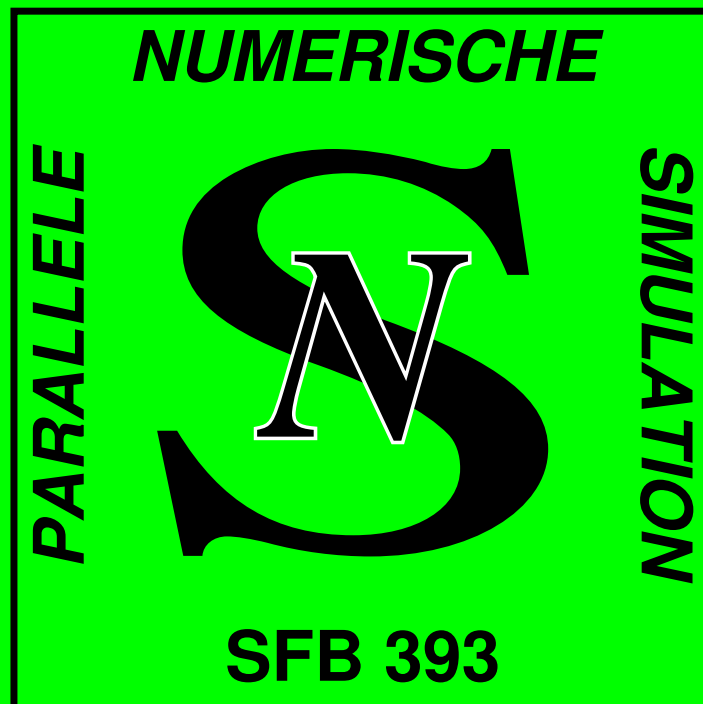


TECHNISCHE UNIVERSITÄT CHEMNITZ

**Sonderforschungsbereich 393**

**Parallele Numerische Simulation für  
Physik und Kontinuumsmechanik**



ARBEITS- UND ERGEBNISBERICHT 2004 – 2005



Deutsche Forschungsgemeinschaft  
— Sonderforschungsbereiche —

über  
Magnifizenz der Technischen Universität Chemnitz

Bezeichnung des Sonderforschungsbereichs:

## **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. März 2006

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

Chemnitz, den 30. März 2006

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



TECHNISCHE UNIVERSITÄT  
CHEMNITZ





---

## Inhaltsverzeichnis

---

<b>1 Allgemeiner Teil/Zusammenfassung</b>	<b>5</b>
1.1 Wissenschaftliche Entwicklung des Sonderforschungsbereichs . . . . .	7
1.2 Förderung der Lehre und des wissenschaftlichen Nachwuchses . . . . .	8
<b>2 Projektbereiche</b>	<b>9</b>
<b>Projektbereich A</b>	
A7 - Wavelets für Randintegraloperatoren . . . . .	15
A11 - Gemischte FE-Methoden . . . . .	29
A12 - Besondere Finite Elemente Methoden . . . . .	35
A15 - Optimalsteuerungsprobleme . . . . .	67
<b>Projektbereich B</b>	
B8 - Parallelisierung irregulärer numerischer Algorithmen . . . . .	81
<b>Projektbereich C</b>	
C1 - Lokalisierung elektronischer Zustände in amorphen Materialien . . . . .	101
C3 - Relaxation komplexer Systeme . . . . .	113
C7 - Bandstrukturprogramm für Amorphisierungsphänomene an Grenzflächen	129
C8 - Langzeitverhalten großer dynamischer Systeme . . . . .	145
<b>Projektbereich D</b>	
D1 - Simulation elastisch-plastischer Deformationen . . . . .	169
D5 - Kumulantenmethode . . . . .	209
<b>3 Gesamtdokumentation der Aktivitäten</b>	<b>223</b>
3.1 Aktivitätenliste . . . . .	225
3.1.1 Übersicht über Workshops und Tagungen . . . . .	225
3.1.2 Qualifikationen . . . . .	226
3.2 Übersicht über die Veröffentlichungen . . . . .	228
3.2.1 Referierte Literatur . . . . .	228
3.2.2 „Lecture Notes in Computational Science and Engineering“ – Sonderband des SFB 393 . . . . .	232
3.2.3 Preprintreihe des SFB 393 . . . . .	234
3.2.4 Beiträge im Internet . . . . .	236



# KAPITEL 1

---

Allgemeiner Teil/Zusammenfassung

---





## 1.1 Wissenschaftliche Entwicklung des Sonderforschungsbereichs

Dieser Abschlussbericht soll im wesentlichen auf die Ergebnisse und Resultate eingehen, die nach dem Arbeits- und Ergebnisbericht zur dritten Phase des SFB393 (Jahre 2001 bis 2004) noch entstanden sind, bezieht sich also auf die Restlaufzeit 2004 und das Jahr 2005.

In dieser Abschlussperiode des SFB 393 wurden die Grundlagenuntersuchungen und Experimentalrealisierungen

- für numerische Grundprobleme bei moderner FEM (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.

Besonders die immer engeren Kooperationsbeziehungen, zwischen den Arbeitsgruppen verschiedener Fakultäten sind ein Hauptergebnis der zurückliegenden 10jährigen Tätigkeit des Sonderforschungsbereichs und werden in der weiteren Entwicklung an der TU Chemnitz eine bedeutende Rolle spielen. So sind schon nachfolgend neue Paketprojekte und Teilnahme an Schwerpunktprogrammen als Kooperationsanträge gestellt bzw. erfolgreich begonnen worden.

## 1.2 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: 5 Promotionen (alle eingereicht)  
in der Physik: 3 Promotionen  
(2 verteidigt, 1 steht vor Abschluss)  
und 1 Habilitation,  
in der Informatik: 1 Promotion

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

**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. Guido Brunnett 22.12.1959 Professur Graphische Datenverarbeitung und Visualisierung Fakultät für Informatik Technische Universität Chemnitz 09107 Chemnitz Tel.: (0371) 531-1533 Fax: (0371) 531-1801 brunnett@informatik.tu-chemnitz.de	Dr. Matthias Pester 29.04.1954 bei Professur Mathematik in Industrie und Technik Fakultät für Mathematik Technische Universität Chemnitz 09107 Chemnitz Tel.: (0371) 531-2656 Fax: (0371) 531-2657 m.pester@mathematik.tu-chemnitz.de
---	--

### 2.1.2 Projektbearbeiter

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 großdimensionierte Gleichungssysteme verbietet sich naturgemäß wegen des enormen Bedarfs an Speicherplatz und Rechenzeit. Moderne Ansätze wie das *Panel-Clustering-Verfahren* [HN89], die *schnelle Multipolentwicklung* [GR87], oder zu diesen verwandte Verfahren wie  *$\mathcal{H}$ -Matrizen* [HK00] oder die *Adaptive Cross Approximation* [BR03], versprechen einen Ausweg aus dieser Situation. Ein weiterer Zugang sind *Multiskalen-* oder *Waveletapproximationsmethoden* [BCR03, Sch98], welche auf der Verwendung von Multiskalenasen oder biorthogonalen Waveletbasen zur Diskretisierung der Integralgleichungen beruhen. Die dadurch entstehenden Systemmatrizen sind quasi dünn-besetzt, d.h. sie lassen sich ohne Ver-

lust an Genauigkeit durch dünn-besetzte Matrizen ersetzen. Zudem können sie leicht mittels Diagonalskalierung vorkonditioniert werden [DKU99].

