

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.