteristische Funktion sind Entropie-Funktionale bisher in der Literatur jedoch nicht bekannt.

Um eine weitergehende Validierung der Kumulantenmethode und ihrer weiterentwickelten Formulierung anhand komplizierter Anwendungsprobleme zu ermöglichen, soll in Fortführung der zur Zeit noch andauernden Arbeiten für 1D Modellgleichungen ein entsprechendes Programmsystem für den 2D-Fall für Parallelrechner implementiert werden. Die symmetrische Konstruktion der Gleichungen würde zum einen eine stabile Diskretisierung unter Verwendung adaptiver Techniken, als auch die gewünschte Anpassung der Detailliertheit des physikalischen Modells ermöglichen.

Zusammen mit den Ergebnissen aus den Untersuchungen zu möglichen Randbedingungen können so kompliziertere Anwendungs-Probleme gelöst werden, anhand derer die Anwendbarkeit dieser Herangehensweise weiter überprüft werden soll. Je nach Fortschritt der Arbeiten könnten dabei zusammen mit anderen Forschergruppen folgende Probleme

untersucht werden, z. B. um (I) Aussagen für die Anwendbarkeit mikro- und makroskopisch motivierter Randbedingungen durch Vergleich mit Molekulardynamiksimulationen, Discrete-Velocity-Verfahren und den in den A-Teilprojekten verwendeten Navier-Stokes-Formulierungen zu erhalten; (II) die Genauigkeit von Lösungen der raumhomogenen Boltzmann-Gleichung durch Kumulantengleichungen hoher Ordnung mit etablierten, deterministischen und stochastischen Lösungsmethoden zu testen und (III) Simulationen turbulenter Strömungen mit periodischen Randbedingungen und Gleichungen niedriger Ordnung mit den Ergebnissen für Lattice-Boltzmann-Methoden zu vergleichen.

KAPITEL 3

Gesamtdokumentation der Aktivitäten

3.1 Aktivitätenliste

3.1.1 Seminare, Vorträge und Präsentationen in Chemnitz

| Datum | Referent(en) (Einrichtung) | Thema (Bemerkung) |
|----------|--|--|
| 27.04.01 | Dr. C. Wieners (TU Chemnitz/Uni Heidelberg) | Effiziente Methoden in der Festkörpermechanik |
| 11.05.01 | Prof. P. Bastian (Uni Heidelberg) | Parallel simulation of multiphase flow in porous media |
| 11.05.01 | Dr. Alex Punnoose (Weizmann Inst, Israel) | The 2D MIT: experimental facts and theoretical challenges |
| 16.05.01 | Dr. Arunava Chakrabarti (Kalyani Univ., Indien) | On the existence of extended electronic states in quasiperiodic and fractal lattices |
| 18.05.01 | Prof. Gudula Rüniger (TU Chemnitz) | Parallele Implementierung irregulärer Algorithmen |
| 23.05.01 | Dr. Ulrich Zülicke (Univ. Karlsruhe) | Quantum breakdown of the quantized Hall insulator |
| 06.06.01 | PD Dr. Christian Elsässer (MPI Stuttgart) | Atomistik und Elektronenstruktur an inneren Kristallgrenzflächen |
| 12.06.01 | Dr. M. Dormanns (DETECON GmbH, Bonn) | Cluster Systeme in High-Performance E-Business Architekturen |
| 13.06.01 | Dr. Frank Großmann (TU Dresden) | Electron transport in nano-systems |
| 20.06.01 | Dr. Ivan Barvik (Karls-Uni Prag) | Energy transfer and relaxation in circular purple bacteria antenna systems |
| 22.06.01 | Dr. Barbara Wohlmuth (Uni Augsburg) | Nichtkonforme Gebietszerlegungsmethoden |
| 26.06.01 | Martin Schulz (TU-München) | DSM Softwarearchitekturen und Programmierumgebungen |
| 27.06.01 | Prof. Dr. Mikhail Raikh (University of Utah) | Anomalous Coherent Backscattering of Light from Photonic Crystals |
| 03.07.01 | Joachim Worringer (RWTH Aachen) | Parallele Ein-/Ausgabe in Clustersystemen |
| 04.07.01 | Stefan Nufer (MPI Stuttgart) | Variation of the ELNES under channeling conditions |
| 06.07.01 | | Die Programmierer/Numeriker des SFB 393, Tag der Software |
| 11.07.01 | Dr. Heike Emmerich (MPIPKS Dresden) | Das Stefan Problem im Oberflächenwachstum |
| 13.07.01 | Steffen Seeger (TU Chemnitz) | Möglichkeiten und Praktische Anwendung freier Entwicklungs-Tools |

| Datum | Referent(en) (Einrichtung) | Thema (Bemerkung) |
|----------|---|---|
| 18.07.01 | Nguyen, von Sou | Small-Punch-Test zur Bestimmung mechanischer Modellparameter von Lotwerkstoffen |
| 18.07.01 | Dr. Prabasaj Paul (University of Utah) | Bands and bandgaps by variational methods |
| 17.09.01 | Dr. V. Dolejsi (Prag) | Mathematical Background of the Anisotropic Mesh Adaptation Technique |
| 19.09.01 | D. Silvester (Manchester) | Preconditioners for Incompressible Stokes and Navier-Stokes Equations (FEM Symposium) |
| 19.09.01 | G. Stoyan (Budapest) | Crouzeix-Velte Decomposition and Applications (FEM Symposium) |
| 19.09.01 | P. Knobloch (Praha) | Non-nested multi-level solvers for finite element discretizations of mixed problems I (FEM Symposium) |
| 19.09.01 | V. John (Magdeburg) | Non-nested multi-level solvers for finite element discretizations of mixed problems II (FEM Symposium) |
| 19.09.01 | C. Wieners (Chemnitz) | Taylor-Hood elements in 3D (FEM Symposium) |
| 19.09.01 | A. Meyer (Chemnitz) | Subspace cg for handling hanging nodes and slip-boundary-conditions (FEM Symposium) |
| 19.09.01 | G. Haase (Linz) | An Additive Schwarz Preconditioner in an Ocean Modeling Code (FEM Symposium) |
| 19.09.01 | S. Reitzinger (Linz) | A General Concept for the Construction and Parallelization of Algebraic Multigrid Methods (FEM Symposium) |
| 19.09.01 | O. Steinbach (Stuttgart) | On the coupling of finite and boundary elements for the Stokes problem (FEM Symposium) |
| 19.09.01 | J. Brandts (Utrecht) | Superconvergence in mixed finite element methods (FEM Symposium) |
| 19.09.01 | L. Paquet (Valenciennes) | Some mixed finite element methods on anisotropic meshes (FEM Symposium) |
| 19.09.01 | A. Georgievich (Novosibirsk) | Finite-dimensional model for a system of the high-conducting dense packing particles (FEM Symposium) |
| 20.09.01 | R. Stenberg (Helsinki) | Stabilized FE methods for the Reissner-Mindlin plate (FEM Symposium) |

| Datum | Referent(en) (Einrichtung) | Thema (Bemerkung) |
|----------|-------------------------------|--|
| 20.09.01 | J. Schöberl (Linz) | Residual-Based A Posteriori Error Estimate for a Mixed Reissner-Mindlin Plate Finite Element Method (FEM Symposium) |
| 20.09.01 | E. Rank (München) | General Concepts, Implementation Aspects and Numerical Results: High Order Solid Elements for Thin-Walled Structures (FEM Symposium) |
| 20.09.01 | M. Melenk (Leipzig) | A fully adaptive algorithm for hp-finite element methods (FEM Symposium) |
| 20.09.01 | E. Creuse (Valenciennes) | Active control of a viscous compressible flow over a dihedral plane (FEM Symposium) |
| 20.09.01 | H. Roos (Dresden) | Finite elements for problems with parabolic boundary layers (FEM Symposium) |
| 20.09.01 | H. Zarin (Dresden) | A second order scheme for singularly perturbed differential equations with discontinuous source term (FEM Symposium) |
| 20.09.01 | V. Dolejsi (Praha) | Anisotropic Mesh Adaptation - Method Independent Adaptive Technique (FEM Symposium) |
| 20.09.01 | F. Hülsemann (Erlangen) | Hybrid hierarchical grids: Bringing together flexibility and high performance (FEM Symposium) |
| 20.09.01 | P. Jimack (Leeds) | A Multilevel Approach for Obtaining Locally Optimal Finite Element Meshes (FEM Symposium) |
| 20.09.01 | G. Kunert (Chemnitz) | Zienkiewicz-Zhu error estimators on anisotropic tetrahedral finite element meshes (FEM Symposium) |
| 20.09.01 | L. Laayouni (Rabat) | Anisotropic a posteriori error estimation for convection diffusion problem (FEM Symposium) |
| 20.09.01 | S. Grosman (Chemnitz) | The equilibrated residual error estimator and its modification for anisotropic triangular finite element meshes (FEM Symposium) |
| 21.09.01 | M. Berzins (Leeds) | Positivity Preserving Mass Matrices and Galerkin Methods for Transient Flow Problems (FEM Symposium) |
| 21.09.01 | M. Feistauer (Praha) | Discontinuous Galerkin methods for fluid flow problems (FEM Symposium) |

| Datum | Referent(en) (Einrichtung) | Thema (Bemerkung) |
|----------|--|---|
| 21.09.01 | R. Hartmann (Heidelberg) | Adaptive Discontinuous Galerkin Finite Element Methods for Nonlinear Hyperbolic Conservation Laws (FEM Symposium) |
| 21.09.01 | G. Kanschat (Heidelberg) | The local discontinuous Galerkin method for incompressible viscous flow (FEM Symposium) |
| 21.09.01 | T. Schnitzer (Freiburg) | The Discontinuous Galerkin Method applied to the MHD Equations (FEM Symposium) |
| 21.09.01 | B. Heinrich (Chemnitz) | Nitsche-type finite element method for elliptic problems with singularities (FEM Symposium) |
| 28.09.01 | Arne Barinka | Fast evaluation of nonlinear functionals of wavelet expansions |
| 19.10.01 | | 2. Kolloquium Wissenschaftliches Rechnen in Sachsen |
| 19.10.01 | Gabriel Wittum | Der Forschungsverband WiB Baden-Württemberg |
| 24.10.01 | Dr. Andrzej Eilmes (Kra-kow) | Microelectrostatics in molecular crystals: theory and how it works |
| 05.11.01 | D. Banabic (Technical University of Cluj-Napoca, Rumänien) | Anisotropic yield criteria for sheet metals: theory and experiments |
| 07.11.01 | Dr. Volker Meden (Universität Göttingen) | A single impurity in a Luttinger liquid: How it “cuts“ the chain |
| 09.11.01 | Dr. B. Steffen (FZ Jülich) | Subspace Methods for Large Sparse Interior Eigenvalue Problems |
| 09.11.01 | Jens Breuer | Wavelet approximation of the symmetric boundary integral formulation |
| 12.11.01 | Prof. P. Ciarlet (ENSTA, Paris) | Solving numerically Maxwell’s equations: The Singular Complement Method |
| 14.11.01 | Nihal Yapage (TU Chemnitz) | Error correcting codes |
| 23.11.01 | Prof. C. Schwab (ETH Zürich) | Discontinuous Galerkin Time-stepping for parabolic problems |
| 28.11.01 | Jürgen Dietel (Universität Leipzig) | Die Chern-Simons Theorie des fraktionellen Quanten-Hall Effekts |
| 30.11.01 | Dr. D. Pleiter (DESY) | Teraflop Computers for Lattice Gauge Theory |
| 05.12.01 | Wolfgang Dahmen | Adaptive multiscale techniques for nonlinear variational problems |

| Datum | Referent(en) (Einrichtung) | Thema (Bemerkung) |
|----------|--|---|
| 05.12.01 | Dr. Igor Goychuk (Univ. Augsburg) | Semiclassical electron transfer in strong periodic fields: beyond Golden Rule description |
| 10.12.01 | Heiko Knapp | Optimierung von Wavelets |
| 11.12.01 | Thomas Kirner | Biochemische Amplifikationsreaktionen in diffusiv gekoppelten Mikroflussreaktoren |
| 12.12.01 | Rastko Sknepnek (TU Chemnitz) | Coexistence of Superconductivity and Ferromagnetism |
| 12.12.01 | Uwe Zerbst | SINTAP: Entwurf einer vereinheitlichten europäischen Fehlerbewertungsprozedur |
| 14.12.01 | Prof. S. Funken (Erlangen) | Wie zuverlässig können numerische Simulationen sein? |
| 18.12.01 | Hans Diebner | Adaptive Kognitionssysteme zur Dynamikerkundung |
| 20.12.01 | Dr. Krause (FU Berlin) | Nonlinear Monotone Multigrid Methods for Contact Problems in Linear Elasticity |
| 20.12.01 | J. Hippold (TU Chemnitz) | Dezentrale Taskpools auf Rechnern mit verteiltem Speicher |
| 07.01.02 | Florian Grond | Algorithmen zur Berechnung von Lyapunovexponenten |
| 09.01.02 | Inna Plyushchay (Univ. Kiev) | Properties and electronic structure of transition-metal-based amorphous alloys |
| 17.01.02 | Prof. Dr. Robert Schrader (FU Berlin) | Scattering theory approach to random Schrödinger operators |
| 18.01.02 | Sergej Grosman, Dr. G. Kunert (TU Chemnitz) | An overview of anisotropic mesh generation programs |
| 21.01.02 | Dr. Michael Thoss (TU München) | Dynamical simulation of quantum dissipative systems: Application to ultrafast electron-transfer processes in solution |
| 23.01.02 | Günther Of | Multipolmethoden für die symmetrische Formulierung von Randintegralgleichungen |
| 30.01.02 | M. Ndawana (TU Chemnitz) | Finite-Size Scaling of the Level Compressibility at the Anderson Transition |
| 01.02.02 | Prof. Schneider, Prof. Brunnett (TU Chemnitz) | Darstellung von Oberflächen und Waveletfunktionen auf Oberflächen für BEM |
| 08.02.02 | Dr. O. Steinbach (TU Chemnitz) | Parallele Galerkin Randelementmethoden |
| 20.02.02 | Prof. Dr. Angus MacKinnon (The Cavendish Laboratory, Cambridge) | The Physics of Micro-Electromechanical Systems |

| Datum | Referent(en) (Einrichtung) | Thema (Bemerkung) |
|----------|---|---|
| 08.03.02 | Dr. G. Kunert (TU Chemnitz) | Gauss, Triangulationen FEM, Historical Roots, Modern Parallel Applications |
| 17.04.02 | G. Stolz | Fractional Moments und Lokalisierung im Kontinuum |
| 23.04.02 | Andreas Borck | Einkoppelung von hochfrequenten Signalen in zweidimensionale Elektronengase |
| 06.05.02 | Vitali Liskevich | On positive solutions of semilinear equations with measurable coefficients in unbounded domains |
| 14.05.02 | Prof. George (INRIA Rocquencourt) | Anisotropic mesh generation and related aspects |
| 22.05.02 | Dr. Erich Runge (MPIPKS Dresden) | Quantum physics of disordered semiconductor nano structures |
| 07.06.02 | Gunar Matthies (Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg) | Numerische Simulation des Verhaltens von Ferrofluiden |
| 11.06.02 | Michael Schreiber (TU Chemnitz) | Quasikristalle-eine neue Form von Festkörpern |
| 14.06.02 | Volodymyr Myrnyy (TU Cottbus) | On optimized libraries in C++ for the linear algebra |
| 14.06.02 | J. Miachel Johnson | The radial basis function approach to scattered data interpolation |
| 21.06.02 | Radu Todor (ETH Zürich) | Sparse FE for Stochastic Elliptic Problems |
| 21.06.02 | Dr. T. Frank (TU Chemnitz) | Parallele Algorithmen für die numerische Simulation dreidimensionaler, disperser Mehrphasenströmungen und deren Anwendung in der Verfahrenstechnik (Habilitation) |
| 21.06.02 | Dr. T. Frank (TU Chemnitz) | Grundlagen der Partikelabscheidung in Massenkraftabscheidern |
| 24.06.02 | Peter Bastian | Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen in porösen Medien |
| 24.06.02 | Olaf Ippisch | Simulation stark gekoppelter Transportprozesse in porösen Medien |
| 03.07.02 | Dr. Rochus Klesse (Uni Köln) | Coulomb drag between Quantum wires |
| 08.07.02 | Prof. C. Schwab (ETH Zürich) | Two-scale regularity and sparse grids for homogenization problems |
| 10.07.02 | Dr. Ludwig Schweitzer (PTB Braunschweig) | Kritische Eigenschaften beim QHE: Frequenz-Skalierung und der Übergang zum Hall Isolator |