Die Aufgabenstellung dieses Teilprojektes bestand darin, Wavelet-Galerkinverfahren 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 approximierten Flächen betrachtet werden. In der letzteren Situation sollte die Wavelet-Konstruktion nach Tausch/White zum Einsatz kommen.

Die letzte auf ein Jahr verkürzte Projektphase des SFB393 sollte nach Empfehlung der DFG dazu genutzt werden, die laufenden Arbeiten zu einem sinnvollen Abschluss zu bringen. Unter diesem Gesichtspunkt wurden aus dem Katalog der Ziele des auf drei Jahre ausgelegten Antrages folgende Teilziele zur Bearbeitung in 2005 ausgewählt:

1. Bei der Entwicklung von Waveletverfahren für polygonal berandeter Oberflächen sollte das vorhandene auf Tausch/White-Wavelets beruhende Verfahren auf den 3D Fall übertragen werden.
2. Bei der Geometrieverarbeitung sollte das wichtige Verfahren zur Zerlegung getrimmter Flächen und die Methoden zur Umparametrisierung der Segmente über dem Einheitsquadrat weiterentwickelt werden. Außerdem sollten Möglichkeiten zur Approximation geschlossener Dreiecksnetze durch Verbände vierseitiger Flächenstücke untersucht werden.

## 2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

### 2.3.1 Waveletverfahren für polygonal approximierten Oberflächen

Ziel dieses Bereiches des Teilprojektes A7 war es, die bereits in der Antragsperiode 2002 – 2004 erhaltenen 2D-Resultate bzgl. des Waveletverfahrens für polygonal approximierten Oberflächen auf den drei- bzw. n-dimensionalen Fall zu erweitern.

Ausgangspunkt solcher Verfahren ist die Randelementmethode, deren Systemmatrix in der klassischen Einskalenbasis i.A. vollbesetzt ist. Mit Hilfe von hierarchischen Wavelets lässt sich jedoch die Systemmatrix in der sogenannten *Standardform* aufstellen. Diese ist quasi dünnbesetzt und lässt sich mit der durch R. SCHNEIDER bereits eingehend untersuchten Matrixkompression [DPS93, DPS94, vPS96, Sch98] auf eine dünnbesetzte Matrix komprimieren. Da die polygonal approximierten Oberfläche jedoch keine auf Verfeinerung basierenden Wavelets zulässt, bedurfte es der Verwendung der auf Vergrößerung basierenden Tausch/White-Wavelets [TW03] zur Umsetzung des Verfahrens in 2D.

Letztere Multiskalenbasis sollte in dem bewilligten Zeitraum 2005 für den 3D-Fall umgesetzt werden. Desweiteren sollte ebenfalls das Verfahren zum Aufstellen der Systemmatrix für den 3D-Fall verwirklicht werden. Dabei sollte jedoch nicht nur die lose Kombination aus schnellen Summationsverfahren für die Randelementmethode und den Wavelets, wie sie für im 2D Fall Verwendung fand, eins zu eins in den dreidimensionalen Fall

überführt werden. Vielmehr sollte die spezielle rekursive Konstruktion, die sich von den Tausch/White-Wavelets auf die Systemmatrix „vererbt“ und die hierarchische Struktur der Systemmatrix berücksichtigt werden. Es sollte daher eine spezielle Anpassung der verwendeten schnellen Verfahren auf die Belange der Wavelets geben.

### 2.3.2 Vorverarbeitung der Geometriedaten

In der Projektphase 2002-2004 wurde ein Verfahren entwickelt, welches es ermöglicht, die Waveletkonstruktion von Schneider für getrimmte Flächenstücke einzusetzen. Dazu ist es notwendig, die Parametergebiete der getrimmten Flächen in konvexe Vierecke zu zerlegen und einen Diffeomorphismus zu konstruieren, der ein derartiges Viereck auf das Einheitsquadrat abbildet. Das vorgeschlagene Zerlegungsverfahren [RBS03] basierte auf dem Ansatz von [Joe95], bei dem reflexe Ecken auf Kosten von zusätzlichen Randpunkten entfernt werden. Diese zusätzlichen Randpunkte führen in der Zerlegung des Gesamtobjektes zu „hängenden Knoten“, die durch Unterteilung der Teilflächenstücke beseitigt werden müssen. Da die Komplexität des Lösungsverfahrens von der Anzahl der Flächenstücke abhängt, wurde die Zielstellung formuliert, in der letzten Projektphase eine neue Zerlegungsstrategie zu realisieren, die ohne Einführung zusätzlicher Randpunkte auskommt. Darüberhinaus sollte die Konstruktion der erwähnten Diffeomorphismen, die bisher ausschließlich auf der Basis von Coonsflächen durchgeführt wurde, auf den Einsatz von Gordonflächen erweitert werden. Beide Flächentypen ermöglichen die transfinite Interpolation gegebener Kurven. Allerdings erlaubt eine Gordonfläche die Interpolation eines ganzen Kurvennetzes, während eine Coonsfläche nur für die Einpassung in eine aus vier Randkurven bestehende Netzmasche eingesetzt werden kann.

Eine weitere Zielstellung im Bereich der Geometrievorverarbeitung bestand darin, ein Verfahren zu entwickeln, das eine gegebene Triangulierung einer geschlossenen Oberfläche beliebigen Geschlechts in vierseitige Segmente zerlegt, die dann durch Bezierflächen approximiert werden können.

### Literaturverzeichnis

- [BCR03] G. Beylkin, R. Coifman, and V. Rokhlin. The fast wavelet transform and numerical algorithms. *Comm. Pure and Appl. Math.*, 2003.
- [BR03] M. Bebendorf and S. Rjasanow. Adaptive low-rank approximation of collocation matrices. *Computing*, 70(1):1–24, 2003.
- [DKU99] 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.
- [DPS93] W. Dahmen, S. Prössdorf, and R. Schneider. Wavelet approximation methods for periodic pseudodifferential equations. part 2 - fast solution and matrix compression. *Advances in Computational Mathematics*, 1:259–335, 1993.
- [DPS94] W. Dahmen, S. Prössdorf, and R. Schneider. Multiscale methods for pseudodifferential equations on smooth manifolds. In *Proceedings of the International Conference on Wavelets: Theory, Algorithms, and Applications*, volume 5 of *Wavelet Analysis and Applications*, pages 385–424. Academic Press, 1994.

- [GR87] L. Greengard and V. Rokhlin. A fast algorithm for particle simulation. *J. Comput. Phys.*, 73:325–348, 1987.
- [HK00] W. Hackbusch and B.N. Khoromskij. A sparse h-matrix arithmetic, ii: Application to multi-dimensional problems. *Computing*, 64:21–47, 2000.
- [HN89] W. Hackbusch and Z.P. Nowak. On the fast matrix multiplication in the boundary element method by panel clustering. *Num. Math.*, 54:463–491, 1989.
- [Joe95] B. Joe. Quadrilateral mesh generation in polygonal regions. *Computer-Aided Design*, 27(3):209–222, 1995.
- [RBS03] M. Randrianarivony, G. Brunnett, and R. Schneider. Constructing a diffeomorphism between a trimmed domain and the unit square. Preprint SFB393/03–20, TU Chemnitz, 2003.
- [Sch98] R. Schneider. *Multiskalen- und Wavelet-Matrixkompression: Analysisbasierte Methoden zur Lösung grosser vollbesetzter Gleichungssysteme, Habilitationsschrift*. PhD thesis, TH Darmstadt, 1998.
- [TW03] J. Tausch and J. White. Multiscale bases for the sparse representation of boundary integral operators on complex geometries. *SIAM J. Sci. Comput.*, 24:1610–1629, 2003.
- [vPS96] T. von Petersdorf and C. Schwab. Wavelet approximation on first kind integral equations in a polygon. *Num. Math.*, 74:479–516, 1996.