| Datum | Referent(en) (Einrichtung) | Thema (Bemerkung) |
|----------|---|--|
| 12.07.02 | Thomas Grund, Dr. G. Kunert (TU Chemnitz) | The SIAM 100 digit challenge - Problems and results |
| 23.09.02 | J. Schöberl (Linz) | Anisotropic mesh generation and mesh refinement with Netgen (FEM Symposium) |
| 23.09.02 | V. Dolejsi (Prague) | An alternative formulation of the anisotropic mesh adaptation method (FEM Symposium) |
| 23.09.02 | L. Formaggia (Milano) | Some anisotropic mesh adaptation strategies for FEM (FEM Symposium) |
| 23.09.02 | Micheletti (Milano) | Some remarks on the stability coefficients on anisotropic meshes with application to the advection-diffusion and Stokes problems (FEM Symposium) |
| 23.09.02 | G. Kunert (Chemnitz) | A posteriori error estimation for the Stokes problem on anisotropic FE discretizations (FEM Symposium) |
| 23.09.02 | T. Apel (Chemnitz) | Stable finite elements for the Stokes problem on anisotropic meshes (FEM Symposium) |
| 23.09.02 | G. Matthies (Magdeburg) | The inf-sup condition for the family of mapped Q_k/P_{k-1}^{disc} finite element pairs, $k \geq 2$ (FEM Symposium) |
| 23.09.02 | G. Lube (Göttingen) | Finite element calculation of incompressible flows using div-stable elements and SUPG-stabilization (FEM Symposium) |
| 23.09.02 | T. Richter (Heidelberg) | Parallel and adaptive finite elements for the Navier-Stokes equation (FEM Symposium) |
| 23.09.02 | V. Heuveline (Heidelberg) | On the numerical simulation of the free fall problem (FEM Symposium) |
| 23.09.02 | M. Bause, F. Radu (Erlangen) | Finite Element Approximation of Variably Saturated Subsurface Flow with Reactive Transport (FEM Symposium) |
| 23.09.02 | M. Braack (Heidelberg) | A posteriori control of modeling errors and discretization errors (FEM Symposium) |
| 23.09.02 | O. Steinbach (Stuttgart) | A robust boundary element method for nearly incompressible linear elasticity (FEM Symposium) |
| 24.09.02 | H. Blum (Dortmund) | A general concept for a posteriori error control for variational inequalities (FEM Symposium) |

| Datum | Referent(en) (Einrichtung) | Thema (Bemerkung) |
|----------|-------------------------------|--|
| 24.09.02 | F. T. Suttmeier (Dortmund) | Error bounds for Finite Element Solutions of Elliptic Variational Inequalities of second kind (FEM Symposium) |
| 24.09.02 | R. Unger (Chemnitz) | Projection methods for contact problems in elasticity (FEM Symposium) |
| 24.09.02 | D. Braess (Bochum) | Cascadic Aspects of Multigrid Methods for Unilateral Problems (FEM Symposium) |
| 24.09.02 | B. Heinrich (Chemnitz) | Nitsche-type mortaring for a singularly perturbed reaction-diffusion problem (FEM Symposium) |
| 24.09.02 | B. Flemisch (Stuttgart) | Coupling scalar and vector potentials on non-matching grids for eddy currents modelling in moving conductors (FEM Symposium) |
| 24.09.02 | B. Lamichhane (Stuttgart) | Higher Order Dual Lagrange Multiplier Spaces for Mortar Finite Element Discretizations (FEM Symposium) |
| 24.09.02 | F. Hülsemann (Erlangen) | Multigrid methods on hierarchical hybrid grids (FEM Symposium) |
| 24.09.02 | J. Kienesberger (Linz) | A Multigrid Preconditioned Solver for Elastoplastic Type Problems (FEM Symposium) |
| 24.09.02 | C. Pester (Chemnitz) | Efficient methods to solve a quadratic operator eigenvalue problem (FEM Symposium) |
| 24.09.02 | M. Maischak (Chemnitz) | Mixed FEM and BEM Coupling for a Linear Transmission Problem with a Signorini Interface (FEM Symposium) |
| 25.09.02 | W. Dahmen (Aachen) | Adaptive Techniques - Complexity and Error Estimates (FEM Symposium) |
| 25.09.02 | H. Harbrecht (Chemnitz) | Wavelet Based Fast Solution of BEM (FEM Symposium) |
| 25.09.02 | R. Stevenson (Utrecht) | Adaptive solution of operator equations using wavelet frames (FEM Symposium) |
| 25.09.02 | S. Beuchler (Chemnitz) | Multi-resolution weighted norm equivalences and applications (FEM Symposium) |
| 25.09.02 | G. Winkler (Chemnitz) | Calculation of Call Prices under Stochastic Volatility (FEM Symposium) |
| 25.09.02 | A. Rababah (Irbid) | High accuracy piecewise approximation for planar curves (FEM Symposium) |

| Datum | Referent(en) (Einrichtung) | Thema (Bemerkung) |
|----------|---|---|
| 25.09.02 | B. Vexler, (Heidelberg) | Adaptive Finite Element Methods for Parameter Identification Problems (FEM Symposium) |
| 18.10.02 | Dr. M. Breuer (Uni Erlangen-Nürnberg) | Large eddy simulation of turbulent flows |
| 30.10.02 | N.I. Stoilova | Wigner Quantum Systems |
| 13.11.02 | H. Ries (Philipps-Universität Marburg) | Thermodynamik von Licht, insbesondere der Erzeugung und Konversion von Strahlung |
| 22.11.02 | Prof. K. Siebert (Uni Augsburg) | Konvergieren adaptive Finite Elemente Methoden? |
| 27.11.02 | Klaus Osterloh (Uni Hannover) | A Novel CFT Approach to Bulk Wave Functions in the Fractional Quantum Hall Effect |
| 06.12.02 | U.-J. Goerke, A. Bucher, R. Kreißig (TU Chemnitz) | Adaptive FEM for Geometrically and Physically Nonlinear Problems in Solid Mechanics (D2) |
| 10.01.03 | S. Seeger (TU Chemnitz) | Numerik von Cumulanten- und Momentengleichungen |
| 17.01.03 | Prof. W. Dörfler (Uni Karlsruhe) | Zur Konvergenz der Adaptiven Finite Elemente Methode |
| 31.01.03 | D. Leguillon (Paris 6) | A criterion for crack initiation at a v-notch |
| 07.02.03 | Prof. M. Kuczma (Zielona Gora, Polen) | Martensitic phase transformations as a variational inequality problem |
| 19.02.03 | Evgueni Tyrtysnikov | Tensor product approximations with band-low-rank for function-related matrices |
| 25.02.03 | Marco Laicini (Universita Milano Bicocca) | Spectroscopic properties of thiophene |
| 09.04.03 | Pavel Exner | Singular Schrödinger operators: strong coupling and geometrically induced spectrum |
| 11.04.03 | Prof. G. Zumbusch (Uni Jena) | Parallel multilevel algorithms |
| 23.04.03 | Dr. Heike Emmerich (Uni Dortmund) | Quantum Dots als Mesoskopische Systeme |
| 25.04.03 | Stefan Achatz (TU München) | Adaptive higher order finite elements over sparse grids for partial differential equations with variable coefficients |
| 30.04.03 | Dr. Alexei Sherman (Univ. of Tartu, Estland) | Resonance peak in neutron scattering of cuprate perovskites |
| 14.05.03 | Dr. Rudolf A. Römer (Univ. of Warwick, Coventry) | A recursive formulation of thermoelectric transport in disordered systems |

| Datum | Referent(en) (Einrichtung) | Thema (Bemerkung) |
|----------|--|---|
| 21.05.03 | Joachim Brand (MPIPKS Dresden) | Vortices in Bose-Einstein condensates |
| 11.6.03 | Richard Klemm (MPIPKS Dresden) | BISCCO C-axis twist Josephsonjunction experiments: the superior phase-sensitive test of orderparameter symmetry |
| 18.6.03 | P. Lipavsky (Academy of Science, Prag) | Collision delay and related phenomena |
| 18.06.03 | H.-D. Tietz (Westfälische Hochschule Zwickau) | Entstehung, Messung und Berechnung von Eigenspannungen |
| 01.07.03 | Luise Blank | Wavelet-Methoden in der Zustandsschätzung |
| 02.07.03 | Dr. Uwe Grimm (The Open University, Milton Keynes) | Kombinatorische Eigenschaften quasiperiodischer Parkettierungen |
| 16.07.03 | G. Rünger (TU Chemnitz) | Parallele Programmiermodelle (CHIC-Symposium) |
| 18.07.03 | Prof. R. Duduchava (Tbilisi/Saarbrücken) | On the spatially homogeneous Boltzmann equation |
| 22.09.03 | U. Langer (Linz) | Sparse Algebraic Multigrid Preconditioners and their use in Boundary and Finite Element DD Methods (FEM Symposium) |
| 22.09.03 | M. Jung (Dresden) | Fast solvers for the first biharmonic boundary value problem (FEM Symposium) |
| 22.09.03 | B. Khoromskij (Leipzig) | Hierarchical Tensor-Product Approximation to Elliptic and Parabolic Solution Operators in Higher Dimensions (FEM Symposium) |
| 22.09.03 | S. Beuchler (Chemnitz) | A DD-preconditioner for p-fem (FEM Symposium) |
| 22.09.03 | J. Kruis (Prague) | Combination of Domain Decomposition Methods with Sparse Direct Solver (FEM Symposium) |
| 22.09.03 | M. Mair (Stuttgart) | Overlapping domain decomposition methods for domains with holes based on complementary decomposition (FEM Symposium) |
| 22.09.03 | M. Dobrowolski (Würzburg) | The Ladyzhenskaja constant in the numerical analysis of the Stokes equations (FEM Symposium) |
| 22.09.03 | V. Dolejsi (Prague) | The discontinuous Galerkin method for the numerical solution of the compressible flows (FEM Symposium) |

| Datum | Referent(en) (Einrichtung) | Thema (Bemerkung) |
|----------|-------------------------------|--|
| 22.09.03 | M. Braack (Heidelberg) | Numerical parameter estimation for chemical models in multidimensional reactive flows (FEM Symposium) |
| 22.09.03 | P. Skrzypacz (Magdeburg) | Superconvergence of a 3d finite element method for stationary stokes and navier-stokes problems (FEM Symposium) |
| 22.09.03 | J. Novak (Liberec) | Influence of Piezoelectricity on Resonance Frequencies of Piezoelectric Resonators (FEM Symposium) |
| 22.09.03 | B. Nkemzi (Trieste) | The Fourier-finite-element method for the Lamé equations in nonsmooth axisymmetric domains (FEM Symposium) |
| 22.09.03 | R. Huang (Shanghai) | Finite Element of elasticity with couple-stress using the analogy between plane couple-stress and Reissner/Mindlin plate (FEM Symposium) |
| 23.09.03 | R. Duran (Buenos Aires) | Error estimates for an average interpolation on anisotropic Q_1 elements (FEM Symposium) |
| 23.09.03 | M. Picasso (Lausanne) | Anisotropic, adaptive finite elements for elliptic and parabolic problems (FEM Symposium) |
| 23.09.03 | S. Grosman (Chemnitz) | The robustness of the hierarchical a posteriori error estimator for reaction-diffusion equation on anisotropic meshes (FEM Symposium) |
| 23.09.03 | R. Rodriguez (Concepcion) | A posteriori error estimates for the finite element approximation of eigenvalues problems (FEM Symposium) |
| 23.09.03 | C. Pester (Chemnitz) | A posteriori error estimation on spherical domains (FEM Symposium) |
| 23.09.03 | M. Grajewski (Dortmund) | Numerical analysis and a-posteriori error control for a new nonconforming quadrilateral linear finite element (FEM Symposium) |
| 23.09.03 | P. Jimack (Leeds) | Adaptive finite element solution of time-dependent PDEs based upon moving meshes (FEM Symposium) |
| 23.09.03 | T. Hohage (Göttingen) | New methods for the construction of transparent boundary conditions (FEM Symposium) |

| Datum | Referent(en) (Einrichtung) | Thema (Bemerkung) |
|----------|----------------------------------|--|
| 23.09.03 | T. Todorov (Gabrovo) | A Study of the Constant in the Strengthened Cauchy Inequality for 3D Elasticity Problems (FEM Symposium) |
| 23.09.03 | U. Risch (Magdeburg) | Superconvergence of a non-conforming low order finite element (FEM Symposium) |
| 24.09.03 | M. Melenk (Leipzig) | Boundary concentrated FEM (FEM Symposium) |
| 24.09.03 | G. Matthies (Magdeburg) | A priori error estimates of higher order finite element methods for an equation of mean curvature type (FEM Symposium) |
| 24.09.03 | M. Maischak (Hannover) | hp-Version of BEM for Signorini problems in 2 and 3 dimensions (FEM Symposium) |
| 24.09.03 | O. Steinbach (Stuttgart) | Boundary Element Tearing and Interconnecting Methods (FEM Symposium) |
| 24.09.03 | Z. Dostal (Ostrava) | Scalable algorithms for variational inequalities and contact problems (FEM Symposium) |
| 24.09.03 | O. Sander (Berlin) | Fast Solving of Contact Problems on Complicated Geometries (FEM Symposium) |
| 24.09.03 | S. Hübner (Stuttgart) | A primal-dual active set strategy for nonlinear multibody contact problems (FEM Symposium) |
| 04.11.03 | Nils Wagner | Stabilität parameterabhängiger Polynommatrizen |
| 07.11.03 | Prof. G. Radons (TU Chemnitz) | Lyapunov Instability of Lennard-Jones Fluids (SFB C8) |
| 12.11.03 | Ivo Haering (MPIPKS Dresden) | Streuung von Atomen an Bose-Einstein Kondensaten |
| 14.11.03 | Dr. Thomas Apel (TU Chemnitz) | Anisotrope finite Elemente: (Zwischenbericht aus den Projekten A3 und A11) |
| 14.11.03 | Beate Jung | The Fourier Singular Complement Method for elliptic Boundary value problems in axisymmetric domains it edges |
| 26.11.03 | R. Klages (MPIPKS Dresden) | Chaotic diffusion in disordered dynamical systems |
| 03.12.03 | Beate Paulus (MPIPKS Dresden) | Ab-initio correlation treatment of solids and its application to mercury |
| 04.12.03 | Arnd Meyer (TU Chemnitz) | Moderne numerische Verfahren zur Lösung partieller Differentialgleichungen (Lehrstuhlseminar in Inst. f. Physik) |

| Datum | Referent(en) (Einrichtung) | Thema (Bemerkung) |
|----------|---|---|
| 05.12.03 | G. Brunnett, U. Kähler, R. Schneider, M. Randri- anarivony | Ansätze zur schnellen Lösung von Randin- tegralgleichungen auf realistischen Geo- metrien |
| 15.12.03 | M.A. Wimmer und U.-J. Görke (Rush Univ. Medical Center Chicago/ TU Chem- nitz) | Mechanobiologische Aspekte des Tissue Engineering von Gelenkknorpel |
| 09.12.03 | Simon Chandler-Wilde | A Generalized Collectively Compact Oper- ator Theory and Applications to Integral Equation |
| 10.12.03 | Amit Chattopadhyay (HMI Berlin) | A biological model of flagellar motion |
| 12.12.03 | Frank Rabold (TU Frei- berg), Prof. A. Meyer (TU Chemnitz) | Finite-Elemente-Simulation von Riss- wachstum mittels moderner adaptiv- iterativer Lösungstechniken |
| 18.12.03 | Robert Plato | Regularisierung schwach singulärer Volterra-Integr.-Gleichungen erster Art mittels gebr. Mehrschrittverfahren |
| 06.01.04 | Eberhard Bänsch | Finite element methods for curvature dri- ven problems |
| 09.01.04 | | Tag des SFB |
| 16.01.04 | Markus Melenk | Randkonzentrierte FEM (Ergebnisse und Ausblick zu A13) |
| 21.01.04 | Dr. Serguei Varlamov (BTU Cottbus) | Incommensurate charge-density wave scattering in high-Tc cuprates |
| 23.01.04 | Arnd Rösch | FEM bei Optimalsteueraufgaben |
| 16.02.04 | Alexandru Nemnes (BTU Cottbus) | Nonoscale Transistors in the Landauer- Büttiker Formalism |
| 05.04.04 | S. Tarafdar (Jadavpur Uni- versity, Indien) | Viscous fingering (Workshop Relaxation Phenomena) |
| 05.04.04 | K. H. Hoffmann (TU Chemnitz) | Relaxation Phenomena in Spin Glasses (Workshop Relaxation Phenomena) |
| 05.04.04 | A. Fischer (TU Chemnitz) | Transients in Anomalous Diffusion (Work- shop Relaxation Phenomena) |
| 05.04.04 | F. Heilmann (TU Chemnitz) | Finding Minima in Complex State Spaces (Workshop Relaxation Phenomena) |
| 05.04.04 | S. Seeger (TU Chemnitz) | Random Walks on Random Fractals (Workshop Relaxation Phenomena) |
| 05.04.04 | A. Franz (Philips Research) | Work in Progress (Workshop Relaxation Phenomena) |
| 06.04.04 | Roland Duduchava (A Ra- zumadze Math. Inst. Geor- gien) | Boltzmann equations without cutoff |

| Datum | Referent(en) (Einrichtung) | Thema (Bemerkung) |
|----------|--|---|
| 23.04.04 | Bernhard Mehlig (Chalmers University Göteborg) | Clustering of inertial particles in turbulent aerosols |
| 28.04.04 | Prof. Ingrid Rotter (MPIPKS Dresden) | Transmission of double quantum dots |
| 05.05.04 | JProf. Dr. Alexander Auer (TU Chemnitz) | Future Perspectives in Accurate Electronic Structure Calculations |

3.1.2 Übersicht über Workshops und Tagungen

Im Berichtszeitraum wurden vom Sonderforschungsbereich die folgenden Workshops und Tagungen ausgerichtet. Ihr Inhalt und die Teilnehmer sind in den entsprechenden Tagungsmaterialien und in den Webseiten

(erreichbar über: <http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/seminar>) dokumentiert.