## 2.4 Ergebnisse

### 2.4.1 Wavelet-Galerkin-Verfahren für polygonal approximierten Oberflächen

Ausgangspunkt der Betrachtungen ist die Geometrie, gegeben als stückweise polygonal approximierten Oberfläche. Sowohl zur Konstruktion der Wavelets als auch zur Verwendung von schnellen Randelementmethoden wird eine hierarchische Unterteilung der gegebenen Oberfläche benötigt, der so genannte Clusterbaum.

Analog zum zweidimensionalen Fall lassen sich Multiskalenbasen, auch nach J. TAUSCH UND J. WHITE [TW03] Tausch/White-Wavelets genannt, die orthogonal auf den Spuren von Polynomen im Raum stehen, mit Hilfe dieser Unterteilung rekursiv aus stückweise konstanten Ansatzfunktionen erzeugen. Bei dieser Vergrößerungsstrategie entstehen in jedem Rekursionsschritt Waveletfunktionen (Abb. 2.1) sowie Skalierungsfunktionen, die zur Erzeugung von Wavelets auf dem gröberen Level weiterverwendet werden.

Die jeweiligen Multiwavelets spalten sich dabei erst durch die Singulärwertzerlegung lokaler Momentenmatrizen ab. Dabei erlaubt eine zusätzliche Betrachtung verschwindend kleiner Singulärwerte die vorzeitige Generierung von Waveletfunktionen aus Skalierungsfunktionen auf bereits feinen Leveln.

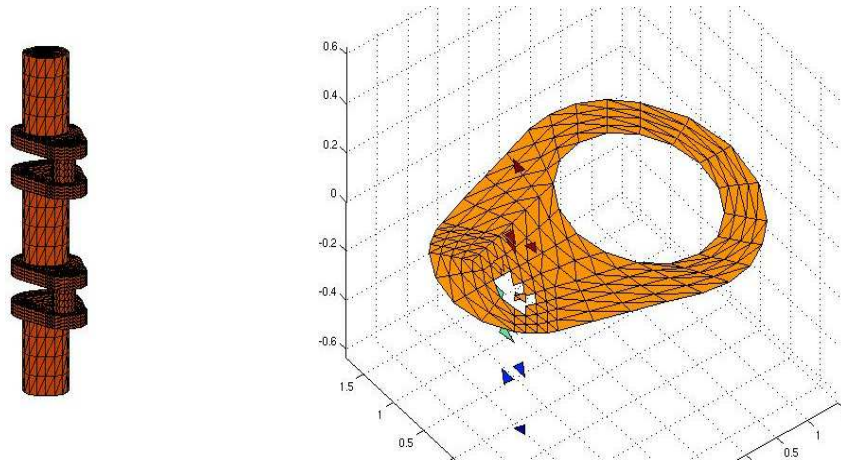


Abbildung 2.1: Waveletfunktion für die Kurbelwelle

Verwendet man die so entstandenen Wavelets als Grundlage für ein Galerkin-Verfahren, so überträgt sich die hierarchische Struktur der Wavelets auf die Matrixstruktur der Systemmatrix. Ähnlich verhält es sich mit der rekursiven Konstruktion der Wavelets. Führt man Einträge der Systemmatrix bzgl. der waveletgenerierenden Skalierungsfunktionen ein, so lassen sich die Einträge der Systemmatrix bzgl. der Wavelets aus letzteren in der selben Art und Weise berechnen, wie sich die Wavelets aus den Skalierungsfunktionen ergeben. Beide Eigenschaften wurden zur Gewinnung eines neuen Waveletverfahrens verwendet.

Da man basierend auf den Arbeiten von R. SCHNEIDER [DPS93, DPS94, vPS96, Sch98] und H. HARBRECHT [DHS06] sowohl die Einträge der Systemmatrix als auch ihre benötigten Genauigkeiten a priori kennt, kann man ausgehend von den Matrixkoeffizienten bzgl. der feinsten Leveln, die berechnet werden müssen, die Einträge für gröbere Level nach obiger Beschreibung rekursiv berechnen. Zur Berechnung der Koeffizienten bzgl. der feinst nötigen Leveln, bedarf es jedoch der Hinzunahme anderer schneller Randelementmethoden.

Solche schnellen Randelementmethoden, wie ACA, Fast-Multipol oder  $\mathcal{H}^2$ -Matrizen basieren auf der Approximation der Systemmatrix durch Ersatzstrukturen, wie entsprechenden Reihenentwicklungen bzw. Niedrig-Rang-Darstellungen. Im Gegensatz zum Waveletverfahren stellen sie keine dünnbesetzte Systemmatrix explizit auf. Jedoch ist die Grundlage aller dieser Verfahren eine hierarchische Zerlegung der Systemmatrix in Blöcke. Bei der genaueren Untersuchung speziell der  $\mathcal{H}^2$ -Matrizen stellte sich dabei heraus, dass sich Teile dieser Strukturen hervorragend mit den Strukturen der Wavelets verbinden lassen. Insbesondere die bei den  $\mathcal{H}^2$ -Matrizen verwendeten geschachtelten Clusterbasen verhalten sich in ihren Strukturen ähnlich der Konstruktion der Tausch/White-Wavelets.

Aus diesen Erkenntnissen entstand im Verlaufe des bewilligten Jahres unter Zuhilfenahme der Hlib des Max-Planck-Institutes Leipzig ein  $\mathcal{H}^2$ -basierendes Waveletverfahren. Dieses wurde als erstes zu Test- und Kontrollzwecken für den zweidimensionalen Fall umgesetzt. Auf Grund der rekursiven Struktur des Verfahrens ist es in großen Teilen unabhängig von der Raumdimension und ließ dahingehend eine schnelle Umsetzung des

Verfahrens im dreidimensionalen gegen Ende des bewilligten Jahres zu. Die notwendigen theoretischen Vorbetrachtungen wurden bereits in [HKS2] erbracht. Ein zum neuen Verfahren zugehörige Veröffentlichung ist in Arbeit.

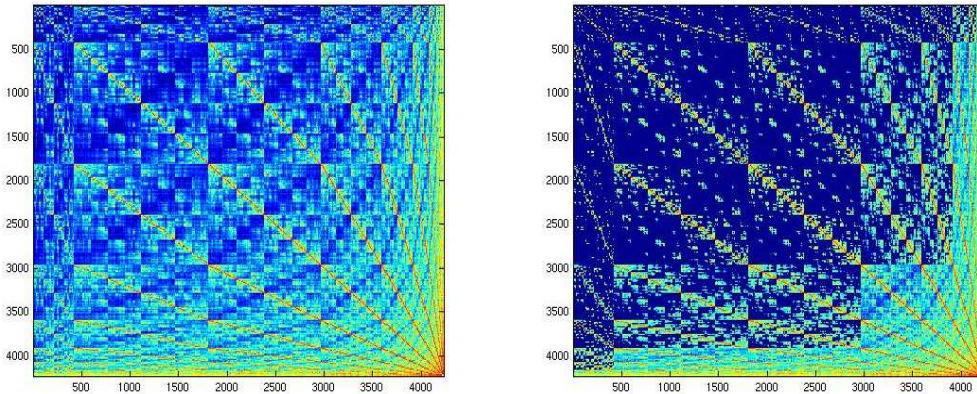


Abbildung 2.2: quasi dünnbesetzte und dünnbesetzte Systemmatrix

Das implementierte Verfahren stellt eine erste Umsetzung der  $\mathcal{H}^2$ -basierenden Waveletmethode dar. Es bedarf daher noch weiteren Untersuchungen der zugrundeliegenden Strukturen sowie der Optimierung des Codes, um eine effizientes und schnelles Verfahren zu erhalten, das sich auch in den entsprechenden Rechenzeiten mit anderen Verfahren messen kann. Eine entsprechende Adaption auf das Problem der Radiosity-Gleichung fand aus zeitlichen Gründen nicht mehr statt.