1. 19.–21.09.2001, Chemnitzer FEM-Symposium 2001
2. 19.10.01, 2. Kolloquium Wissenschaftliches Rechnen in Sachsen
3. 23.–25.09.2002, Chemnitzer FEM-Symposium 2002
4. 20.07.–03.08.2003, Workshop on Energy Landscapes: Structure, Dynamics and Optimization Algorithms, Telluride Science Research Center, Telluride.
5. 22.–24.09.2003, Chemnitzer FEM-Symposium 2003
6. 05.–06.04.2004, Workshop „Relaxation Phenomena in Complex Systems“, Institut für Physik

3.1.3 Gästeprogramm, wissenschaftliche Kontakte

3.1.3.1 Gastwissenschaftler

Gäste 2001 (noch nicht im Bericht für 1999–2001 enthalten):

Prof. Dr. Vadim G. Korneev, University of Westminster Harrow, 04.05.-13.05.2001

Kob, Walter, Frankreich, 09.05.2001

Dr. Herbert Baaser, TU Darmstadt, 11.05.-18.05.2001

Xi-Wen Guan, Universidade Feral do Rio Grande do Due, Brasilien, 15.06.-14.07.2001

Tayebi, Lakhdar, Marokko, 30.07.-30.11.2001

auswärtige Teilnehmer des FEM Symposiums vom 19.–21.09.2001:

Prof. Martin Berzins, Leeds, UK

Dr. Jan Brandts, Utrecht, Niederlande

Dr. Emanuel Creuse, Valenciennes, Frankreich

Dr. Vit Dolejsi, Prag, Tschechien

Prof. Miroslav Feistauer, Prag, Tschechien

Dr. Alexander Georgievich, Novosibirsk, Russland

Dr. Gundolf Haase, Linz, Österreich

DM Ralf Hartmann, Universität Heidelberg

Dr. Frank Hülsemann, Universität Erlangen–Nürnberg

Dr. Peter Jimack, Universität Leeds, Großbritannien

Dr. Volker John, Universität Magdeburg

Doz. Dr. Michael Jung, TU Dresden

Dr. Guido Kanschat, Universität Heidelberg

Dr. Peter Knobloch, Prag, Tschechien

Prof. Ulrich Langer, Linz, Österreich

Dr. Markus Melenk, MPI-Leipzig

Prof. Luc Paquet, Valenciennes, Frankreich

Prof. Ernst Rank, München

Dr. Stefan Reitzinger, Linz, Österreich

Prof. Hans-Georg Roos, TU Dresden

Thomas Schnitzer, Universität Freiburg

Dr. Joachim Schöberl, Universität Linz, Österreich

Prof. David Silvester, Manchester, UK

Dr. Olaf Steinbach, Universität Stuttgart

Prof. Rolf Stenberg, Helsinki, Finnland
Prof. Gisbert Stoyan, Budapest, Ungarn
Mr. Saqib Tufail, Sialkot, Pakistan
MSc Helena Zarin, TU Dresden

Yapage, Nihal, University Ruhuna in Mataru, Sri Lanka, 05.10.-15.12.2001

Prof. Ped Janssen, Universität Nijmegen, Niederlande, 15.10.-18.10.2001

Prof. Thomas Rauber, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg,
Okt. 2001 - Jan. 2002

Prof. Sergei Pereverzev, WIAS, 05.11.-06.12.2001

Prof. Alexandre Demidov, Lomonossow-Universität Moskau, 07.11.-10.11.2001

Prof. Mihai Zelik, Lomonossow-Universität, 07.11.-10.11.2001

Prof. Patrick Ciarlet, ENSTA Paris, 11.11.-16.11.2001

Prof. Periverzev, 26.11.-23.12.2001

Hassan Satori, Marokko, 30.11.2001-28.02.2002

Prof. Martin Costabel, IRMAR Rennes, Frankreich, 03.12.-09.12.2001

Prof. D. Banabic, Cluj-Napoca, Rumänien, 05.11.2001

Gäste 2002:

Dr. Alexander Rusakov, Universität für Luft- und Raumfahrt Samara, Russland,
09.03.-08.06.2002

Dr. Herbert Baaser, 18.03.-21.03.2002

Alexander Smuglyakov, Rostov, 29.03.-23.04.2002

Johannes Tausch, 02.04.-30.04.2002

Hans-Jürgen Tausch, SMU Dallas, USA, 02.04.-30.04.2002

Günther Stolz, 15.04.-19.04.2002

Prof. Serge Nicaise, Frankreich, 23.04.-26.04.2002

Tomas Barrios, Universidad de Concepcion, Chile, 02.05.-31.07.2002

Dr. Vitali Liskevich, University Bristol, 06.05.2002

Dr. Günter Suschowk, NIS-Ingenieurgesellschaft mbH, 08.05.-09.05.02

Alexei Sherman, University of Dorto, 10.05.-09.08.2002, 01.04.-30.06.2003

Paul-Luis George, 13.05.-16.05.2002

Prof. H. Bergander, Dresden, 24.05.2002

Samba Siva Rao Chinnameetty, Battcpala Engeniering College, Indien,
01.06.-31.08.2002

Michael D. Weldom, University of Victoria, Canada, 03.06.-02.08.2002

Gunnar Matthis, 06.06.-07.06.2002

Radu-Alexandru Todor, ETH Zürich, 17.06.-22.06.2002

Prof. Peter Salamon, San Diego State University, USA, 23.06.-02.07.2002

Eleonora Toulouza, University of Athens, Griechenland, 28.06.-27.08.2002

Dr. Inna Plyushachay, Universität Kiev, Ukraine, 02.07.-22.09.2002

Prof. Gabriel Gatica, Universidad de Concepcion, Chile, 12.07.-28.07.2002

Yoram Last, 20.07.2002

Prof. Paolo Sibani, Süddänische Universität Odense, 15.09.-19.09.2002

Sergej Solovyev, 22.09.-24.09.2003

auswärtige Teilnehmer des FEM Symposiums vom 23.–25.09.2002:

Dr. Markus Bause, Universität Erlangen

Prof. Heribert Blum, Universität Dortmund

Dr. Malte Braack, Universität Heidelberg

Prof. Dr. Dietrich Braess, Ruhruniversität Bochum

Prof. Dr. Wolfgang Dahmen, RWTH Aachen

Dr. Vit Dolejsi, Prag, Tschechien

MSc Bernd Flemisch, Universität Stuttgart

Prof. Luca Formaggia, Milano, Italien

Dr. Vincent Heuveline, Universität Heidelberg

PhD Frank Hülsemann, Erlangen

Dr. Michael Jung, TU Dresden

DI Johanna Kiensberger, Linz, Österreich

MSc Bishu Prasad Lamichhane, Universität Stuttgart

Dr. Yonhai Li, Beijing, China

Prof. Dr. gert Lube, Göttingen

DM Gunar Matthies, Universität Magdeburg

Dr. Stefano Micheletti, Milano, Italien

Prof. Abedallah Rababah, Irbid, Jordan

DM Florian Adrian Radu, Universität Erlangen

Dr. Thomas Richter, Universität Erlangen

Dr. Joachim Schöberl, Universität Linz, Österreich

Dr. Olaf Steinbach, Universität Stuttgart

Dr. Rob Stevenson, Utrecht, Niederlande

Dr. habil Franz-Theo Suttmeier, Universität Dortmund

DM Boris Vexler, Universität Heidelberg

Dr. Jordan A. Denev, Universität Sofia, 15.10.-15.12.2002

Prof. T. D. Palev, Institute of Nuclear Research and Nuclear Energy, Bulgarien,
05.10.-04.11.2002

Prof. Dr. Harald Ries, Philipps-Universität Marburg, 13.11.-14.11.02

Prof. Yuri Karlovich, Universidad Autonoma del Estado de Morelos, Mexico,
14.11.-26.11.2002

Boniface Nkemzi, Univeristy of Buea, Kamerun, 24.11.-27.11.2002

Gäste 2003:

Dominique Leguillon, Paris 6, 29.01.-01.02.2003

Prof. Serguei Nepomnyaschik, Novosibirsk, 05.02.-16.02.2003, 25.07.-02.08.2003

M. Laicini, Politecnico di Milano, 16.02.-27.02.2003

Iulia Tregubleac, Universität Bukarest, Rumänien, 01.03.-30.06.03

Prof. Christopher Essex, University of Western Ontario, 17.03.-22.03.2003

Prof. Pavel Exner, Academy of Sciences Prag, 09.04.-10.04.2003

Prof. Peter Salamon, San Diego State University, USA, 19.05.-23.05.2003

Dr. Dirk Hundertmark, Urbana Champaijan, 20.05.-22.05.2003

Prof. H.-D. Tietz, Zwickau, 18.06.2003

Prof. G. Stolz, University of Alabama, 25.06.-11.07.2003

Victor Cerovski, Riverside, USA, 01.07.-30.09.2003

Dr. Ivan Veselic, California Institute of Technology, 15.07.-23.07.2003

Edem Kwabla Sosu, Universität Knust Accra, Ghana, 01.08.-30.09.2003

Khaoula Sellami, Univerisät ENITT Tunis, 01.08.-30.09.2003

Prof. Ingo Müller, Technische Universität Berlin, 09.09.2003

auswärtige Teilnehmer des FEM Symposiums vom 22.–24.09.2003:

Florian Bachinger, Universität Linz, Österreich
Dr. Almedin Becirovic, Universität Linz, Österreich
Dr. Malte Braack, Uni Heidelberg
Dr. Manfred Dobrowolski, Würzburg
Dr. Vit Dolejsi, Prag, Tschechien
Prof. Zdenek Dostal, Ostrave, Tschechien
DM Matthias Grajewski, Dortmund
DM Stefan Hübener, Stuttgart
Dr. Torsten Hohage, Göttingen
Dr. Ruoyu Huang, Shanghai, China
Dr. Peter Jimack, Universität Leeds, Großbritannien
Dr. Michael Jung, TU Dresden
Dr. Beate Jung, Paris Cedex 15, Frankreich
Dr. Boris Khoromskij, MPI-Leipzig
Drs. Yaroslav Kondratyuk, Utrecht
Dr. Rolf Krause, Berlin
Dr. Jaroslav Kruis, Karls-Universität Prag, Tschechien
Prof. Dr. Ulrich Langer, Universität Linz, Österreich
DM Michael Mair, Uni Stuttgart
PD Dr. Matthias Maischak, Universität Hannover
Dr. Markus Melenk, MPI-Leipzig
DM Volodymyr Myrnyy, TU Cottbus
Dr. Beniface Nkemize, Trieste, Italien
MSc Josef Novak, Liberec, Tschechien
Dr. Marco Picasso, Lausanne, Schweiz
Dr. Uwe Risch, Universität Magdeburg
Dr. Rudolfo Rodriguez, Concepcion, Chile
DInf Oliver Sander, FU Berlin
Dr. Joachim Schöberl, Universität Linz, Österreich
Dr. Olaf Steinbach, Universität Stuttgart
DM Marc Ulrich Stiller, Universität München
Dr. Todor Todorov, Gabrovo, Bulgarien
Ing Richard Vondracek, Prag, Tschechien
Dr. Sabine Zaglmayr, Universität Linz, Österreich

Dr. Todor Todorov, Technical University Gabrovo, Bulgarien, 24.09.-29.09.2003

Ricardo Duran, 24.09.-27.09.2003

Rodolfo Rodriguez, 24.09.-27.09.2003

Dr. Arnulf Möbius, IFW Dresden, 29.09.-03.10.2003

Dr. Christian Schön, MPI Stuttgart, 29.09.-03.10.2003

Dr. M.A. Wimmer, Chicago, USA 14.-16.12.2003

Gäste 2004:

Brojen Singh, Indien 15.01.-31.05.2004

Jeffrey Schenker, 02.02.-07.02.2004

Prof. Dietmar Hoemberg, Weierstraß-Institut Berlin, 12.02.-13.02.2004

Prof. Sujata Tarafdar, Jadavpur University, Indien, 02.03.-07.03.04

Dr. Astrid Franz, Philips Research Hamburg, 05.03.-06.03.04

Prof. Roland Duduchava, Razumadze Mathematical Institute, Georgien,
04.04.-07.04.2004

3.1.3.2 Eigene Forschungsaufenthalte im Berichtszeitraum

Th. Apel, MPI Leipzig, 24.–26. Januar 2002

Th. Apel, Mini-Workshop Preconditioning in Eigenvalue Computations“, Oberwolfach, 3.–9. März 2002, Vortrag: Efficient computation of eigenpairs of a quadratic operator eigenvalue problem.

Th. Apel, GAMM-Jahrestagung, Augsburg, 24.–28. März 2002, Vortrag: Computation of 3D vertex singularities for linear elasticity.

Th. Apel, Vertretungsprofessur an der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, 4/2002–8/2002

Th. Apel, Universität Magdeburg, 4. Juni 2002, Vortrag: Anisotrope finite Elemente: Resultate und Herausforderungen.

Th. Apel, Universität Rostock, 5. Juli 2002, Vortrag: Anisotrope finite Elemente: Resultate und Herausforderungen.

Th. Apel, Universität Magdeburg, 9. Juli 2002, Vortrag: How to compute 3D vertex singularities?

Th. Apel, Universität Valenciennes (Frankreich), 25.–29. August 2002

Th. Apel, DMV-Tagung Halle, 16.–20. September 2002, Vortrag: Computation of 3D vertex singularities for linear elasticity.

Th. Apel, Universität der Bundeswehr, München, 1. Oktober 2002, Vortrag: Anisotrope finite Elemente: Resultate und Herausforderungen für die numerische Analysis.

Th. Apel, TU Berlin, 26. Oktober 2002, Vortrag: Anisotrope finite Elemente: Resultate und Herausforderungen für die numerische Analysis.

Th. Apel, Mini-Workshop Analytical and Numerical Treatment of Singularities in PDE“, Oberwolfach, 3.–9. November 2002, Vortrag: Anisotropic finite elements: results and challenges.

Th. Apel, Universität Konstanz, 19.–20. November 2002, Vortrag: Anisotrope finite Elemente: Resultate und Herausforderungen.

Th. Apel: Universität Kassel, 25.–26. November 2002, Vortrag: Anisotrope finite Elemente: Resultate und Herausforderungen.

Th. Apel, Mathematisches Institut der Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik, 28.–30. November 2002, Vortrag: Which Stokes elements can be used on anisotropic finite element meshes?

Th. Apel, TU Braunschweig, 21. Januar 2003, Vortrag: Anisotrope finite Elemente: Resultate und Herausforderungen.

Th. Apel, MPI Leipzig, 24.–25. Januar 2003

Th. Apel, Universität der Bundeswehr München, 16.–17. April 2003, Vortrag: Berechnung der Singularitäten an Riss-Spitzen bei spröden elastischen Materialien.

Th. Apel, TU Berlin, 24. April 2003, Vortrag: Berechnung der Singularitäten an Riss-Spitzen bei spröden elastischen Materialien.

Th. Apel, Universität Stuttgart, 15.–16. Mai 2003, Vortrag: Anisotrope finite Elemente: Resultate und Herausforderungen.

Th. Apel, Universität Zielona Gora, 30. Mai 2003, Vortrag: Computation of 3D vertex singularities for linear elasticity.

Th. Apel, MAFELAP, University of West London, Uxbridge, 20.–25. Juni 2003, Vortrag: Stable finite elements for the Stokes problem on anisotropic meshes.

Th. Apel, ENUMATH, Prag, 17.–22. August 2003, Vortrag: Stable finite elements for the Stokes problem on anisotropic meshes.

Th. Apel, GAMM-Seminar, MPI Leipzig, 25.–27. August 2003

Th. Apel, 303. WE-Heraeus-Seminar Adaptivity in Finite Element Analysis: Models, Meshes and Polynomial Order, Bad Honnef, 7.–10. September 2003, Vortrag: h-adaptivity in the context of anisotropic meshes.

S. Beuchler, Südostdeutsches Kolloquium zur Numerischen Mathematik, Leipzig, 20.4.2001

S. Beuchler, 9.-20.7.2001 Université Montreal: Vortrag: Modern Methods in Scientific Computing and Applications.

S. Beuchler, GAMM-Seminar, Leipzig, 24.-26.1.2002, Vortrag: Multi-grid solver for the p-Version of the FEM .

S. Beuchler, WiR Sachsen, Freiberg, 24.6.2002

S. Beuchler, Sommerschule an der ETH Zürich, 09.-13.09.2002, Vortrag: FEM for PDEs with Multiple Scales.

S. Beuchler, Ehrenfriedersdorf, FEM Symposium 2002, Ehrenfriedersdorf, 23.-25.9.2002, Vortrag: Multiresolution weighted norm equivalences and applications.

S. Beuchler, Universität Linz, 19.-22.3.03, Vortrag: Multi-level solver for the p-Version of the FEM.

S. Beuchler, GAMM-Jahrestagung 2003, Abano Terme, 23.-27.3.2003, Vortrag: Multi-grid solver for the p-Version of the FEM.

S. Beuchler, Südostdeutsches Kolloquium zur Numerischen Mathematik, Ilmenau, 9.5.2003

S. Beuchler, 15th International Conference on Domain Decomposition Methods, Berlin, 21.-23.7.2003, Vortrag: A Dirichlet-Dirichlet DD-preconditioner for p-fem.

S. Beuchler, GAMM-Seminar, Leipzig, 26.8.03, Vortrag: Multiresolution weighted norm equivalences and applications.

S. Beuchler, FEM Symposium 2003, Ehrenfriedersdorf, 22.-24.9.03, Vortrag: A DD-preconditioner for p-fem.

G. Brunnett, Dagstuhl-Seminar on Geometric Modelling, IBFI Schloss Dagstuhl, Mai 2002, Vortrag: Reconstruction from contours–Boissonnat's method revisited.