## 2.4.2 Geometrieverarbeitung

Bei der Untersuchung möglicher Zerlegungsstrategien wurde zunächst ein Verfahren implementiert, das auf einer Triangulierung des gegebenen Polygons und nachfolgender Konversion in konvexe Vierecke beruht [BHRS04]. Aufgrund des ungünstigen Laufzeitverhaltens dieser Methode wurde entschieden, einen Ansatz zu erarbeiten, der ohne eine Triangulierung des Polygons auskommt.

Das entwickelte Zerlegungsverfahren beruht auf der folgenden Aussage: Von jedem einfachen Polygon mit mehr als 4 Punkten lässt sich durch eine der folgenden Operationen ein Viereck abtrennen (siehe Abb. 2.3):

- (Op1) Verbindung zweier Polygoneckpunkte durch eine Kante. In diesem Fall ist das Viereck nicht notwendig konvex.
- (Op2) Einführung eines inneren Knotens (Steinerpunkt) und zweier zugehöriger Kanten.

Der Beweis dieses Abspaltungssatzes (siehe [RB05b]) basiert auf der Anwendung des Two-Ear-Theorems von Meister [Mei75], welches besagt, dass ein einfaches Polygon mit

mehr als drei Punkten mindestens zwei sog. Ohren (das sind zwei benachbarte Polygonkanten, die durch Einführung einer weiteren Kante vom Polygon abgetrennt werden können) besitzt.

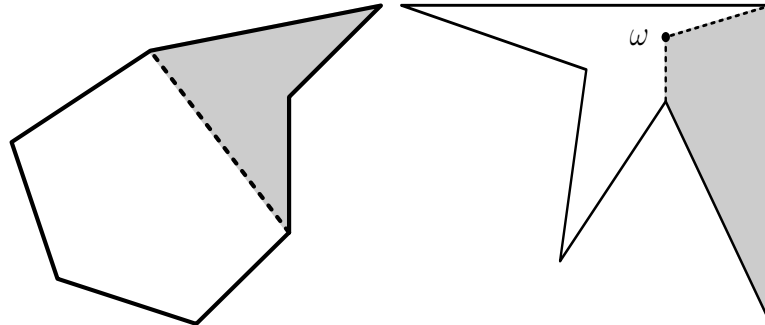


Abbildung 2.3:

Auf der Grundlage des Abspaltungssatzes lässt sich ein Algorithmus zur Zerlegung eines einfachen Polygons  $P$  in konvexe Vierecke formulieren. Dabei können wir o.B.d.A. annehmen, dass  $P$  eine gerade Anzahl von Eckpunkten besitzt, da wir zum Einen die Diskretisierung der gekrümmten Randkurven selbst erzeugen und zum Anderen kollineare benachbarte Kanten für  $P$  zulässig sind. Vereinfacht dargestellt arbeitet der Zerlegungsalgorithmus wie folgt. Zunächst werden maximale konvexe Teilpolygone von  $P$  abgetrennt, sofern dies möglich ist. Besitzt ein abgetrenntes konvexes Teilpolygon  $Q$  eine gerade Anzahl von Eckpunkten, so lässt es sich ohne weiteres in konvexe Vierecke zerlegen. Besitzt  $Q$  eine ungerade Anzahl von Eckpunkten, so wird auf der gemeinsamen Kante mit dem Restpolygon  $P'$  ein neuer Punkt eingefügt, so dass sowohl  $Q$  als auch  $P'$  eine gerade Anzahl von Punkten besitzen. Lassen sich keine Teilpolygone von  $P'$  abspalten, so wird  $P'$  durch die Operationen (Op1) und (Op2) in Vierecke zerlegt. In einem weiteren Schritt wird jedes nicht-konvexe Viereck mit einem seiner Nachbarn zu einem Hexagon zusammengefasst. Abschließend werden die Hexagone durch Einführung von Steinerpunkten in konvexe Vierecke zerlegt. Dies ist möglich aufgrund des Satzes von Bremner [BHRS04]. Die Implementierung der Hexagonzerlegung beruht auf der von Bremner gegebenen Liste möglicher Zerlegungen. Eine besondere Schwierigkeit stellte dabei die automatische Festlegung der benötigten Steinerpunkte dar [Ran06].

Da getrimmte Flächen auch Löcher besitzen können, ist es notwendig, diese Zerlegungsstrategie auf mehrfach zusammenhängende Polygone zu übertragen. Es wurde zunächst der naheliegende Ansatz realisiert, bei dem mehrfach zusammenhängende Polygone in eine Anzahl einfach zusammenhängender Polygone zerlegt werden, auf die dann das beschriebene Verfahren sequentiell angewendet werden kann. Die Abbildungen 2.4 und 2.5 zeigen Ergebnisse dieses Vorgehens. Darüberhinaus gelang es uns, eine Verallgemeinerung des Abspaltungssatzes zu beweisen, die besagt, dass es möglich ist, durch Einführung von höchstens drei Kanten ein Viereck von einem mehrfach zusammenhängenden Polygon abzutrennen [RB05b]. Gegenwärtig wird untersucht, ob die Verwendung dieser Aussage eine Zerlegungsstrategie ermöglicht, die effizienter arbeitet als der zuerst genannte Ansatz.

Zur Konstruktion eines Diffeomorphismus zwischen einem konvexen (im Allgemeinen

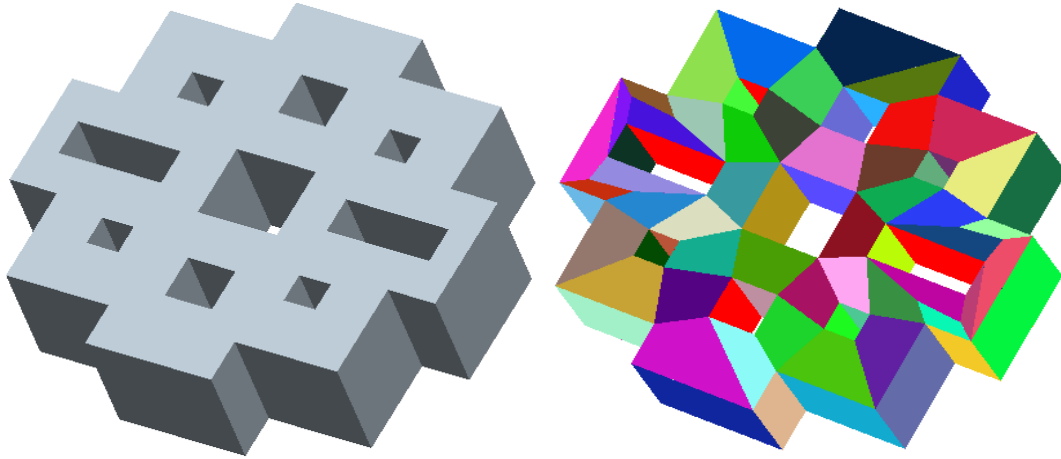


Abbildung 2.4:

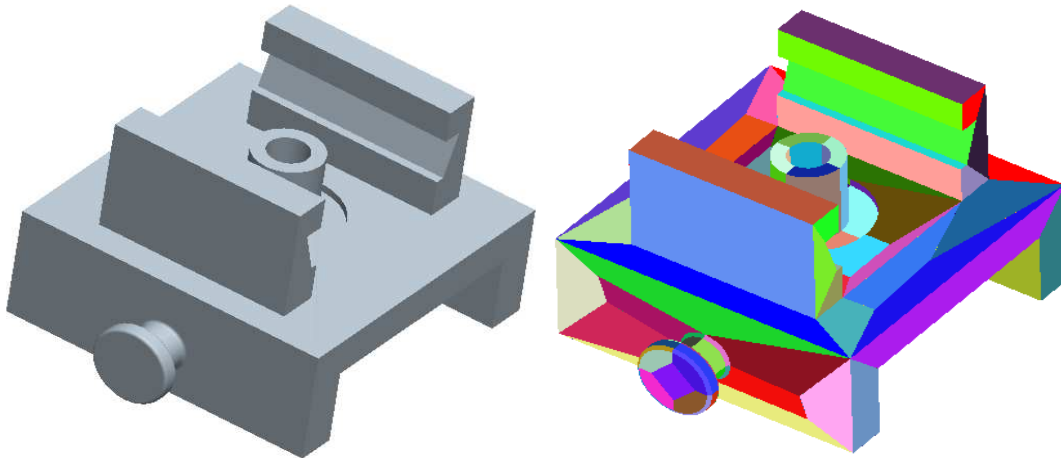


Abbildung 2.5:

gekrümmten) Viereck  $F$  und dem Einheitsquadrat wurden bisher sog. Coonsflächen eingesetzt. In [RB04] wurden für den wichtigen Fall polynomialer Randkurven notwendige und hinreichende Kriterien für die Regularität dieser Abbildungen vorgestellt. Ist die erzeugte Coonsfläche nicht regulär, so wird der benötigte Diffeomorphismus durch das folgende neuentwickelte Vorgehen erzeugt. Im Inneren des gegebenen vierseitigen Gebietes  $F$  werden weitere Kurven eingefügt. Das entstehende Kurvennetz wird dann mit einer Gordonfläche interpoliert. Für die Überprüfung der Regularität der Gordonfläche stehen in Analogie zu den Coonsflächen geeignete Kriterien zur Verfügung. Die Hauptschwierigkeit besteht somit in der automatischen Festlegung der internen Interpolationskurven. Dies geschieht durch Diskretisierung der Randkurven und Bildung eines Gitters durch Hinzunahme geeigneter Punkte  $x_{ij}$  im Innern von  $F$ . Für die Bestimmung der Positionen  $x_{ij}$  wurden zwei verschiedene Verfahren untersucht. Der erste Ansatz beruht auf der Minimierung der Dirichlet-Energie des Gitters. Der zweite Ansatz verwendet die sog. gestalterverhaltende Parametrisierung nach Floater [FH05]. Der letztgenannte Ansatz ist sehr effizient und gibt sehr gute Ergebnisse auch bei komplizierten Randkurven. Den derartig festgelegten Punkten  $x_{ij}$  werden anschließend Parameterwerte zugeordnet, so



dass die gesuchten Kurven durch Interpolation mittels kubischer B-Splines gewonnen werden können [Ran06]. Die Abb. 2.6 zeigt ein Ergebnis dieses Verfahrens.

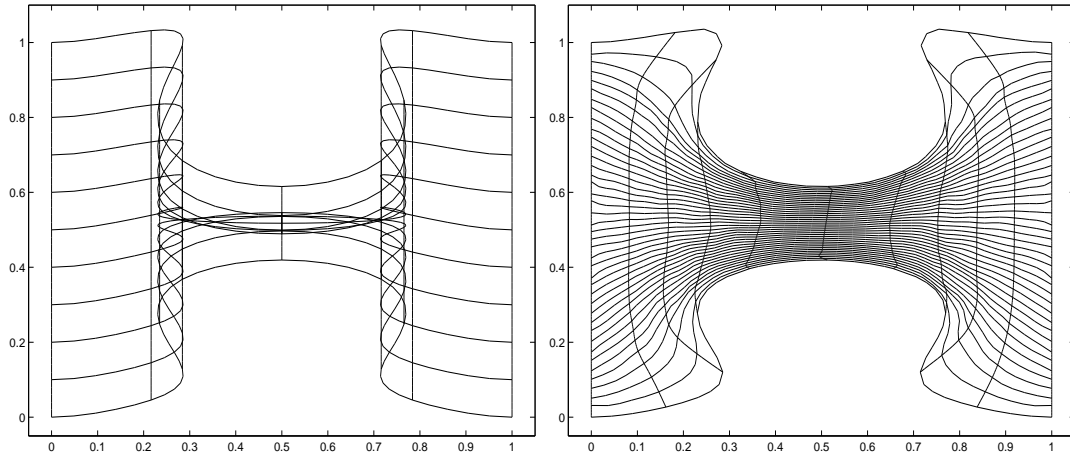


Abbildung 2.6:

Weitere im Berichtszeitraum erzielte Resultate betreffen die Approximation einer geschlossenen als Triangulierung vorliegenden Fläche durch ein Netz vierseitiger Freiformflächen. Zur Generierung der kanonischen Kurven werden zwei Standardverfahren implementiert. Der algebraische Ansatz geht von den Inzidenzmatrizen der Triangulierung aus, die zur Erzeugung der Homologiebasis in Normalform transformiert werden. Der deutlich einfachere geometrische Ansatz extrahiert die kanonischen Kurven aus einem Spannbaum der Triangulierung. Dieses Verfahren ist weniger mächtig als der erste Ansatz, da nur Kurven erzeugt werden, reicht für unsere Anwendung aber völlig aus. Aus den so erzeugten Ausgangskurven werden durch eine Längenoptimierung die letztendlich verwendeten Kurven erzeugt. Durch Abbildung der längenoptimierten kanonischen Kurven auf die Ebene erhält man ein zweidimensionales Parametergebiet für die geschlossene Oberfläche. Das 2D Parametergebiet wird anschließend in vierseitige Segmente zerlegt. Jedes dieser Segmente kann dazu verwendet werden, eine Teilfläche in Bezier- oder B-spline-Darstellung zu definieren, die einen Ausschnitt des Dreiecksnetzes approximiert. Die durch diesen Vorgang entstehende Gesamtfläche ist aus der Klasse  $C^0$  [RB05a]. Die Abbildungen 2.7 und 2.8 zeigen Ergebnisse dieses Verfahrens.

## Literaturverzeichnis

- [BHRS04] D. Bremner, F. Hurtado, S. Ramaswami, and V. Sacristn. Small strictly convex quadrilateral meshes of point sets. *Algorithmica* 38, 2:317–339, 2004.
- [DHS06] W. Dahmen, H. Harbrecht, and R. Schneider. Compression techniques for boundary integral equations - optimal complexity estimates. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 43(6):2251–2271, 2006.
- [DPS93] W. Dahmen, S. Prössdorf, and R. Schneider. Wavelet approximation methods for periodic pseudodifferential equations. part 2 - fast solution and matrix compression. *Advances in Computational Mathematics*, 1:259–335, 1993.