G. Brunnett, Cyberworlds 2002, Tokyo, November 2002, Vortrag: Towards Automatic Segmentation in Reverse Engineering.

G. Brunnett, Department LiSI, Universität Politecnica de Catalunya, Spain, 23.4.2003, Vortrag: Polyhedral Reconstruction of Digitized 3D Objects.

G. Brunnett, Department LiSI, Universität Politecnica de Catalunya, Spain, 24.4.2003, Vortrag: Direct Segmentation of Algebraic Models in Reverse Engineering.

A. Bucher, U.-J. Görke, I. Kadachevitch, R. Kreißig, GAMM-Jahrestagung, Augsburg, 25.-28.03.2002, Vorträge:

- Ein Materialmodell für große elastisch-plastische Verzerrungen unter Berücksichtigung einer Substruktur
- Parameteridentifikation bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen
- The application of a multisurface model with kinematical links to the description of elastic-plastic cyclic torsion

A. Bucher, U.-J. Görke, R. Kreißig, Tenth International Symposium on Plasticity and Its Current Applications, PLASTICITY'03, Quebec City, Canada, 07.-11.07.2003 Vortrag: An Efficient Algorithm for the Integration of the Initial Value Problem in Anisotropic Finite Elasto-Plasticity Considering a Substructure

A. Bucher, M. Lindner, U.-J. Görke, S. Panhans, R. Kreißig, GAMM-Jahrestagung, Dresden, 21.-27.03.2004, Vorträge:

- Ein spezieller Übertragungsalgorithmus bei nichtlinearer adaptiver FEM
- Eine inverse Methode zur Identifikation der plastischen Orthotropie im Anfangszustand
- Modellierung zyklischer Verfestigung bei großen Verzerrungen mit einem Substrukturmodell
- Zur Ausrichtung der Fließfläche beim Wechsel der Belastungsrichtung

A. Bucher, R. Kreißig, 7. Workshop „Simulation in der Umformtechnik: Anisotropie in der Blech- und Kaltmassivumformung“, 25.03.2004, Vortrag: Ein Materialmodell mit Substruktur zur Beschreibung der plastischen Anisotropie.

P. Cain, 12th Int. Winterschool New Developments in Solid State Physics, Mauterndorf, Österreich, 25.02.-01.03.2002, Poster: Energy level spacing distribution at the quantum Hall transition.

P. Cain, Spring Meeting German Physical Society, Regensburg, 08.-12.03.2004, Vortrag: Renormalizing into the mesoscopic quantum Hall insulator.

V. Cerovski, Spring Meeting German Physical Society, Regensburg, 08.-12.03.2004, Vortrag: Spectral properties and anomalous diffusion in octonacci quasicrystals.

A. Fischer, Conference on Modern Developments in Thermodynamics, Il Ciocco (Italien), 11.-16.05.03, Poster: Endoreversible Models and Internal Combustion Engines.

A. Fischer, Advanced School on New Perspectives in Thermodynamics, Udine (Italien), 27.-31.10.03

A. Fischer, Workshop on New Perspectives in Thermodynamics, Venedig (Italien), 01.-05.11.03, Vortrag: Endoreversible Engine Models.

S. Köstlmeier-Gemming, Symposium SFB 294: „Molecules in Interaction with Interfaces: Structure, Relaxation and Transport Processes at Interfaces with Various Topologies and Properties“, Leipzig, 12.-14.09.2001, Vortrag: Electron Transfer Patterns at Interfaces.

S. Gemming, MRS 2002 Spring Meeting, San Francisco (USA), 01.-05.04.2002, Vortrag: Theoretical investigation of impurities and vacancies at nanostructured perovskite grain boundaries.

S. Gemming, Euroconference on Structure and Composition of Interfaces in Solids, Kloster Irsee, 18.-23.08.2002, Vortrag: The Influence of Defects on the 3(111) Boundary in Strontium Titanate.

S. Gemming / Santa Barbara (USA) / (2002) 3 Wochen

S. Gemming, Euroconference on Moving Interfaces in Solids, Kloster Irsee, 10.-15.08.2003, Vortrag: Phase Transformations at the Titanium-Silicon Boundary.

S. Gemming, Physik-Kolloquium, Chouaib Doukkali University El-Jadida, Marokko, 24.10.2003, Vortrag: Phase Transformations at the Silicon-Titanium Interface.

U.-J. Görke, Rush University Medical Center Chicago, USA, 22.-27.11.2003, Vortrag:(mit M.A. Wimmer, Chicago): Tribological and Numerical Tools to Engineer and Study Articular Cartilage.

U.-J. Görke, Kolloquium des Instituts für Mathematik, TU Clausthal-Zellerfeld, 12.09.2002 Vortrag: Anwendung der FEM zur Identifikation von Materialparametern bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen als nichtlineares Optimierungsproblem.

H. Harbrecht, Internal Mini-Workshop of the IHP-Network Breaking Complexity: Shape Optimization and Multiscale Methods, Bonn, Germany, Juli 2003, Vortrag: Shape optimization using wavelet BEM.

H. Harbrecht, Workshop on Fast Boundary Element Methods in Industrial Applications, Hirschegg, Österreich, Oktober 2003, Vortrag: Shape optimization using wavelet BEM.

J. Hippold, 10th EuroPVM/MPI, Venedig, Italien, 29.9.-2.10.2003, Vortrag: A Communication API for Implementing Irregular Algorithms on Clusters of SMPs.

J. Hippold, Dagstuhl Seminar, Dagstuhl, Deutschland, 18.-23.5.2003, Vortrag: Task Pool Teams for Implementing Irregular Algorithms on Clusters of SMPs.

K. H. Hoffmann, Relaxation Processes in Complex Systems, San Diego (USA), 10.-17.01.2002

K. H. Hoffmann, UNESCO Thermodynamics Conference, Udine (Italien), 15.-20.02.2002, Vortrag: Thermodynamics, Optimization and Information Theory.

K. H. Hoffmann, Deutsch-Vietnamesischer Workshop, Hue (Vietnam), 23.02.-04.03.2002, Vortrag: Slow Relaxation Dynamics in Spin Glasses.

K. H. Hoffmann, Complex Systems Workshop, Madrid (Spanien), 14.-15.03.2002, Vortrag: Information Theory and Optimization Strategies.

K. H. Hoffmann, Inst. f. Physik, Augsburg, 13.05.2002, Vortrag: Quantentheorie und Thermodynamik.

K. H. Hoffmann, Inst. f. Physik, Kalkutta (Indien), 02.-04.01.2003, Vortrag: Fractional Diffusion and Entropy Production.

K. H. Hoffmann, Conference on Modern Developements in Thermodynamics, Il Ciocco (Italien), 11.-16.05.2003, Poster: Endoreversible Models and Internal Combustion Engines.

K. H. Hoffmann, Fischbach, 20.-22.07.2003, Vortrag: Einiges über diskrete Systeme.

K. H. Hoffmann, Workshop on Energy Landscapes: Structure, Dynamics and Optimization Algorithms, Telluride (USA), 20.07.-03.08.2003, Vortrag: Spin Glass Relaxation Dynamics.

K. H. Hoffmann, Wadern, 14.-19.09.2003, Vortrag: Optimizing Stochastic Optimization Schemes.

K. H. Hoffmann, Advanced School on New Perspectives in Thermodynamics, Udine (Italien), 27.-31.10.2003, Vortrag: Statistical mechanical optimization.

K. H. Hoffmann, Workshop on New Perspectives in Thermodynamics, Venedig (Italien), 01.-05.11.2003, Vortrag: Anomalous Diffusion and Entropy Production.

K. H. Hoffmann, Mexiko (Mexiko), 20.-31.01.2004, Vortrag: Endoreversible Thermodynamics.

K. H. Hoffmann, Hyke-Workshop on Numerical and Asymptotic Methods for Kinetic Equations, Saarbrücken, 23.-25.02.2004

M. Jung, Fachbereich Mathematik/Informatik, Universität Gesamthochschule Kassel, 05.03.2002 Vortrag: Effiziente Finite-Elemente-Simulationen physikalischer und technischer Prozesse.

M. Jung, Institut für Numerische Mathematik, Johannes Kepler Universität Linz, Österreich, 25.10.2002, Vortrag: Experimente mit Lösern für das erste biharmonische Randwertproblem.

M. Jung, Oberseminar Analysis und Angewandte Mathematik, Fachbereich 17 Mathematik/Informatik, Universität Kassel, 07.07.2003 Vortrag: Schnelle Löser für das erste biharmonische Randwertproblem.

M. Jung, ParCo2003, International Conference on Parallel Computing, Dresden, 2.-5.9.2003, Vortrag: Fast parallel solvers for fourth-order boundary value problems.

M. Jung, Deutsch-Tschechischer Workshop Numerical Analysis 2004, Bad Gottleuba, 7.-8.5.2004, Vortrag: Fast solvers for the first biharmonic problem.

W. Just, Dynamics Days Europe 2001, Dresden, 05-08.2001, Vortrag: Stochastic modelling: replacing fast degrees of freedom by noise.

W. Just, International Workshop and Seminar on Control, Communication, and Synchronization in Chaotic Dynamical Systems, 11.-16.11.2001, Vortrag: Control of chaos by time delayed feedback: theory and applications.

W. Just, International Workshop and Seminar on Microscopic Chaos and Transport in Many-Particle Systems, 12.-17.8.2002, Vortrag: Equilibrium Phase Transitions in Coupled Map Lattices: A Pedestrian Approach.

W. Just, Frühjahrstagung des Arbeitskreises Festkörperphysik (AKF) der DPG, Dresden 24.-28.03.2003, Hauptvortrag: Control of chaos by time-delayed feedback: a survey of theoretical and experimental aspects.

W. Just, Trends in Pattern Formation: From Amplitude Equations to Applications, Dresden, 25.-29.8.2003, Vortrag: Control of chaos by time-delayed feedback.

W. Just, 01.-30.9. 2002, Institut fuer Theoretische Physik (Prof. Schöll), Technische Universität Berlin

I. Kadachevitch, International Conference of Temperature-Fatigue Interaction, Paris, Frankreich, 29.-31.03.2001, Vortrag: The temperature hardening effects description

- I. Kadachevitch, A. Bucher, U.-J. Görke, R. Kreißig, Workshop des Graduiertenkollegs „Kontinuumsmechanik inelastischer Festkörper“, Rabenau, 01.-02.10.2001, Vortrag:(Kadachevitch): Erweiterungen der Mehrflächentheorie mit kinematischen Bindungen einschließlich der Parameterbestimmung
- U. Kähler, Südostdeutsches Kolloquium zur numerischen Mathematik, Ilmenau, Mai 2003, Vortrag: Waveletbasierte Matrixkompression für Randintegralgleichung auf komplizierten Oberflächen.
- U. Kähler, Workshop on fast boundary element methods in industrial, Applications, Hirschegg, Österreich, Oktober 2003, Vortrag: Wavelet based matrix compression for boundary integral equations on complex geometries.
- U. Kähler, Workshop on Fast Boundary Element Methods in Industrial Applications, Hirschegg, Österreich, Oktober 2003, Vortrag: Wavelet BEM on complicated geometries.
- U. Kähler, First Chilean Workshop on Numerical Analysis of Partial, Differential Equations, Concepcion, Chile, Januar 2004, Vortrag: Wavelet based matrix compression for boundary integral equations on complex geometries.
- U. Kähler, Gamm-Jahrestagung 2004, Dresden, März 2004, Vortrag: Wavelet based matrix compression for boundary integral equations on complex geometries.
- S. Klassert, Pasadena, Caltech und UAB, Birmingham/Alabama, 18.-30.03.2002
- S. Klassert, Paris, Univ. Paris Nord, 02.-07.06.2002
- U. Kleinekathöfer, 100. Hauptversammlung der Deutschen Bunsengesellschaft, Stuttgart, 24.-26.05.2001, Vortrag: Theorie des photoinduzierten Elektronentransfers in Betain-30.
- U. Kleinekathöfer, Computational Physics Seminar, Karls-Universität, Prag, 23.11.2001, Vortrag: Dissipative Dynamics in Molecular Systems: Electron and Exciton Transfer.
- U. Kleinekathöfer, DPG-Frühjahrstagung des Arbeitskreises Festkörperphysik, Regensburg, 11.-15.03.2002, Vortrag: Fluorescence depolarization in light-harvesting systems of purple bacteria.
- R. Kreißig, A. Bucher, 7. Workshop Numerische Methoden der Plastomechanik des Instituts für Mechanik der TU Hannover, Neustadt am Rubeberge, 11.-13.06.2001, Vortrag: Parameteridentifikation bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen
- R. Kreißig, Seminar für rechnerunterstützte Mechanik, Universität Karlsruhe, 23.11.2001, Vortrag: Parameteridentifikation elastisch-plastischer Deformationsgesetze durch Anpassung numerischer an experimentell ermittelte Verschiebungsfelder

R. Kreißig, SFB-Conference on „Computational Methods for Inverse Problems“, Strobl, Österreich, 30.08.2002, Vortrag: Parameter identification of elastic-plastic deformation laws analysing inhomogeneous strain states.

R. Kreißig, Mechanik-Kolloquium aus Anlass des 70. Geburtstages von Prof. Korte, Jülich, 29.11.2002, Vortrag: Parameteridentifikation elastisch-plastischer Deformationsgesetze durch Analyse inhomogener Verzerrungszustände.

M. Kuna, 10th International Conference on Fracture ICF10, Honolulu 2001, Vortrag: Simulation of domain switch-toughening in ferroelectric ceramics.

M. Kuna, DVM-Weiterbildungsseminar Anwendung numerischer Methoden in der Bruchmechanik, Freiberg 2002, Vortrag: Einführung in die Finite-Element-Techniken zur Analyse von Rissproblemen bei linear-elastischem Materialverhalten.

M.Kuna, 35. DVM-Tagung AK Bruchvorgänge, Freiburg 2003, Vortrag: Entwicklung und Verifikation eines bruchmechanischen Bewertungssystems für Hochdruck-Ferngasleitungen.

M. Kuna, DVM-Weiterbildungsseminar Grundlagen und Anwendung der Schädigungsmechanik, Köln 2004, Vortrag: Grundlagen der Schädigungsmechanik.

M. Lindner, R. Kreißig, Meeting an der Middle East Technical University, Ankara, Türkei, 14.07.2003, Vortrag: Numerische Methoden der Parameteridentifikation.

M. Lindner, R. Kreißig, Sitzung des Arbeitskreises Grundlagen der Umformtechnik des VDEh, Stuttgart, 10.10.2003, Vortrag: Erfassung der plastischen Anisotropie von Metallen durch Eindringversuche – numerische Auswertung.

A. Meyer, Math. Kolloquium an Univ. des Saarlandes, 15.02.2002, Vortrag: Adaptive Techniken der FEM und Anwendung beim Kontakt-Problem als „adaptive learning algorithm“.

A. Meyer, WiR-Sachsen, 3. Kolloquium Wissenschaftliches Rechnen in Sachsen, Freiberg 24.06.2002

A. Meyer, 6th Int.Conf. on Computational Technology and 3rd Int.Conf. on Engineering Technology, Prag 04.-06.09.2002, Vortrag: Projection techniques embedded in the PCGM for handling hanging nodes and boundary conditions.

A. Meyer, CISC 2002 (Challenges in Scientific Computing) Berlin 02.-05.10.2002, Vortrag: Projection techniques embedded in the PCGM for handling hanging nodes and boundary restrictions.

A. Meyer, Dagstuhl Seminar 03111, Challenges in High Performance Simulations for Science and Engineering, Wadern 09.-14.03.2003

K. Morawetz, Spring Meeting German Physical Society, Regensburg, 08.-12.03.2004, Vortrag: Bernoulli potential in type-I and weak type-II superconductors.

M.L. Ndawana, DPG-Frühjahrstagung des Arbeitskreises Festkörperphysik, Regensburg, 11.-15.03.2002, Vortrag: Finite Size Scaling of the Level Compressibility at the Anderson Transition.

M.L. Ndawana, Imperial College, Bristol (United Kingdom), 12.-22.10.2002, Vortrag: The Anderson Model of Localization with Scale-Free Diagonal Disorder.

S. Panhans, R. Kreißig, Tagung des GAMM-Fachausschusses Materialtheorie, Wittenberg, 22.02.2003, Vortrag: Viskoplastisches Materialmodell mit nichtquadratischer Fließfunktion

S. Panhans, GAMM-Jahrestagung, Abano Terme, Italien, 24.-28.03.2003, Vortrag: Ein viskoplastisches Materialmodell mit nichtquadratischer Fließfunktion

C. Pester, Linz, Dezember 2002, 2 Tage, Vortrag: Efficient methods to solve a quadratic operator eigenvalue problem.

M. Pester, Math. Kolloquium an Univ. des Saarlandes, 14.02.2002, Vortrag: Wissenschaftliches Rechnen auf dem Chemnitzer Linux-Cluster.

M. Pester, WiR Sachsen, 3. Kolloquium Wissenschaftliches Rechnen in Sachsen, Freiberg 24.06.2002

F. Rabold, Seminar der AG-Mechanik, IMFD, TUBA Freiberg, 12.11.2003, Vortrag: Finite-Element-Simulation von Risswachstum mittels moderner adaptiv-iterativer Lösungstechniken.

F. Rabold, 5. Humboldt-Seminar, 21.11.2003, Vortrag: Finite-Element-Simulation von Risswachstum mittels moderner adaptiv-iterativer Lösungstechniken.

F. Rabold, 36 Tagung des DVM-Arbeitskreises Bruchvorgänge, 17.02.2004, Vortrag: Finite-Element-Simulation von Risswachstum mittels effizienter adaptiv-iterativer Solver.

F. Rabold, 18. Sitzung der DVM-AG Mixed-Mode-Probleme, 23.04.2004, Vortrag: Finite-Element-Simulation von Risswachstum mittels effizienter adaptiv-iterativer Solver.

G. Radons, International Workshop and Seminar on Microscopic Chaos and Transport in Many-Particle Systems, 12.-17.8.2002, Vortrag: Anomalous Transport in Disordered Dynamical Systems.

G. Radons, XVI. Winterseminar auf dem Zeinisjoch, 7.-14.03.2004, Vortrag: Lyapunov Modes in Extended Dynamical Systems.

M. Randrianarivony, Fifth International Conference on Curves and Surfaces, Saint-Malo, France, Juni 2002, Vortrag: Multiresolution method for detecting higher order discontinuities from irregular noisy samples.

M. Randrianarivony, Seventh International Fall Workshop on Vision, Modeling and Visualization, Erlangen, November 2002, Vortrag: Approximation by NURBS curves and surfaces with free knots.

M. Randrianarivony, International Conference on Geometric and Graphics, London, Juli 2003, Vortrag: Generating well behaved meshes for parameterised surfaces.

R. Reilein, HPCN Europe 2001, Amsterdam, Niederlande, 25.-27.6.2001, Vortrag: Orthogonal Processor Groups for Message-Passing Programs.

R. Reilein, ACM Symposium on Parallel Algorithms & Architectures (SPAA), Kreta, Griechenland, 04.-06.07.2001, Vortrag: Library Support for Orthogonal Processor Groups.

R. A. Römer / Cambridge (United Kingdom) / (2002) 6 Tage

R. A. Römer, 12th Int. Winterschool New Developments in Solid State Physics, Mauterndorf (Österreich), 25.02.-01.03.2002, P „Finite-Size Scaling of the Level Compressibility at the Anderson Transition.

R. A. Römer, DPG-Frühjahrstagung des Arbeitskreises Festkörperphysik, Regensburg, 11.-15.03.2002, Vortrag: Exponents of the localization lengths in the Anderson model with off-diagonal disorder.

R. A. Römer, APS March Meeting, Indianapolis, USA, 18.-22.03.2002, Vortrag: Finite-Size Scaling of the Level Compressibility at the Anderson Transition.

R. A. Römer / Warwick (United Kingdom) / (2002) 3 Tage

R. A. Römer / Edinburgh (United Kingdom) / (2002) 8 Tage

R. A. Römer, The 23rd International Conference on Low Temperature Physics, Hiroshima (Japan), 20.-27.08.2002, Poster: Energy level spacing distribution at the quantum Hall transition.

G. Rüniger, Kolloquium Mississippi State University, USA, 22.02.2002, Vortrag: Task and Data Parallelism in Scientific Applications.

G. Rüniger, Kolloquium University of Texas at San Antonio, USA, 19.03.2002, Vortrag: Task and Data Parallelism in Scientific Applications.

G. Rüniger, Studieninformationstag der GI „Girls go Informatik: Schnelle Simulationen in den Naturwissenschaften“, Universität Leipzig, Deutschland, 04.05.2002

G. Rüniger, ACM/IEEE Supercomputing Conf. (SC), Baltimore, USA, 16.-22.11.2002, Vortrag: Library Support for Hierarchical Multi-Processor Tasks.

G. Rüniger, 17th Int. Parallel & Distributed Processing Symposium (IPDPS), Nizza, Frankreich, 22.-26.04.2003, Vortrag: Task Pool Teams for Implementing Irregular Algorithms on Clusters of SMPs.

G. Rüniger, Dagstuhl-Seminar, Dagstuhl, Deutschland, 18.-23.5.2003

G. Rüniger, Universität des Saarlandes, Deutschland, 30.05.2003, Vortrag: Trends im parallelen und verteilten Hochleistungsrechnen.

G. Rüniger, Kolloquium Universität Paderborn, Deutschland, 15.07.2003, Vortrag: Parallelisierung irregulärer Algorithmen.

G. Rüniger. 6th Workshop on Advances in Parallel & Distributed Computational Models (APDCM), IPDPS, Santa Fe, New Mexico, 26.-30.04.2004, Vortrag: Functional Realization of Coordination Environments for Mixed Parallelism.

M. Scherzer, 10th ICF, Honolulu, 02.-6.12.2001, Vortrag: Coupling of asymptotic solutions with finite elements at interface configurations in piezoelectric composites.

M. Scherzer, Kolloquium SFB 298, Darmstadt, 21.01.2002, Vortrag: Zur Berechnung elektromechanischer Felder in Compositen mit piezoelektrischen Interfacekonfigurationen.

M. Scherzer, DVM AG, Wittenberg, 20.02.2003, Vortrag: Zur Bedeutung des akustischen Tensors in der Schädigungs- und Bruchmechanik.

M. Scherzer, ICF Moskau, 23.-26.06.2003, Vortrag: Coupled analytical and numerical solution technique of 2d piezoelectric interface corner configurations.

R. Schneider, ETH Zürich, 02.-06.4.2002

R. Schneider, West Virginia University, Morgantown, 28.04.-04.05.2002

R. Schneider, SAM Kolloquium an der ETH Zürich, Zürich, Schweiz, Januar 2003, Vortrag: Wavelet based fast solution of BEM.

R. Schneider, Seminar der Arbeitsgruppe: Angewandte Analysis und Numerische Mathematik an der Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen, Germany, Januar 2003, Vortrag: Wavelet based fast solution of BEM.

R. Schneider, Kolloquium, Regensburg, 09.05.2003, Vortrag: Waveletmethoden zur numerischen Behandlung von Operatorgleichungen.

R. Schneider, 2nd M.I.T. Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics, Boston, USA, 17.06.2003, Vortrag: Adaptive Fast Solution of Boundary Integral Equations with wavelet BEM.

R. Schneider, Workshop on Nonlinear Approximations in Numerical Analysis, Moskau, Russland, 22.06.2003, Vortrag: Adaptive Wavelet Methods for Boundary Integral Equations.

R. Schneider, ICIAM 2003 5th Intern. Conference „Partial Differential Equations on Industrial and Applied Mathematics“, Sydney, Australien, 07.07.2003, Vortrag: Wavelet Based Adaptive Fast Solution of Boundary Integral Equations.

R. Schneider, DFG SPP, Bonn, Oktober 2003, Vortrag: Operator Calculus of Density Matrices and Sparse Wavelet Representations.

R. Schneider, Kolloquium, Marburg, 12.12.2003, Vortrag: Gebietsoptimierung mit schnellen Wavelet-Randelementmethoden.

R. Scholz, DIODE Workshop II, Aberystwyth, Großbritannien, 19.-21.07.2001, Vortrag: Experimental and theoretical analysis of the Stokes shift between optical absorption and photoluminescence spectra of crystalline PTCDA: Evidence for charge transfer?.

R. Scholz, Int. School of Physics „E. Fermi“, course CXLIX: Organic nanostructures: Science and applications, Varenna, Italien, 31.07.-10.08.2001, Vortrag: Spectroscopic properties of a prototypic organic semiconductor: The case of PTCDA.

M. Schreiber, Dynamics Days Europe 2001, Dresden, 05.-08.06.2001, Vortrag: Application of the Hartree-Fock based diagonalization algorithm to the quantum Coulomb glass and to quantum dots.

M. Schreiber, Int. Conf. Dynamical Processes in Excited States of Solids, Lyon, Frankreich, 01.-04.07.2001, P An open-system density matrix approach to photo-induced electron injection from a surface attached molecule.

M. Schreiber, 21st IUPAP Int. Conf. Statistical Physics (STATPHYS21), Cancun, Mexico, 15.-21.07.2001,

M. Schreiber, WE-Heraeus-Sommerschule Dynamics of Complex Systems: Classical and Quantum Aspects, Wittenberg, 13.-25.08.2001, Vortrag: Computer Simulations of Dynamical Processes.

M. Schreiber, 3rd IMACS Seminar Monte Carlo Methods MCM2001, Salzburg, Österreich, 10.-14.09.2001, Vortrag: The Hartree-Fock based diagonalization - an efficient algorithm for the exact treatment of many interacting disordered electrons in solid state physics.

M. Schreiber, Sommeruniversität der Studienstiftung des Deutschen Volkes, Rovinj, Kroatien, 16.-29.09.2001, Vorträge: Anderson Lokalisierung. und Quasikristalle.

M. Schreiber, International University Bremen, 05.10.2001, Vortrag: Quasicrystals.

M. Schreiber, Kolloquium, Universität Freiburg, 05.11.2001, Vortrag: Lokalisierung elektronischer Zustände in ungeordneten Materialien.

M. Schreiber, 3rd TMR Workshop Quantum transport in the frequency and time domains, Bad Kleinkirchheim (Österreich), 01.-06.01.2002 Vortrag: Correlated electrons.

M. Schreiber, DPG-Frühjahrstagung der Arbeitsgruppe Physik-Informatik-Informationstechnik, Leipzig, 18.-22.03.2002, Vortrag: Computational Physics-Simulationsverfahren zur Lösung bisher nicht analytisch behandelbarer Probleme.

M. Schreiber, General Mathematics Colloquium, Department of Mathematics, Heriot-Watt University, Edinburgh (United Kingdom), 07.-11.05.2002, Vortrag: Localization of Electronic States in Disordered Materials.

M. Schreiber, Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry IV, Krakau (Polen), 14.-15.06.2002, Vortrag: Numerical simulation of time-resolved absorption and emission spectra of betaine-30 in solution.

M. Schreiber, 5th Int. Conf. Excitonic Processes in Condensed Matter (EXCON'02), Darwin (Australien), 22.-26.07.2002, Vortrag: Dielectric response of the electronic transitions in ultrathin PTCDA layers grown on Ag(111) and Ag(110) substrates.

M. Schreiber, 291. WE-Heraeus-Seminar Science on Cluster Computers, Bad Honnef, 22.-24.08.2002, Vortrag: Simulation of electron transfer processes in disordered systems and in molecular aggregates on large PC clusters.

M. Schreiber, 283. WE-Heraeus-Seminar Localisation, Quantum Coherence and Interaction, Hamburg, 04.-06.09.2002, Vortrag: Numerical investigations of the Anderson transition.

M. Schreiber, Alexander von Humboldt Seminar „The Scientific Community in Russia and European Integration“, Moskau, Russland, 26.-28.09.2002, Vortrag: Localization of electronic states in disordered systems.

M. Schreiber, Physikalisches Kolloquium, Universität Ulm, 27.10.2003, Vortrag: Quasi- kristall- Elektronische Zustände und anormale Diffusion.

M. Schreiber, Institute of Physics, Charles University Prague, 12.12.2003, Vortrag: Quasicrystals - Insulating Metals with Five-Fold Symmetry.

S. Seeger, Hyke-Workshop on Numerical and Asymptotic Methods for Kinetic Equations, Saarbrücken, 23.02.-25.02.2004, Vortrag: Cumulant Method.

P. Stollmann, Universität Prag, 10.-14.06.2002

P. Stollmann, Paris, Unesco-Tagung, 22.-27.07.2002

P. Stollmann, Blacksburg/Virginia, IWOTA und UAB Birmingham, 05.-15.08.2002

P. Stollmann, Accademia die Lincei Rom, 01.-04.12.2002

R. Unger, Sommerschule an der ETH Zürich, 09.-13.09.2002, Vortrag: FEM for PDEs with Multiple Scales

Hongliu Yang und G. Radons, 23th European Dynamics Days, Palma de Mallorca, Spain, 24.-27.09.2003. Vortrag: Lyapunov Instability of One-dimensional Lennard Jones Systems.

Hongliu Yang and G. Radons, 4. Dresdner Herbstseminar des Arbeitskreises Nicht-lineare Physik, MPIPKS Dresden, 09.-12.11.2003, Vortrag: Dynamical Structures of Lyapunov Vectors.

3.1.4 Qualifikationen

Die Förderung des Sonderforschungsbereichs „Numerische Simulationen auf massiv parallelen Rechnern“ trug wesentlich dazu bei, dass auf der Grundlage der gewählten Forschungsthemen die folgenden Qualifikationen im vorliegenden Berichtszeitraum abgeschlossen werden konnten.

3.1.4.1 Studien-, Diplomarbeiten

N. Düvelmeyer, Zerlegung von Hexaedernetzen in Tetraedernetze, Studienarbeit, TU Chemnitz, Januar 2002.

Andreas Fichtner, Chaoskontrolle mit zeitlich oszillierender zeitverzögerter Rückkopplung, Diplomarbeit, TU Chemnitz, Oktober 2003.

Andreas Fischer, Endoreversible Modelle für Verbrennungsmotoren, Diplomarbeit, TU Chemnitz, März 2002.

Christoph Forkmann, Auswahl und Bewertung von Optimierungsroutinen für die Parameteridentifikation, Studienarbeit, TU Chemnitz, Juni 2003.

Claudia Franken, Multi-Wavelet-Basen für nicht-konforme Finite-Elemente, Diplomarbeit, TU Chemnitz, 2003.

C. Gay, Numerical solution of the Poisson problem in 3D polyhedral domains, Studienarbeit (Projet de fin d'études), TU Chemnitz und ENSTA Paris, August 2002.

S. Grosman, Robust local problem error estimation for a singularly perturbed reaction-diffusion problem on anisotropic finite element meshes, Masterarbeit, TU Chemnitz, September 2001.

Jens Eller und Christoph Sohrmann, Optimierung von Schichtsystemen, Bakkalaureusarbeit, TU Chemnitz, September 2003.

Hagen Goldmann, Simulated Annealing zur Parameterbestimmung von Korrekturschaltungen für elektro-akustische Wandler, Diplomarbeit, TU Chemnitz, September 2003.

Judith Hippold, Dezentrale Taskpools auf Rechnern mit verteiltem Speicher, Diplomarbeit, TU Chemnitz, 2001.

Ulf Kähler, Waveletbasierte Matrixkompression für Randintegralgleichungen auf komplizierten Oberflächen, Diplomarbeit, TU Chemnitz, 2003.

Mario Lindner, Analyse des Einflusses der plastischen Orthotropie nach HILL auf die Kraft-Verschiebungs-Kurven beim Stauchen, Diplomarbeit, TU Chemnitz, September 2002.

Cornelia Pester, A posteriori Fehlerschätzer für ein quadratisches Rand-Eigenwertproblem, Diplomarbeit, TU Chemnitz, März 2002.

Maharavo Randrianarivony, Stability of mixed finite element methods with anisotropic meshes, Masterarbeit, TU Chemnitz, April 2001.

R. Schneider, Auslegung von Kurbelwellenhauptabmessungen unter Einsatz von FEM auf Hexaedernetzen, Diplomarbeit, TU Chemnitz, August 2002.

J. Seidel, Eine Auflösungsmethode für das Finite-Elemente-Gleichungssystem bei anisotroper Diskretisierung in der Umgebung einer Kante, Diplomarbeit, TU Chemnitz, Februar 2002.

S. Trebesius, Eine Singulärfunktionenmethode für elliptische Randwertaufgaben in dreidimensionalen Gebieten, Diplomarbeit, TU Chemnitz, Juni 2004 (in Vorbereitung).

Volkhard Walther, Beschreibung der formativen Verfestigung bei großen Verzerrungen mittels einer Entwicklungsgleichung für den Distorsionstensor vierter Stufe, Diplomarbeit, TU Chemnitz, März 2003.

T. Weber, Mutliwavelet Packets, Diplomarbeit, TU Chemnitz, 2003.

3.1.4.2 Dissertationen, Habilitationen

Habilitationen:

Thomas Frank, Parallele Algorithmen für die numerische Simulation dreidimensionaler, disperser Mehrphasenströmungen und deren Anwendung in der Verfahrenstechnik, Habilitationsschrift, TU Chemnitz 2002, Shaker Verlag, Aachen, 2002 (ISBN: 3-8322-0532-2).

Gerd Kunert, Advances in a posteriori error estimation on anisotropic finite element discretizations, 2003.

Dissertationen:

Sven Beuchler, Multilevel solvers for degenerated problems with applications to p -versions of the fem, 2003.

Rajkumar Brojen Singh, Localization in thin films, 2004.

Josef Burzler, Performance Optima for Endoreversible Systems, Dissertation, TU Chemnitz, Januar 2002.

Philipp Cain, Makroskopische Inhomogenitäten am Quanten–Hall–Übergang, Arbeit eingereicht, Verteidigung im Juli 2004.

Helmut Harbrecht, Wavelet Galerkin methods for 3D BEM.

Ilja Yu. Kadashevich, Modellierung der zyklischen Verfestigung unter Verwendung eines Mehrflächenmodells der Plastizität mit kinematischen Bindungen einschließlich der Parameterbestimmung, Dissertation, TU Chemnitz, November 2003.

Klaus Pachler, Parallele Berechnung 3-dimensionaler, instationärer Gas–Partikel–Strömungen unter der Berücksichtigung von Kollisionen und Aggregatzustandsänderungen“, Dissertation an der TU Chemnitz, eingereicht September 2003, Verteidigung Juli 2004.

Steffen Seeger, The Cumulant Method, Dissertation, TU Chemnitz, 2003.