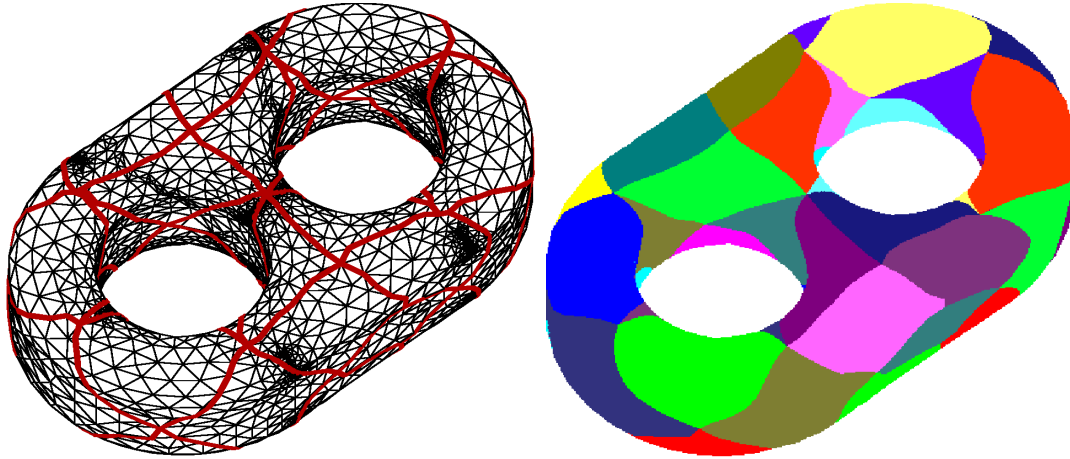


Abbildung 2.7:

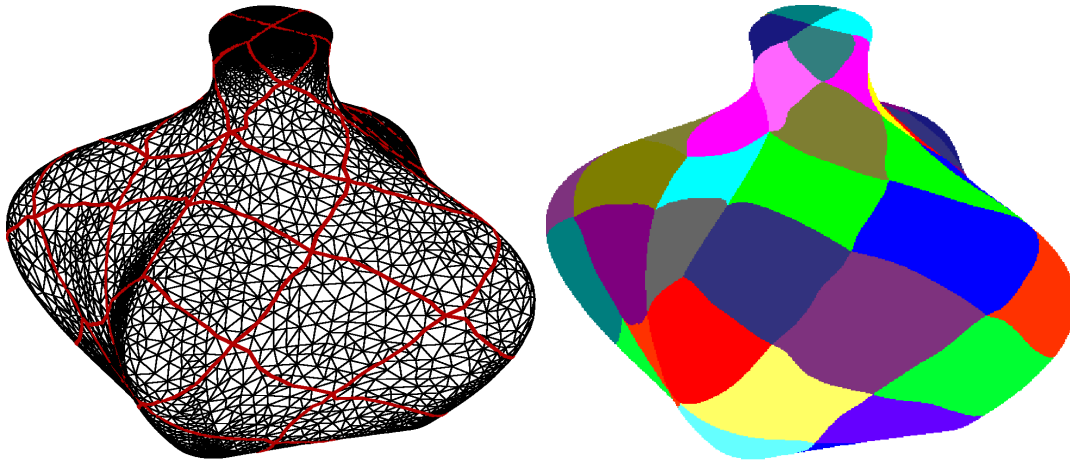


Abbildung 2.8:

- [DPS94] W. Dahmen, S. Prössdorf, and R. Schneider. Multiscale methods for pseudodifferential equations on smooth manifolds. In *Proceedings of the International Conference on Wavelets: Theory, Algorithms, and Applications*, volume 5 of *Wavelet Analysis and Applications*, pages 385–424. Academic Press, 1994.
- [FH05] M. Floater and K. Hormann. *Surface parameterization: a tutorial and survey*. Springer Verlag GmbH, 2005.
- [Mei75] G. H. Meister. Polygons have ears. *Math. Mon.*, 82:648–651, 1975.
- [Ran06] M. Randrianarivony. *Geometric Preprocessing for the efficient use of wavelet based integral equation solvers*. PhD thesis, TU Chemnitz, 2006. (in preparation).
- [RB04] M. Randrianarivony and G. Brunnett. Necessary and sufficient conditions for the regularity of a planar coons map. Preprint SFB393/04-07, TU Chemnitz, 2004.
- [RB05a] M. Randrianarivony and G. Brunnett.  $c^0$ -paving of closed meshes with quadrilateral patches. Preprint SFB393/05-17, TU Chemnitz, 2005.

- [RB05b] M. Randrianarivony and G. Brunnett. Quadrilateral removal and 2-ear theorems. *Preprint Sonderforschungsbereich 393, SFB393/05-18*, 2005.
- [Sch98] R. Schneider. *Multiskalen- und Wavelet-Matrixkompression: Analysisbasierte Methoden zur Lösung grosser vollbesetzter Gleichungssysteme*, Habilitationsschrift. PhD thesis, TH Darmstadt, 1998.
- [TW03] J. Tausch and J. White. Multiscale bases for the sparse representation of boundary integral operators on complex geometries. *SIAM J. Sci. Comput.*, 24:1610–1629, 2003.
- [vPS96] T. von Petersdorf and C. Schwab. Wavelet approximation on first kind integral equations in a polygon. *Num. Math.*, 74:479–516, 1996.

## 2.5 Offene Fragen / Ausblick

Die verbleibenden offenen Fragen betreffen im Wesentlichen die Anwendung der entwickelten Methoden auf die Beleuchtungsgleichung. Dazu sind insbesondere geeignete Verfahren zur hierarchischen Unterteilung der Geometrie unter Betrachtung der Sichtbarkeitsbedingung und effiziente Methoden zur Auswertung der Sichtbarkeitsfunktion zu entwickeln. Darüber hinaus legen die durchgeführten Arbeiten nahe, ein schnelles Verfahren zur Lösung von Integralgleichungen zu entwickeln, das auf einer Verbindung des Waveletverfahrens und der Methode der  $\mathcal{H}^2$ -Matrizen beruht.



Teilprojekt

**A11**

Gemischte Formulierungen: adaptive finite Elemente und  
parallele Löser



## 2.1 Teilprojekt A11

Gemischte Formulierungen: adaptive finite Elemente und parallele Löser

### 2.1.1 Antragsteller

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

Prof. Dr. Michael Jung, TH Dresden,

### 2.1.2 Projektbearbeiter

M.Sc. Alexander Smuglyakov, Professur Numerische Analysis

Dipl.-Math. Peter Steinhorst, Professur Numerische Analysis

## 2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Gegenstand dieses Teilprojekts sind gemischte Finite-Elemente-Diskretisierungen, wie sie bei speziellen Anwendungen in der Festkörpermechanik auftreten. Im Zusammenarbeit mit Tp. D1 soll sich wesentlich auf fast inkompressible Materialien (Anwendung in Biologie/Medizin) und auf piezoelektrische Materialien konzentriert werden.

Wir hatten uns zum Ziel gestellt, effiziente Simulationssoftware zu entwickeln, die auf theoretisch fundierten effizienten, d. h. adaptiven und lösungsangepassten, parallelen Lösungsstrategien beruht.

## 2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

### 2.3.1 Inkompressibilität

Für effiziente Simulationen bei dieser Aufgabenklasse müssen aufgrund Analogie zum Stokes-Problem Elemente mit erfüllter Babu'ska – Brezzi – Bedingung benutzt werden, deshalb kamen hier die bekannten Taylor-Hood-Elemente zur Anwendung. Das bereits für das Stokes-Problem bestehende adaptive Experimentalprogramm SPC-PM-AdSt wurde zum Programm SPC-PM-AdMix modifiziert, was einige Anpassungen erforderlich machte. Anschließend sollten sowohl der Löser als auch der Fehlerschätzer getestet bzw. im Hinblick auf mögliche Verbesserung untersucht werden. Ein prinzipieller Nachteil des genutzten Lösers (Bramble-Pasciak-CG) ist die Abhängigkeit von zwei zu wählenden Konstanten, zu deren Wahl bisher nur empirische Untersuchungen vorlagen.

### 2.3.2 Piezoelektrische Probleme

Bei der Kopplung von Verformung und elektrischem Potential in einer analogen Sattelpunktsformulierung war hauptsächlich abzuklären ob und wie eine analoge Babu'ska – Brezzi – Bedingung zu erfüllen ist. Danach richtet sich die Wahl der Finiten Elemente. Zum zweiten ist eine Modifikation des Lösers (Bramble-Pasciak-CG) vorzusehen, weil die Ordnung des Differentialoperators zum Potential  $\varphi$  jetzt 2 und nicht wie im Modellfall der Stokes-Gleichung 0 ist.

## 2.4 Ergebnisse

### 2.4.1 Inkompressibilität

Das als Modifikation von SPC-PM-AdSt entstandene Experimentalprogramm SPC-PM-AdMix funktioniert für Elastizitätsprobleme, bei denen auch inkompressible Materialien ( $\nu = 0.5$ ) im gesamten Gebiet oder Teilgebieten zugelassen sind. Der Löser konnte dabei von Stokes fast 1:1 übernommen werden, lediglich musste die für kompressible Materialien nichtverschwindende Druckmassen-Teilmatrix mit hinzugenommen werden (fußend auf [BP88, MS01]). Ein neues Ergebnis konnte im Hinblick auf die problemangepasste Wahl einer Konstanten gefunden werden. Für die Wahl einer geeigneten Konstante für die Gewichtung der Blöcke im Bramble-Pasciak-CG wurde in [MSt05] eine Strategie beschrieben und an numerischen Testbeispielen untersucht. Unter Voraussetzung guter Vorkonditionierer (z.B. der verwendete Hierarchische-Basen-Vorkonditionierer nach Yserentant in 2D) für den Steifigkeitsanteil des gemischten Problems ist es möglich, durch Berechnung eines Rayleighquotienten einen näherungsweise optimalen Wert für den Gewichtungsparameter zu erhalten. Betrachtungen von Rechengenauigkeit und Iterationszahlen an Testbeispielen motivieren die gewählte Strategie, theoretisch wird diese durch eine Konditionsabschätzung unterlegt. Der Fehlerschätzer wurde analog zum kompressiblen Fall aufgebaut, wobei hier die aufgeteilte Berechnung des Spannungstensors  $\sigma$  in der gemischten Formulierung zu beachten war. Eine Erweiterung von SPC-PM-AdMix auf dreidimensionale Probleme konnte wegen des verkürzten Zeitrahmens bisher leider nicht fertiggestellt werden.

### 2.4.2 Piezoelektrische Probleme

Die theoretische Fragestellung nach der Notwendigkeit einer analogen Babu'ska – Brezzi – Bedingung konnte geklärt werden. Da im piezoelektrischen Fall die Systemstruktur

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^T & -C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \varphi \end{pmatrix}$$

mit koerzivem Teil  $C$  besteht, lässt sich das System auch in der unsymmetrischen, aber positiven Struktur

$$\begin{pmatrix} A & B \\ -B^T & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \varphi \end{pmatrix}$$



aufschreiben. Es können daher prinzipiell beliebige Elemente für Verschiebung und elektrisches Potential gewählt werden, die Babuška – Brezzi – Bedingung muss nicht notwendigerweise erfüllt werden. Aufgrund der gleichen Ordnung der Differentialoperatoren bieten sich Kombinationen gleichartiger Elemente an, z.B.  $\mathcal{P}^1 - \mathcal{P}^1$ ,  $\mathcal{P}^2 - \mathcal{P}^2$  oder  $Q^2 - Q^2$ .

Für den einfachsten Fall (im piezoelektrischen ist dies linear, transversal isotropes Materialverhalten) konnte durch Modifizierung des zweidimensionalen Experimentalprogramms SPC-PM-AdMix eine Variante SPC-PM-AdPiez erstellt werden, welche für erste Testrechnungen zur Verfügung steht. Noch aussteht die Wahl geeigneter Vorkonditionierungen (die Variante gleichartiger Behandlung beider Teile mit Multilevelverfahren erscheint hier erfolgversprechend) sowie eine Anpassung des Fehlerschätzers, um effektive adaptive Rechnungen zu ermöglichen.

## Literaturverzeichnis

- [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.
- [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.
- [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.*
- [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).
- [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.
- [MSt05] A. Meyer and P. Steinhorst. Überlegungen zur Parameterwahl im Bramble-Pasciak-CG für gemischte FEM. Preprint SFB393/05-07, TU Chemnitz, 2005.
- [Ran01] M. Randrianarivony. Stability of mixed finite element methods with anisotropic meshes. Master’s thesis, TU Chemnitz, 2001.

- [SK02] M. Scherzer and M. Kuna. Combined analytical and numerical solution of 2D interface corner configurations between dissimilar piezoelectric materials. *Int. J. Fracture* 127: 61–99, 2004.
- [SKS02] F. Shang, M. Kuna and M. Scherzer. A Finite Element procedure for three-dimensional analyses of thermopiezoelectric structures in static applications. *Technische Mechanik*, Band 22, Heft 3: 235–243, 2002.
- [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.

Teilprojekt

**A12**

Besondere FEM für Kontaktprobleme / Mortaring /  
Randkonzentriertheit / Projektionen



## 2.1 Teilprojekt A12

Besondere FEM für Kontaktprobleme / Mortaring / Randkonzentriertheit / Projektionen

### 2.1.1 Antragsteller

Prof. Bernd Heinrich  
12.10.1943  
Angewandte Mathematik  
Fak. für Mathematik  
TU Chemnitz  
09107 Chemnitz  
Tel.: (0371) 531-2659  
Fax: (0371) 531-2657  
b.heinrich@mathematik.  
tu-chemnitz.de

Prof. Arnd Meyer  
08.03.1952  
Numerische Analysis  
Fak. für Mathematik  
TU Chemnitz  
09107 Chemnitz  
(0371) 531-2659  
(0371) 531-2657  
a.meyer@mathematik.  
tu-chemnitz.de

### 2.1.2 Projektbearbeiter

Mitarbeiter der Grundausrüstung:

Prof. Bernd Heinrich	(Angewandte Mathematik)
Prof. Arnd Meyer	(Numerische Analysis)
Dipl.-Math. techn. Roman Unger	(Numerische Analysis)
Dr. Beate Jung	(Angewandte Mathematik, 2005)

Mitarbeiter der Ergänzungsausrüstung:

Dipl.-Math. techn. Roman Unger (halbe Stelle)  
Dipl.-Math. techn. Kornelia Pönitz (halbe Stelle/Sept. 2004 bis 2005)  
Dipl.-Math. Tino Eibner