3.2 Übersicht über die Veröffentlichungen

3.2.1 Referierte Literatur

Th. Apel and S. Nicaise and J. Schöberl, *Crouzeix-Raviart type finite elements on anisotropic meshes*, Numer. Math., 89, 193–223, 2001.

Th. Apel and S. Nicaise and J. Schöberl, *A non-conforming finite element method with anisotropic mesh grading for the Stokes problem in domains with edges*, IMA J. Numer. Anal., 21, 843–856, 2001.

Th. Apel and J. Schöberl, *Multigrid Methods for Anisotropic Edge Refinement*, SIAM J. Numer. Anal., 40, 1993–2006, 2002.

Th. Apel, V. Mehrmann and D. Watkins, *Structured eigenvalue methods for the computation of corner singularities in 3D anisotropic elastic structures*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 191, 4459–4473, 2002.

Th. Apel, A.-M. Sändig and S. I. Solov'ev, *Computation of 3D vertex singularities for linear elasticity: Error estimates for a finite element method on graded meshes*, Math. Modeling Numer. Anal. (M2AN), 36, 1043–1070, 2002.

Th. Apel and H. M. Randrianarivony. *Stability of discretizations of the Stokes problem on anisotropic meshes*. Mathematics and Computers in Simulation, 61, 437–447, 2003.

Th. Apel and N. Düvelmeyer, *Transformation of hexahedral finite element meshes into tetrahedral meshes according to quality criteria*, Computing, 71, 293–304, 2003.

Th. Apel, S. Grosman and P. K. Jimack and A. Meyer, *A new methodology for anisotropic mesh refinement based upon error gradients*, Appl. Numer. Math., To appear.

Th. Apel and S. Nicaise, *The inf-sup condition for some low order elements on anisotropic meshes*, Calcolo 2004, To appear.

A. Barinka, T. Barsch, S. Dahlke, M. Mommer, M. Konik. *Quadrature formulas for refinable functions and wavelets, II. Error analysis*, J. Comput. Anal. Appl., 4, 339–361, 2002.

M. Bebendorf and W. Hackbusch. *Existence of \mathcal{H} -matrix approximants to the inverse FE-matrix of elliptic operators with L^∞ -coefficients*. Numer. Math., 95(1), 1–28, 2003.

K. Bernert, Th. Frank, H. Schneider and K. Pachler, *Numerical Simulation of Disperse Multiphase Flows With an Application in Power Engineering*, Int. J. of Num. Meth. in Fluids, John Wiley & Sons, Ltd. Vol. 41, Issue 12, pp. 1253–1271, ISSN: 1097-0363, DOI: 10.1002/flid.423, April 2003.

- S. Beuchler. *Multi-grid solver for the inner problem in domain decomposition methods for p-FEM*. SIAM J. Numer. Anal., 40(3), 928–944, 2002.
- S. Beuchler. *AMLI preconditioner for the p-version of the FEM*. Numer. Lin. Algebra. Appl., 10, 721–732, 2003.
- S. Beuchler, R. Schneider und C. Schwab. *Multiresolution weighted norm equivalences and applications*. Numerische Mathematik, 2004. (zur Veröffentlichung angenommen).
- P. Blaudeck, K. H. Hoffmann. *Ground states for condensed amorphous systems: Optimizing annealing schemes*. Comp. Phys. Comm., 150(3), 293–299, 2003.
- S. Börm, L. Grasedyck and W. Hackbusch. *Introduction to Hierarchical Matrices with Application*, MPI Mathematik in den Naturwissenschaften, Preprint no. 18, 2002.
- A. Boutet de Monvel, P. Stollmann, *Dynamical localization for continuum random surface models*. Arch. Math. 80 ,87–97, 2003.
- A. Boutet de Monvel and P. Stollmann: *Eigenfunction expansions for generators of Dirichlet forms*. J. Reine Angew. Math. 561, 131–144, 2003.
- R. K. Brojen Singh and D. Kumar. *Localization in thin films: Cross-over from two dimensions to three dimensions*. Int. J. Mod. Phys. B, 19, 2627–2639, 2001.
- R. K. Brojen Singh and D. Kumar. *Self-consistent study of localization in thin films*. Phys. Rev. B, 66:, 75123/1–5, 2002.
- R. K. Brojen Singh and D. Kumar. *Self-consistent study of localization in thin films*. Phys. Rev. B, 69, 115420/1–12, 2004.
- A. Bucher, A. Meyer, U.-J. Görke and R. Kreißig. *A contribution to hierarchical adaptive strategies in nonlinear FEM*, Computational Mechanics, 2003 (submitted).
- A. Bucher, U.-J. Görke and R. Kreißig. *A material model for finite elasto-plastic deformations considering a substructure*. Int. J. Plast., 20/04, 619–642, 2004.
- P. Cain, F. Milde, R. A. Römer and M. Schreiber. *Applications of cluster computing for the Anderson model of localization*. in Recent Research Developments in Physics, ed. S. G. Pandalai. (Transworld Research Network, Trivandrum, Indien), 2, 171–184, 2001.
- P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber and M. E. Raikh. *Integer quantum Hall transition in the presence of a long-range-correlated quenched disorder*. Phys. Rev. B, 64, 235326/1–9, 2001.
- P. Cain, F. Milde, R. A. Römer and M. Schreiber. *Use of cluster computing for the Anderson model of localization*. Comp. Phys. Comm., 147, 246–250, 2002.

- V. Z. Cerovski. *Critical exponent of the random flux model on an infinite two-dimensional square lattice and anomalous critical states*. Phys. Rev. B, 64, 161101(R)/1–4, 2001.
- V. Z. Cerovski, U. Grimm and M. Schreiber. *Spectral and diffusive properties of silver-mean quasicrystals in 1, 2, and 3 dimensions*. Phys. Rev. B, 2004. (submitted for publication).
- A. Chakrabarti, R. A. Römer, and M. Schreiber. *Magnetotransport on periodic and quasiperiodic arrays of mesoscopic rings*. Phys. Rev. B, 68, 195417/1–9, 2003.
- E. Creusé, G. Kunert und S. Nicaise. *A posteriori error estimation for the Stokes problem: Anisotropic and isotropic discretizations*. Math. Models Methods Appl. Sci., 2003. (eingereicht).
- M. Davison, C. Essex, C. Schulzky, A. Franz and K. H. Hoffmann. *Clouds, fibres and echoes: a new approach to studying random walks on fractals*. J. Phys. A: Math. Gen., 34(20), L289–L296, 2001.
- A. Eilmes, R. A. Römer and M. Schreiber. *Exponents of the localization lengths in the bipartite Anderson model with off-diagonal disorder*. Physica B, 296, 46–51, 2001. Physica B, 324, 429, 2002 (Erratum).
- A. Eilmes, R. A. Römer and M. Schreiber. *Localization properties of two interacting particles in a quasi-periodic potential with a metal-insulator transition*. Eur. Phys. J. B, 23, 229–234, 2001.
- C. Elsässer and S. Köstlmeier. *Oxidative corrosion of adhesive interlayers*. Phys. Chem. Chem. Phys. 3, 5140–5144, 2001.
- F. Epperlein, S. Kilina, M. Schreiber, S. Uldanov and T. Vojta. *Fock space localization, return probability, and conductance of disordered interacting electrons*. Physica B, 296, 52–55, 2001.
- K. Eppler and H. Harbrecht. *Numerical Solution of Elliptic Shape Optimization Problems using wavelet-based BEM*, Optim. Methods Softw. 18, No. 1, 105–123, 2003
- K. Eppler and H. Harbrecht. *Fast wavelet BEM for 3d electromagnetic shaping*, Bericht 03-9, Berichtreihe des Mathematischen Seminars der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, 2003, (erscheint bei Appl. Numer. Math.).
- C. Essex, M. Davison, C. Schulzky, A. Franz, K. H. Hoffmann. *The differential equation describing random walks on the Koch curve*. J. Phys. A: Math. Gen., 34(41), 8397–8406, 2001.
- A. Franz, C. Schulzky and K. H. Hoffmann. *The Einstein relation for finitely ramified Sierpinski carpets*. Nonlinearity, 14(5), 1411–1418, 2001.
- A. Franz, K. H. Hoffmann and P. Salamon. *Best possible strategy for finding ground states*. Phys. Rev. Lett., 86(23), 5219–5222, 2001.

- A. Franz, C. Schulzky, S. Tarafdar, K. H. Hoffmann. *The pore structure of Sierpinski carpets*. J. Phys. A: Math. Gen., 34(42), 8751–8765, 2001.
- A. Franz, C. Schulzky and K. H. Hoffmann. *Using computer algebra methods to determine the chemical dimension of finitely ramified Sierpinski carpets*. SIGSAM Bulletin, 36(2), 18–30, 2002.
- A. Franz, C. Schulzky, S. Seeger and K. H. Hoffmann. *Diffusion on fractals – efficient algorithms to compute the random walk dimension*. In J. M. Blackledge, A. K. Evans, and M. J. Turner, editors, Fractal Geometry: Mathematical Methods, Algorithms, Applications, IMA Conference Proceedings, pages 52–67. Horwood Publishing Ltd., Chichester, West Sussex, 2002.
- A. Franz and K. H. Hoffmann. *Optimal annealing schedules for a modified Tsallis statistics*. J. Comput. Phys., 176(1), 196–204, 2002.
- A. Franz and K. H. Hoffmann. *Threshold accepting as limit case for a modified Tsallis statistics*. Appl. Math. Lett., 16(1), 27–31, 2003.
- G. N. Gatica, H. Harbrecht and R. Schneider. *Least squares methods for the coupling of FEM and BEM*, SINUM 41, 1974-1995, 2003.
- S. Köstlmeier and C. Elsässer. *Influence of interfacial excess oxygen on the adhesion energetics at metal/oxide heterophase boundaries*. Trans. JWRI, 30:251–256, 2001.
- S. Gemming and G. Seifert. *Nanotube Bundles from Calcium Disilicide - a DFT study*. Phys. Rev. B, 68, 075416-1–075416-7, 2003.
- S. Gemming and M. Schreiber. *Alloying in mixed Ag_nAu_{1-n} Nanowires*. Z. Metallkd., 75, 213–218, 2003.
- S. Gemming and M. Schreiber. *Density-functional study of the $Ti(0001)|Si(111)$ interface*. eingereicht bei J. Phys.: Condens. Matter.
- S. Gemming, I. Chaplygin and M. Schreiber. *High-temperature behaviour of metal-semiconductor interfaces*. eingereicht bei Phys. Rev. B.
- S. Gemming, G. Seifert and M. Schreiber. *Density-functional study of alloyed AgAu and PdAu nanowires*. Phys. Rev. B, 68, 096424-1–096424-7, 2004.
- U. Grimm and M. Schreiber. *Energy spectra and eigenstates of quasiperiodic tight-binding Hamiltonians*, in Quasicrystals—Structure and Physical Properties, ed. H.-R. Trebin. (Wiley-VCH, Berlin, 2003) pages 210–235.
- H. Harbrecht, F. Paiva, C. Pérez and R. Schneider. *Biorthogonal wavelet approximation for the coupling of FEM-BEM*, Num. Math., 92, 325–356, 2002.
- H. Harbrecht, M. Konik and R. Schneider. *Fully Discrete Wavelet Galerkin Schemes*, Engineering Analysis with Boundary Elements, 27, 423–437, 2003.

- H. Harbrecht, F. Paiva, C. Pérez and R. Schneider. *Multiscale preconditioning for the coupling of FEM-BEM*, Num. Lin. Alg. Appl., 10, 197-222, 2003.
- H. Harbrecht, S. Pereverzev and R. Schneider. *Self-regularization by projection for noisy pseudodifferential equations of negative order*, Numer. Math., 95, 123-143, 2003 .
- H. Harbrecht and R. Schneider. *Adaptive Galerkin BEM*, in Computational Fluid and Solid Mechanics 2003, vol.2, edited by K.J. Bathe, Elsevier, 1982-1986, 2003.
- F. Heilmann, K. H. Hoffmann and P. Salamon. *Best possible probability distribution over extremal optimization ranks*. Europhys. Lett., 66(3), 305-310, 2004.
- B. Heinrich and K. Pietsch. *Nitsche type mortaring for some elliptic problem with corner singularities*. Computing, 68, 217-238, 2002.
- B. Heinrich. *Nitsche-type finite element method for elliptic problems with singularities*. Numerical Mathematics and Applications, pp. 837- 845, Springer Verlag 2003.
- B. Heinrich and S. Nicaise. *Nitsche mortar finite element method for transmission problems with singularities*. IMA J. Numer. Anal., 23, 331-358, 2003.
- K. Hering, G. Rünger, and S. Trautmann. *Modular Construction of Model Partitioning Processes for Parallel Logic Simulation*, Erscheint in: Special Issue: Int. Journal of Computational Science and Engineering, Inderscience, 2004.
- K. H. Hoffmann, M. Schreiber. editors. *Computational Physics*. Springer-Verlag, Berlin, 2001. Chinese Edition.
- K. H. Hoffmann, M. Schreiber. editors. *Computational Statistical Physics*. Springer Verlag, Berlin, 2002.
- K. H. Hoffmann. *The statistical physics of energy landscapes: From spin glasses to optimization*. In Hoffmann, K. H. and Schreiber, M., editors, Computational Statistical Physics, chapter 4, pages 57-76. Springer Verlag, Berlin, 1st edition, 2002.
- K. H. Hoffmann, A. Franz, P. Salamon. *Structure of best possible strategies for finding ground states*. Phys. Rev. E, 66, 046706, 2002.
- U. Hübner, S. Seeger, K. Petersen. *Das Clic-Projekt – Planung und Inbetriebnahme eines PC-Clusters*. Praxis der Informationsverarbeitung und Kommunikation, 24(2), 75-84, 2001.
- M. Jung, S. Nicaise and J. Tabka. *Some multilevel methods on graded meshes*. Journal of Computational and Applied Mathematics, 138, 151-171, 2002.
- M. Jung and O. Steinbach. *A finite element-boundary element algorithm for inhomogeneous boundary value problems*. Computing, 68, 1-17, 2002.

M. Jung. *Fast parallel solvers for fourth-order boundary value problems*. In G. R. Joubert, W. E. Nagel, F. J. Peters und W. V. Walter, Hrsg., *Parallel Computing: Software, Technology, Algorithms, Architectures, and Applications*. Proceedings of the 10th ParCo Conference in Dresden, 2003. (zur Veröffentlichung angenommen).

B.N. Khoromskij and J.M. Melenk. *Boundary concentrated FEM*. SIAM J. Numer. Anal., 41, 1-36, 2003.

B.N. Khoromskij and J.M. Melenk. *An efficient direct solver for the boundary concentrated FEM in 2D*. Computing, 69, 91–117, 2002.

C. Koziar, R. Reilein and G. Rüniger. *Load Imbalance Aspects in Atmosphere Simulations*, Erscheint in: Special Issue: Int. Journal of Computational Science and Engineering, Inderscience, 2004.

K. Kulshreshtha, N. Nataraj and M. Jung. *Performance of a parallel mixed finite element implementation for fourth order clamped anisotropic plate bending problems in distributed memory environments*. Applied Mathematics and Computation, 2003. (zur Veröffentlichung angenommen).

K. Kulshreshtha, N. Nataraj and M. Jung. *A parallel mixed finite element implementation of fourth order plate bending problems in distributed memory environments*. Applied Mathematics and Computation, 2004. (zur Veröffentlichung angenommen).

G. Kunert. *A local problem error estimator for anisotropic tetrahedral finite element meshes*. SIAM J. Numer. Anal., 39, 668–689, 2001.

G. Kunert. *A posteriori l_2 error estimation on anisotropic tetrahedral finite element meshes*. IMA J. Numer. Anal., 21, 503–523, 2001.

G. Kunert. *Towards anisotropic mesh construction and error estimation in the finite element method*. Numer. Meth. PDE, 18(6), 625–648, 2002.

G. Kunert. *A posteriori error estimation for convection dominated problems on anisotropic meshes*. Math. Methods Appl. Sci., 26(7), 589–617, 2003.

X. Li, C. Essex, M. Davison, K. H. Hoffmann and C. Schulzky. *Fractional diffusion, irreversibility and entropy*. J. Non-Equilib. Thermodyn., 28(3), 279–291, 2003.

J.M. Melenk. *hp-Finite Element Methods for Singular Perturbations*, Springer-Verlag, 2002.

J.M. Melenk, K. Gerdes and C. Schwab. *Fully discrete hp-FEM: fast quadrature*. Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg., 190, 4339-4364, 2001.

A. Meyer. *Stable evaluation of Jacobian matrices on highly refined finite element meshes*. Computing, 70, 359–373, 2003.

M. L. Ndawana, R. A. Römer and M. Schreiber. *Finite-size scaling of the level compressibility at the Anderson transition*. Eur. Phys. J. B, 27, 399–407, 2002.

- M. Ndawana, R. A. Römer and M. Schreiber. *Scaling of the level compressibility at the Anderson metal-insulator transition*. J. Phys. Soc. Japan, 72, A131–A132, 2003.
- M. L. Ndawana, R. Römer and M. Schreiber. *Effects of scale-free disorder on the Anderson metal-insulator transition*. Europhys. Lett., 2004. (submitted for publication).
- B. K. Nikolić and V. Z. Cerovski. *Structure of quantum disordered wave functions: weak localization, far tails, and mesoscopic transport*. Eur. Phys. J. B, 30, 227–238, 2002.
- J. O'Donnell and G. Rüniger. *Derivation of a Logarithmic Time Carry Lookahead Addition Circuit*, Erscheint in: Journal of Functional Programming, Cambridge University Press, 2004.
- I. Plyushchay, R. A. Römer and M. Schreiber, *The three-dimensional Anderson model of localization with binary random potential*, Phys. Rev. B 68, 064201, 2003.
- M. Randrianarivony and G. Brunnett, *Generating well behaved meshes for parameterised surfaces*, Proc. Conf. on Geometric Modeling and Graphics, London, IEEE Computer Society, ISBN 0-7695-1985-7, pp. 56-61, 2003.
- T. Rauber and G. Rüniger. *Program-Based Locality Measures for Scientific Computing*, Erscheint in: Int. Journal of Foundations of Computer Science, World Scientific, 2004.
- T. Rauber, R. Reilein, and G. Rüniger. *Group-SPMD programming with orthogonal processor groups*. Concurrency: Practice and Experience, 16(2–3), 173–195, 2004.
- T. Rauber and G. Rüniger. *Parallel Implementation Strategies for Algorithms from Scientific Computing*. In Hergert W., Ernst A., and Däne M., editors, Computational Materials Science, From Basic Principles to Material Properties, Series: Lecture Notes in Physics, Vol. 642. Springer Verlag, 2004.
- R. A. Römer and M. Schreiber. *Numerical investigations of scaling at the Anderson transition*, in Anderson Localization and Its Ramifications—Disorder, Phase Coherence, and Electron Correlations, ed. T. Brandes and S. Kettmann. Lecture Notes in Physics (Springer, Berlin, Heidelberg), 630, 3–19, 2003.
- R. A. Römer, M. Schreiber, and T. Vojta. *Disorder and two-particle interaction in low-dimensional quantum systems*. Physica E, 9, 397–404, 2001.
- M. Scherzer and M. Kuna. *Combined analytical and numerical solution of 2D interface corner configurations between dissimilar piezoelectric materials*. International Journal of Fracture, 2004 (accepted for publication).
- M. Scherzer and H. Gläser. *Mechanical modelling of failure patterns in TiN-coatings loaded by homogeneous stresses of a bending specimen*. Int. J. of Fracture, 114, 291–306, 2002.

R. Schneider, Y. Xu und A. Zhou, *On A Posteriori Error Estimates for Discontinuous Galerkin methods*, Advances in Computational Analysis, to appear 2004.

M. Schreiber, J. Siewert and T. Vojta. *Interacting electrons in parabolic quantum dots: energy levels, addition energies, and charge distributions*. Int. J. Mod. Phys. B, 15, 3641–3645, 2001.

M. Schreiber and T. Vojta. *The Hartree-Fock based diagonalization—an efficient algorithm for the treatment of interacting electrons in disordered solids*. Mathematics and Computers in Simulation, 62, 243–254, 2003.

M. Schreiber, J. Siewert and T. Vojta. *Interacting electrons in parabolic quantum dots: Energy levels, addition energies, and charge distributions*, in Excitonic Processes in Condensed Matter, ed. K. Cho and A. Matsui. (World Scientific, Singapore, 2001) pages 73–77.

M. Schreiber and F. Milde. *Characterization of the metal-insulator transition in the Anderson model of localization*, in Computational Statistical Physics—From Billiards to Monte Carlo, ed. K. H. Hoffmann and M. Schreiber. (Springer, Berlin, Heidelberg, 2002) pages 259–278.

S. Schubert and K. H. Hoffmann. *The structure of enumerated spin glass state spaces*. accepted by Computer Physics Communications, 2004.

S. Schubert and K. H. Hoffmann. *Aging in enumerated spin glass state spaces*. accepted for publication in Europhysics Letters, 2004.

C. Schuster, R. A. Römer, and M. Schreiber. *Interacting particles at a metal-insulator transition*. Phys. Rev. B, 65, 115114/1–7, 2002.

C. Schuster, R. A. Römer, and M. Schreiber. *Commensurate and incommensurate transitions for interacting particles*. J. Phys. Soc. Japan, 72, A129–A130, 2003.

S: Seeger, A. Franz, C. Schulzky and K. H. Hoffmann. *Random walks on finitely ramified Sierpinski carpets*. Comp. Phys. Comm., 134(3), 307–316, 2001.

S. Seeger and K. H. Hoffmann. *The cumulant method applied to a mixture of Maxwell gases*. Continuum Mech. Thermodyn., 14(2), 321–335, 2002.

H. Shalaby, K. Pachler, K. Wozniak and G. Wozniak, *Comparative Study of the Continuous Phase Flow in Cyclone Separator Using Different Turbulence Models*, International Journal for Numerical Methods in Fluids, Paper No. 3043 in Begutachtung 2004.

P. Stollmann. *Localization and delocalization for nonstationary models*. In P. Blanchard and G. Dell’Antonio, editors, Multiscale Methods in Quantum Mechanics: Theory and Experiment, Boston, in print. Birkhäuser.

S. Tarafdar, A. Franz, S. Schulzky and K. H. Hoffmann. *Modelling porous structures by repeated Sierpinski carpets*. Physica A, 292(1-4), 1–8, 2001.

- V. Uski, B. Mehlig and M. Schreiber. *Signature of ballistic effects in disordered conductors*. Phys. Rev. B, 63, 241101(R)/1–4, 2001.
- V. Uski, B. Mehlig and M. Schreiber. *Spatial structure of anomalously localized states in disordered conductors*. Phys. Rev. B, 66, 233104/1–4, 2002.
- V. Uski, R. A. Römer and M. Schreiber. *Numerical study of eigenvector statistics for random banded matrices*. Phys. Rev. E, 65, 056204/1–4, 2002.
- T. Vojta and M. Schreiber. *Localization and conductance in the quantum Coulomb glass*. Phil. Mag. B, 81, 1117–1129, 2001.
- Hongliu Yang and G. Radons, *Lyapunov Instability of Lennard-Jones Fluids*, Phys. Rev. E, submitted.

3.2.2 Beiträge in Proceedings; Sonstige Veröffentlichungen

(außer Preprintreihe des SFB)

Th. Apel and S. Nicaise and J. Schöberl, *Finite element methods with anisotropic meshes near edges*, editor P. Neittaanmäki and M. Křížek, Proc. Internat. Conf. Finite Element Methods: Three-dimensional Problems, GAKUTO Internat. Series, Math. Sci. Appl. 15, 1–8, 2001, Tokyo.

S. Beuchler und J. Schöberl. *Extension operators on tensor product structures in 2d and 3d*. Technical Report 2003-01, Johann Radon Institute for Computational Applied Mathematics, Linz, December 2003.

A. Boutet de Monvel, P. Stollmann and G. Stolz: *Absence of continuous spectral types for certain nonstationary random models*, Preprint, 2004.

S. Böcker, W. Kirsch and P. Stollmann: *Spectral theory for nonstationary random models*, Preprint, 2003.

A. Bucher, A. Meyer, U.-J. Görke and R. Kreißig. *About a nodal based transfer algorithm and error estimators in nonlinear adaptive FEM*. In: Proceedings of the IV European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, ECCOMAS 2004, Jyväskylä, 2004.

J.A. Denev, Th. Frank and K. Pachler, *Large Eddy Simulation (LES) of Turbulent Square Channel Flow using a PC-Cluster Architecture*, 4. International Conference on “Large-Scale Scientific Computations“, Sozopol, Bulgaria, June 4.–8. 2003.

A. Eilmes, R. A. Römer, and M. Schreiber. *Localization properties of two interacting particles in a quasi-periodic potential with a metal-insulator transition*, in Proc. 26th Int. Conf. Physics of Semiconductors (ICPS 26), Edinburgh 2002, ed. A. R. Long and J. H. Davies. Inst. Phys. Conf. Ser. (Inst. of Physics, Bristol), 171, P9/1–8, 2002.

M. Enderlein, M. Kuna, A. Ricoeur, W. Baer, K. Müller, K. Klein and H. P. Winkler. *Numerische Analyse des Stoßbiegeversuchs zur Ermittlung der dynamischen Bruchzähigkeit*, Tagungsband 35. DVM-Tagung AK Bruchvorgänge, Freiburg 2003, pp. 259-268.

K. Eppler and H. Harbrecht, *2nd Order Shape Optimization using Wavelet BEM*, Technical Report 06-2003, Preprint Series of the Institut of Mathematics, TU Berlin, 2003 (eingereicht bei Optim. Methods Softw.).

K. Eppler and H. Harbrecht, *Exterior Electromagnetic Shaping using Wavelet BEM*, Technical Report 13-2003, Preprint Series of the Institut of Mathematics, TU Berlin, 2003 (eingereicht bei Math. Meth. Appl. Sci.).

K. Eppler and H. Harbrecht, *Second order Lagrange multiplier approximation for constrained shape optimisation problems*, Technical Report 35-2003, Preprint Series of the Institut of Mathematics, TU Berlin, 2003 (erscheint in Proceedings of 21. IFIP TC 7 Conference on system modelling and optimization).

Th. Frank, K. Bernert, K. Pachler and H. Schneider, *Efficient Parallel Simulation of Disperse Gas-Particle Flows on Cluster Computers*, International Parallel CFD 2001 Conference, Egmond aan Zee, The Netherlands, May 21-23, 2001, pp. 1-8. To be published in : "Parallel Computational Fluid Dynamics - Recent Developments and Advances", Edited by : P. Wilders, A. Ecer, J. Periaux, N. Satofuka, Elsevier Science B.V., ISBN: 0-444-50672-1, Amsterdam, NL, 2002.

Th. Frank, K. Bernert, K. Pachler and H. Schneider, *MISTRAL/PartFlow-3D ein vollständig parallelisiertes Berechnungsverfahren für disperse Fluid-Partikel-Strömungen*, GVC-Fachausschusssitzung „Mehrphasenströmungen“, Kurzfassungen der Vorträge, No. 2.09, pp. 1-2, Magdeburg, 5.-7. März 2002.

Th. Frank, J.A. Denev and K. Pachler, *Large Eddy Simulation (LES) der Gas-Feststoff-Strömung in einem Standardzyklon*, Arbeitssitzung des GVC-Fachausschusses „Mehrphasenströmungen“, Kurzfassungen der Vorträge, pp. 1-2, Baden-Baden, 5.-7. März 2003.

U.-J. Görke, A. Bucher and R. Kreißig. *An efficient algorithm for the integration of the initial value problem in anisotropic finite elastoplasticity considering a substructure*. In: Dislocations. Plasticity on Metal Forming, A. S. Khan (Ed.), Proceedings of Plasticity 03, Neat Press, 346-348, 2003.

U. Groh and M. Kuna. *2D Piezoelectric Crack Analysis by Boundary Element Method* Proc. Conf. Fracture and Damage, Paderborn, 2003, Key Engineering Materials, 251-252, 91-96, 2003.

H. Harbrecht and R. Schneider. *Wavelets for the Fast Solution of Boundary Integral Equations*, Proceedings of the Fifth World Congress on Computational Mechanics (WCCMV), July 7-12, 2002, Vienna, Austria, Editors: Mang, H.A.; Rammerstorfer, F.G.; Eberhardsteiner, J., Publisher: Vienna University of Technology, Austria.

B. Heinrich. *Nitsche-type finite element method for elliptic problems with singularities*. PAMM, 1, 522-523, 2002.

J. Hippold, A. Meyer and G. Rüniger. *An Adaptive, 3-Dimensional, Hexahedral Finite Element Implementation for Distributed Memory*. In J. J. Dongarra M. Bubak, G. D. van Albada, editor, Proc. of Int. Conf. on Computational Science (ICCS04), LNCS 3037, pages 149-157. Springer Verlag, Poland, Krakau, 2004.

J. Hippold and G. Rüniger. *A Communication API for Implementing Irregular Algorithms on Clusters of SMPs*. In J. Dongarra, D. Laforenza, and S. Orlando, editors, Proc. of the 10th EuroPVM/MPI2003, LNCS 2840, pages 455-463. Springer Verlag, Venedig, Italien, 2003.

J. Hippold and G. Rüniger. *Task Pool Teams for Implementing Irregular Algorithms on Clusters of SMPs*. In Proc. of the 17th Int. Parallel & Distributed Processing Symposium (IPDPS03), (CD-ROM), Nizza, Frankreich, 2003.

J. Hippold and G. Rüniger. *A Data Management and Communication Layer for Adaptive, Hexahedral FEM*. Erscheint in: Proc. of Euro-Par 2004, Pisa, Italien, LNCS, Springer Verlag, 2004.

J. Hippold and G. Runger. *Interaction of Cache, Communication, and Load Increase on SMP Clusters for Parallel Adaptive FEM*, Angenommen fur: PARA04, Workshop on State-of-the-Art in Scientific Computing, Lyngby, Danemark, 2004.

J. Hippold and G. Runger. *Task Pool Teams: A Hybrid Programming Model for Implementing Irregular Algorithms on Cluster of SMPs*, Eingereicht als Zeitschriftenbeitrag.

D. Hundertmark, R. Killip, S. Nakamura, P. Stollmann and I. Veselic: *Bounds on the spectral shift function and the density of states*. Preprint 2004.

S. Hunold, T. Rauber and G. Runger. *Multilevel Hierarchical Matrix Multiplication on Cluster*. Erscheint in: Proc. of Int. Conf. on Supercomputing (ICS04), Saint-Malo, Frankreich, 2004.

S. Hunold, T. Rauber and G. Runger. *Hierarchical Matrix-Matrix Multiplication Based on Multiprocessor Tasks*. In J. J. Dongarra M. Bubak, G. D. van Albada, editor, Proc. of Int. Conf. on Computational Science (ICCS04), LNCS 3037, pages 3–11. Springer Verlag, Poland, Krakau, 2004.

M. Kuna and A. Ricoeur. *Simulation of domain switch-toughening in ferroelectric ceramics*. In Proceedings of the 10th International Conference on Fracture ICF10 (CD ROM), ed. K. Ravi-Chandar et al., Pergamon Press, Honolulu 2001.

A. Meyer. *Projection Techniques embedded in the PCGM for Handling Hanging Nodes and Boundary Restrictions*. in: Engineering Computational Technology, B.H.V.Topping and Z.Bittnar,(Eds.) Saxe-Coburg Publ., Stirling, Scotland, 147-165.

F. Milde, R. A. Romer and M. Schreiber. *Metal-insulator transition in anisotropic systems*, in Proc. 25th Int. Conf. Physics of Semiconductors (ICPS 25), Osaka 2000, ed. N. Miura and T. Ando. Proceedings in Physics (Springer, Berlin, Heidelberg), 87, 148–149, 2001.

J. O'Donnell, T. Rauber and G. Runger. *Functional Realization of Coordination Environments for Mixed Parallelism*. In Proc. of IPDPS: 6th Workshop on Advances in Parallel & Distributed Computational Models (APDCM04), (CD-ROM), Santa Fe, New Mexico, 2004.

K. Pachler, Th. Frank and K. Bernert, *Simulation of Unsteady Gas-Particle Flows including Two- and Four-Way-Coupling on a MIMD Computer Architektur*, 10th Workshop on TWO-PHASE FLOW PREDICTIONS, Martin-Luther-Universitat Halle-Wittenberg, Halle (Saale), 9.–12. April 2002, pp. 418-423. ed. by M. Sommerfeld, ISBN: 3-86010-641-4, Martin-Luther-Universitat Halle-Wittenberg, Halle (Saale), April 2002.

F. Rabold, A. Meyer, M. Scherzer and M. Kuna. *Finite-Elemente-Simulation von Risswachstum mittels effizienter adaptive-iterativer Solver*. In: 36. Tagung des DVM-Arbeitskreises Bruchvorgange, Themenschwerpunkt: Schadigungsmechanismen und Bruch, DVM-Bericht 236, Deutscher Verband fur Materialforschung und -Prufung e.V., 171–181, 2004.

G. Radons, G. Rüniger, M. Schwind and G. Yang. *Parallel Algorithms for the Determination of Lyapunov Characteristics of Large Nonlinear Dynamical Systems*, Angenommen für: PARA04, Workshop on State-of-the-Art in Scientific Computing, Lyngby, Dänemark, 2004.

G. Radons and H. L. Yang, *Static and Dynamic Correlations in Many-Particle Lyapunov Vectors*. Phys. Rev. Lett., submitted.

M. Randrianarivony and G. Brunnett, *Approximation by NURBS curves with free Knots*, Proc. Vision, Modeling and Visualization 2002, pp. 195-201, Akademische Verlagsgesellschaft 2002, ISBN 3-89838-034-3.

M. Randrianarivony and G. Brunnett, *A multiresolution method for detecting higher order discontinuities from irregular samples*, Proc. Conf. on curve and surface fitting, Saint-Malo, Nashboro Press 2003, pp. 333-342, ISBN 0-9728482-1-5.

T. Rauber, R. Reilein, and G. Rüniger. *Orthogonal Processor Groups for Message-Passing Programs*. In Proc. of HPCN Europe 2001, LNCS 2110, Amsterdam, Niederlande, pages 363–372. Springer Verlag, 2001.

T. Rauber, R. Reilein, and G. Rüniger. *Library Support for Orthogonal Processor Groups*. In Proc. of the 13th ACM Symposium on Parallel Algorithms & Architectures (SPAA), pages 316–317, Kreta, Griechenland, 2001. ACM Press.

T. Rauber, R. Reilein, and G. Rüniger. *ORT – A Communication Library for Orthogonal Processor Groups*. In Proc. of ACM/IEEE Supercomputing Conf. (SC01), (CD-ROM), Denver, USA, 2001.

T. Rauber and G. Rüniger. *Library Support for Hierarchical Multi-Processor Tasks*. In Proc. of ACM/IEEE Supercomputing Conf. (SC02), (CD-ROM), Baltimore, USA, 2002.

T. Rauber and G. Rüniger. *Execution Schemes for Parallel Adams Methods*. Erscheint in: Proc. of Euro-Par 2004, Pisa, Italien, LNCS, Springer Verlag, 2004.

M. Scherzer. *Elektromechanische Modellierung und Bewertung der Festigkeit von Verbundwerkstoffen mit integrierten Piezokeramiken*, Wissenschaftlicher Bericht im Rahmen der Förderung innovativer Forschung (Projektnummer: 4-7566-70-0390-98/4, SMWK Dresden), 34 Seiten, 2001.

H. Schneider, Th. Frank, K. Pachler and K. Bernert. *A Numerical Study of the Gas-Particle Flow in Pipework and Flow Splitting Devices of Coal-Fired Power Plant*, 10th Workshop on TWO-PHASE FLOW PREDICTIONS, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale), 9.–12. April 2002, pp. 227–236. ed. by M. Sommerfeld, ISBN: 3-86010-641-4, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale), April 2002.

S. Seeger and K. H. Hoffmann. *Thermal boundary conditions for the cumulant method*. Submitted to Europhys. Lett., May 2004.

S. Seeger and K. H. Hoffmann. *The cumulant method for the space-homogeneous Boltzmann equation*. submitted to Continuum Mech. Thermodyn., March 2004.

F. Shang, M. Kuna and M. Scherzer. *Development of finite element techniques for three-dimensional analyses of crack problems thermopiezoelectric materials*. Proc. EUROMECH COLLOQUIUM 429: Computational and Experimental Mechanics of Advanced Materials, (Ed.: H. Böhm) Wien, September 2001.

J. Siewert, M. Schreiber and T. Vojta. *Interacting electrons in parabolic quantum dots*, in Proc. 25th Int. Conf. Physics of Semiconductors (ICPS 25), Osaka 2000, ed. N. Miura and T. Ando. Proceedings in Physics (Springer, Berlin, Heidelberg), 87, 1061–1062, 2001.

C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber and A. MacKinnon. *Critical behavior of the thermoelectric transport properties in amorphous systems near the metal-insulator transition*, in Proc. 25th Int. Conf. Physics of Semiconductors (ICPS 25), Osaka 2000, ed. N. Miura and T. Ando. Proceedings in Physics (Springer, Berlin, Heidelberg), 87, 166–167, 2001.

3.2.3 Preprintreihe des SFB 393

Preprintreihe des SFB 393 für 2001

(Im Bericht für die Jahre 1999 – 2001 noch unvollständig enthalten)

- 01-01 G. Kunert. Robust local problem error estimation for a singularly perturbed problem on anisotropic finite element meshes. January 2001.
- 01-02 G. Kunert. A note on the energy norm for a singularly perturbed model problem. January 2001.
- 01-03 U.-J. Görke, A. Bucher, R. Kreißig. Ein Beitrag zur Materialparameteridentifikation bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen durch Analyse inhomogener Verschiebungsfelder mit Hilfe der FEM. Februar 2001.
- 01-04 R. A. Römer. Percolation, Renormalization and the Quantum-Hall Transition. February 2001.
- 01-05 A. Eilmes, R. A. Römer, C. Schuster, M. Schreiber. Two and more interacting particles at a metal-insulator transition. February 2001.
- 01-06 D. Michael. Kontinuumstheoretische Grundlagen und algorithmische Behandlung von ausgewählten Problemen der assoziierten Fließtheorie. März 2001.
- 01-07 S. Beuchler. A preconditioner for solving the inner problem of the p-version of the FEM, Part II - algebraic multi-grid proof. March 2001.
- 01-08 S. Beuchler, A. Meyer. SPC-PM3AdH v 1.0 - Programmer's Manual. March 2001.
- 01-09 D. Michael, M. Springmann. Zur numerischen Simulation des Versagens duktiler metallischer Werkstoffe (Algorithmische Behandlung und Vergleichsrechnungen). März 2001.
- 01-10 B. Heinrich, S. Nicaise. Nitsche mortar finite element method for transmission problems with singularities. March 2001.
- 01-11 T. Apel, S. Grosman, P. K. Jimack, A. Meyer. A New Methodology for Anisotropic Mesh Refinement Based Upon Error Gradients. March 2001.
- 01-12 F. Seifert, W. Rehm. (Eds.) Selected Aspects of Cluster Computing. March 2001.
- 01-13 A. Meyer, T. Steidten. Improvements and Experiments on the Bramble–Pasciak Type CG for mixed Problems in Elasticity. April 2001.
- 01-14 K. Ragab, W. Rehm. CHEMPI: Efficient MPI for VIA/SCI. April 2001.
- 01-15 D. Balkanski, F. Seifert, W. Rehm. Proposing a System Software for an SCI-based VIA Hardware. April 2001.
- 01-16 S. Beuchler. The MTS-BPX-preconditioner for the p-version of the FEM. May 2001.

- 01-17 S. Beuchler. Preconditioning for the p-version of the FEM by bilinear elements. May 2001.
- 01-18 A. Meyer. Programmer's Manual for Adaptive Finite Element Code SPC-PM 2Ad. May 2001.
- 01-19 P. Cain, M.L. Ndawana, R.A. Römer, M. Schreiber. The critical exponent of the localization length at the Anderson transition in 3D disordered systems is larger than 1. June 2001
- 01-20 G. Kunert, S. Nicaise. Zienkiewicz-Zhu error estimators on anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes. July 2001.
- 01-21 G. Kunert. A posteriori H^1 error estimation for a singularly perturbed reaction diffusion problem on anisotropic meshes. August 2001.
- 01-22 A. Eilmes, Rudolf A. Römer, M. Schreiber. Localization properties of two interacting particles in a quasi-periodic potential with a metal-insulator transition. September 2001.
- 01-23 M. Randrianarivony. Strengthened Cauchy inequality in anisotropic meshes and application to an a-posteriori error estimator for the Stokes problem. September 2001.
- 01-24 Th. Apel, H. M. Randrianarivony. Stability of discretizations of the Stokes problem on anisotropic meshes. September 2001.
- 01-25 Th. Apel, V. Mehrmann, D. Watkins. Structured eigenvalue methods for the computation of corner singularities in 3D anisotropic elastic structures. October 2001.
- 01-26 P. Cain, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber. Use of cluster computing for the Anderson model of localization. October 2001. Conf. on Comp. Physics, Aachen (2001).
- 01-27 P. Cain, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber. Applications of cluster computing for the Anderson model of localization. October 2001. Transworld Research Network for a review compilation entitled "Recent Research Developments in Physics", (2001).
- 01-28 X. W. Guan, A. Foerster, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber. A supersymmetric $U_q[\mathfrak{osp}(2|2)]$ -extended Hubbard model with boundary fields. October 2001.
- 01-29 K. Eppler, H. Harbrecht. Numerical studies of shape optimization problems in elasticity using wavelet-based BEM. November 2001.
- 01-30 A. Meyer. The adaptive finite element method - Can we solve arbitrarily accurate? November 2001.
- 01-31 H. Harbrecht, S. Pereverzev, R. Schneider. An adaptive regularization by projection for noisy pseudodifferential equations of negative order. November 2001.

- 01-32 G. N. Gatica, H. Harbrecht, R. Schneider. Least squares methods for the coupling of FEM and BEM. November 2001.
- 01-33 Th. Apel, A.-M. Sändig, S. I. Solov'ev. Computation of 3D vertex singularities for linear elasticity: Error estimates for a finite element method on graded meshes. December 2001.

Preprintreihe des SFB 393 für 2002

- 02-01 M. Pester. Bibliotheken zur Entwicklung paralleler Algorithmen - Basisroutinen für Kommunikation und Grafik. Januar 2002.
- 02-02 M. Pester. Visualization Tools for 2D and 3D Finite Element Programs - User's Manual. January 2002.
- 02-03 H. Harbrecht, M. Konik, R. Schneider. Fully Discrete Wavelet Galerkin Schemes. January 2002.
- 02-04 G. Kunert. A posteriori error estimation for convection dominated problems on anisotropic meshes. March 2002.
- 02-05 H. Harbrecht, R. Schneider. Wavelet Galerkin Schemes for 3D-BEM. February 2002.
- 02-06 W. Dahmen, H. Harbrecht, R. Schneider. Compression Techniques for Boundary Integral Equations - Optimal Complexity Estimates. April 2002.
- 02-07 S. Grosman. Robust local problem error estimation for a singularly perturbed reaction-diffusion problem on anisotropic finite element meshes. May 2002.
- 02-08 M. Springmann, M. Kuna. Identifikation schädigungsmechanischer Materialparameter mit Hilfe nichtlinearer Optimierungsverfahren am Beispiel des Rousselier Modells. Mai 2002.
- 02-09 S. Beuchler, R. Schneider, C. Schwab. Multiresolution weighted norm equivalences and applications. July 2002.
- 02-10 Ph. Cain, R. A. Römer, M. E. Raikh. Renormalization group approach to energy level statistics at the integer quantum Hall transition. July 2002.
- 02-11 A. Eilmes, R. A. Römer, M. Schreiber. Localization properties of two interacting particles in a quasiperiodic potential with a metal-insulator transition. July 2002.
- 02-12 M. L. Ndawana, R. A. Römer, M. Schreiber. Scaling of the Level Compressibility at the Anderson Metal-Insulator Transition. September 2002.
- 02-13 Ph. Cain, R. A. Römer, M. E. Raikh. Real-space renormalization group approach to the quantum Hall transition. September 2002.
- 02-14 A. Jellal, E. H. Saidi, H. B. Geyer, R. A. Römer. A Matrix Model for $\nu_{k_1 k_2} = \frac{k_1 + k_2}{k_1 k_2}$ Fractional Quantum Hall States. September 2002.

- 02-15 M. Randrianarivony, G. Brunnett. Parallel implementation of curve reconstruction from noisy samples. August 2002.
- 02-16 M. Randrianarivony, G. Brunnett. Parallel implementation of surface reconstruction from noisy samples. September 2002.
- 02-17 M. Morgenstern, J. Klijn, Chr. Meyer, R. A. Römer, R. Wiesendanger. Comparing measured and calculated local density of states in a disordered two-dimensional electron system. September 2002.
- 02-18 J. Hippold, G. Rüniger. Task Pool Teams for Implementing Irregular Algorithms on Clusters of SMPs. October 2002.
- 02-19 H. Harbrecht, R. Schneider. Wavelets for the fast solution of boundary integral equations. October 2002.
- 02-20 H. Harbrecht, R. Schneider. Adaptive Wavelet Galerkin BEM. October 2002.
- 02-21 H. Harbrecht, R. Schneider. Wavelet Galerkin Schemes for Boundary Integral Equations - Implementation and Quadrature. October 2002.

Preprintreihe des SFB 393 für 2003

- 03-01 E. Creusé, G. Kunert, S. Nicaise. A posteriori error estimation for the Stokes problem: Anisotropic and isotropic discretizations. January 2003.
- 03-02 S. I. Solov'ëv. Existence of the guided modes of an optical fiber. January 2003.
- 03-03 S. Beuchler. Wavelet preconditioners for the p-version of the FEM. February 2003.
- 03-04 S. Beuchler. Fast solvers for degenerated problems. February 2003.
- 03-05 A. Meyer. Stable calculation of the Jacobians for curved triangles. February 2003.
- 03-06 S. I. Solov'ëv. Eigenvibrations of a plate with elastically attached load. February 2003.
- 03-07 H. Harbrecht, R. Schneider. Wavelet based fast solution of boundary integral equations. February 2003.
- 03-08 S. I. Solov'ëv. Preconditioned iterative methods for monotone nonlinear eigenvalue problems. March 2003.
- 03-09 Th. Apel, N. Düvelmeyer. Transformation of hexahedral finite element meshes into tetrahedral meshes according to quality criteria. May 2003.
- 03-10 H. Harbrecht, R. Schneider. Biorthogonal wavelet bases for the boundary element method. April 2003.
- 03-11 T. Zhanlav. Some choices of moments of refinable function and applications. June 2003.
- 03-12 S. Beuchler. A Dirichlet-Dirichlet DD-pre-conditioner for p-FEM. June 2003.

- 03-13 Th. Apel, C. Pester. Clément-type interpolation on spherical domains - interpolation error estimates and application to a posteriori error estimation. July 2003.
- 03-14 S. Beuchler. Multi-level solver for degenerated problems with applications to p-version of the fem. (*Dissertation*) July 2003.
- 03-15 Th. Apel, S. Nicaise. The inf-sup condition for the Bernardi-Fortin-Raugel element on anisotropic meshes. September 2003.
- 03-16 G. Kunert, Z. Mghazli, S. Nicaise. A posteriori error estimation for a finite volume discretization on anisotropic meshes. September 2003.
- 03-17 B. Heinrich, K. Pönitz. Nitsche type mortaring for singularly perturbed reaction-diffusion problems. October 2003.
- 03-18 S. I. Solov'ëv. Vibrations of plates with masses. November 2003.
- 03-19 S. I. Solov'ëv. Preconditioned iterative methods for a class of nonlinear eigenvalue problems. November 2003.
- 03-20 M. Randrianarivony, G. Brunnett, R. Schneider. Tessellation and parametrization of trimmed surfaces. December 2003.

Preprintreihe des SFB 393 für 2004

- 04-01 A. Meyer, F. Rabold, M. Scherzer. Efficient Finite Element Simulation of Crack Propagation. February 2004.
- 04-02 S. Grosman. The robustness of the hierarchical a posteriori error estimator for reaction-diffusion equation on anisotropic meshes. March 2004.
- 04-03 A. Bucher, A. Meyer, U.-J. Görke, R. Kreißig. Entwicklung von adaptiven Algorithmen für nichtlineare FEM. April 2004.
- 04-04 A. Meyer, R. Unger. Projection methods for contact problems in elasticity. April 2004.
- 04-05 T. Eibner, J. M. Melenk. A local error analysis of the boundary concentrated FEM. May 2004.
- 04-06 H. Harbrecht, U. Kähler, R. Schneider. Wavelet Galerkin BEM on unstructured meshes. May 2004.
- 04-07 M. Randrianarivony, G. Brunnett. Necessary and sufficient conditions for the regularity of a planar Coons map. May 2004.

3.2.4 Beiträge im Internet

Homepage des SFB 393

<http://www.tu-chemnitz.de/sfb393>

FEM-Symposium, aktuelle Ankündigungen und bisherige Themen

<http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/fem-symposium/>

CLIC – Chemnitzer LINUX Cluster

Homepage, Nutzung, Systemüberblick, Installation, Fotos

<http://www.tu-chemnitz.de/urz/clic/>

CLIC Usage: Nutzung, Wissenswertes, Erfahrungen, Experimente

http://www.tu-chemnitz.de/~pester/CLIC/clic_usage.html

Resultate bei adaptiver FEM

<http://www.tu-chemnitz.de/~amey/adaptiv-2D/>

Examples for special face geometry by mesh refinement.

<http://www.tu-chemnitz.de/~pester/facegeo.html>

Bibliotheken zur Entwicklung paralleler Algorithmen.

http://www.tu-chemnitz.de/~pester/par_lib.html

3D FEM Mesh Viewer (Java applet).

<http://www-usercgi.tu-chemnitz.de/~pester/meshes/showstd.cgi>

2D FEM Mesh Viewer (Java applet).

<http://www-usercgi.tu-chemnitz.de/~pester/meshes/shownets.cgi>

Visualization of 2D domains - Help screen.

<http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/software/doc/vis2D/>

SIVUS - Arbeitsgruppe Mehrphasenströmungen.

<http://www.imech.tu-chemnitz.de>

Preprintreihe des SFB393 (Internet) – ISSN 1619-7186

<http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/preprints.html>

Der vorliegende Arbeits- und Ergebnisbericht des SFB 393 ist abschnittsweise unter der folgenden Adresse im WWW verfügbar. Die Abbildungen können dort in Originalfarben betrachtet werden:

<http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/bericht04>

Teilprojekte

| | |
|---|-----|
| Projektbereich A | 13 |
| A3 - Parallele, adaptive Löser | 15 |
| A7 - Wavelets für Randintegraloperatoren | 43 |
| A11 - Gemischte FE-Methoden | 61 |
| A12 - FEM vom Nitsche-Typ | 75 |
| A13 - Randkonzentrierte Finite-Elemente-Methoden | 105 |
| A14 - Feinstruktur im Bernoulli–Anderson–Modell | 117 |
| Projektbereich B | 127 |
| B8 - Parallelisierung irregulärer numerischer Algorithmen | 129 |
| Projektbereich C | 145 |
| C1 - Lokalisierung elektronischer Zustände in amorphen Materialien | 147 |
| C3 - Relaxation komplexer Systeme | 163 |
| C7 - Bandstrukturprogramm für Amorphisierungsphänomene an Grenzflächen .. | 185 |
| C8 - Langzeitverhalten großer dynamischer Systeme | 197 |
| Projektbereich D | 217 |
| D1 - Simulation elastisch-plastischer Deformationen | 219 |
| D2 - Algorithmen für phasengekoppelte, disperse Mehrphasenströmungen | 259 |
| D5 - Kumulantenmethode | 271 |