## 2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

### Nitsche–Mortaring

Bei der numerischen 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  $\lambda$  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 im aktuellen Berichtszeitraum in den folgenden wesentlichen Linien weiter 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
2. Behandlung des Falles von komplizierter Geometrie des Randes  $\partial\Omega$  (Ecken, Kanten), kleiner Diffusionskoeffizienten und daraus resultierender Lösungssingularitäten sowie Anisotropie in der Lösung  $u$  des Randwertproblems, nichtkonforme Kopplung unregelmäßiger Netze mit lokal verfeinerten (graduierten) sowie anisotropen Netzen
3. Kombination der FE-Schemata nach Nitsche mit der Fourier-FEM zur effektiven Behandlung dreidimensionaler Randwertaufgaben in axialsymmetrischen Gebieten

## Kontaktsimulation

Das allgemeine Kontaktproblem sollte in seinen natürlichen Teilschritten innerhalb dieses Teilprojekts als auch kooperativ mit D1 bearbeitet werden. Basis waren die existierenden adaptiven Programmrealisierungen SPC-PM2Ad / SPC-PM3Ad, mit denen das elastische Signorini-Problem bei ebenem oder gekrümmtem Hindernis mit einem Aufwand lösbar ist, der dem einer einfachen linear elastischen Aufgabe gleicht.

Im vorliegenden Teilprojekt sollte vorrangig die Verbesserung und breitere Anwendbarkeit und Kombination mit dem Nitsche-type mortaring vorgesehen werden.

Die wichtige Verallgemeinerung zum Mehrkörperkontakt kann mit Hilfe der „Projektionstechnik“ oder auch durch Mortar-Technik vorgenommen werden.

In beiden Fällen ist die analytische Formulierung dann relativ klar, wenn die Information von „Teilränder in Kontakt“ im ersten Fall und „Knoten näherungsweise in Kontakt“ im zweiten Fall gegeben ist.

Deshalb spielte neben der theoretischen Durchdringung dieser Techniken ein „Lernalgorithmus“ eine wichtige implementierungstechnische Rolle, der oben genannte Informationen beschaffen (besser: im adaptiven Prozess „buchführen“) muss.

## Randkonzentrierte $hp$ -FEM

Die randkonzentrierte Finite-Element-Methode war Forschungsschwerpunkt des ehemaligen Teilprojektes A13. Mit ihrer a priori Vorgabe eines zum Rand hin verfeinerten Netzes und hohen Polynomgraden im Inneren ist die randkonzentrierte  $hp$ -FEM speziell auch für die Behandlung von Kontakt- und Steuerungsproblemen geeignet. Ziel sollte daher sein, die Methode der randkonzentrierten FEM in das Teilprojekt A12 zu integrieren und für das Lösung realitätsnaher Kontaktprobleme anzuwenden. Eine Hürde die es hierbei unter anderem noch zu überwinden galt, war die Entwicklung schneller Löser.

## 2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

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

In der Restlaufzeit des SFB (Mitte 2004/2005) bestand ein wesentliches Ziel dieser Teilaufgabe in der Analyse der Finite-Elemente-Methode nach Nitsche (Nitsche-Mortaring) für weitere Modellaufgaben mit elliptischer Differentialgleichung zweiter Ordnung. Die zu untersuchenden Problemklassen sollten umfassen:

- die Poissongleichung in dreidimensionalen axialsymmetrischen Gebieten
- singular gestörte Reaktions-Diffusions-Probleme auf beliebigen Polygonegebieten
- die Lamé-Gleichung mit gemischten Randbedingungen über polygonalen Gebieten
- Vergleich der Finite-Elemente-Approximationen nach Nitsche mit Finite-Elemente-Approximationen der inneren Penalty-Methode

Das Finite-Elemente-Schema nach Nitsche war als nichtkonforme Finite-Elemente-Approximation auf nichtkonsistenten Teilgebietstriangulationen zu entwickeln und aus der Sicht der Numerischen Analysis mathematisch zu begründen. 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 graduerter 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.

### 2.3.2 Teilaufgabe: Kontaktbehandlung

Bei der Bearbeitung des Kontaktproblems zweier elastischer Körper miteinander liegt die Schwierigkeit nicht in der Definition der geeigneten Projektion, sondern vor allem im Datenmanagement zum Auffinden der Partnerknoten und Partnerkanten, die miteinander in Kontakt treten und damit für die Definition der Projektion zuständig sind.

In diesem Kapitel soll eine allgemeine Herleitung der geeigneten Projektion und Betrachtung der Referenzimplementierung für den zweidimensionalen Fall erfolgen.

#### 2.1.3.1 Der Eindringungstest

Wie auch beim Kontakt eines festen Körpers mit einem unverformbaren Hindernis ist der erste Schritt des Verfahrens die Ermittlung aller kontaktverdächtigen Knoten, die tatsächlich eingedrungen sind.

Dies ist hier etwas aufwändiger, da man nicht von einem festen (unverformbaren) Hindernis ausgeht, sondern der jeweils andere Körper das Hindernis darstellt.

Im folgenden werden einige Varianten dieser Tests aufgezeigt und ihre Besonderheiten betrachtet.

#### 2.1.3.2 Eindringungstest über Kantenschnitte

Ziel des Tests ist es, einander schneidende Kanten wie in Abbildung 2.1 zu ermitteln. Der andere (denkbare) Fall, dass sich Kanten „überschlagen“ (siehe Abbildung 2.2) muss nicht gesondert betrachtet werden, denn ein Kantenüberschlag ist nur möglich, wenn irgendwo ein Kantenschnitt vorliegt.

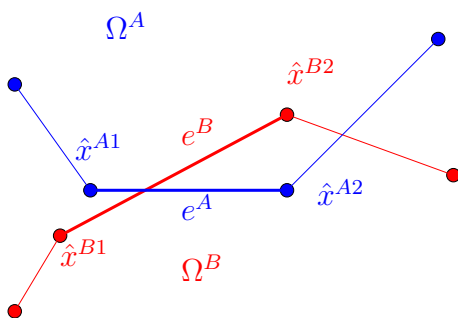


Abbildung 2.1: Kantenschnitt

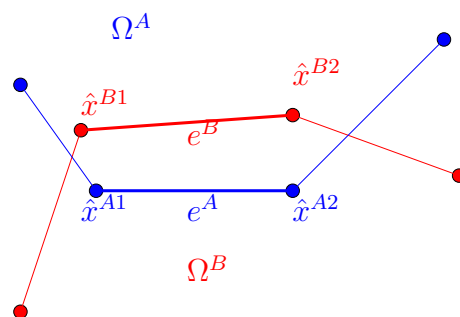


Abbildung 2.2: Kantenüberschlag



Somit wird ein in groben Verfeinerungslevels vorliegender Kantenüberschlag durch das Auffinden und Bearbeiten der Kantenschnitte aufgelöst.

Prinzipiell kann man jede Kante aus den kontaktverdächtigen Randstücken  $\Gamma_C^s$  der beiden Körper  $\Omega^A$  und  $\Omega^B$  mit jeder des anderen Körpers testen, hat damit aber einen in der Anzahl der Kanten in  $\Gamma_C^s$  quadratischen Aufwand. Eine Verbesserung ist durch Erlernen von Nachbarschaftsbeziehungen möglich.

Zur Herleitung des Testes ob sich die Kanten  $e^A$  und  $e^B$  schneiden, seien mit  $\hat{x}$  die verschobenen Knoten bezeichnet ( $\hat{x} := x + u$ ) und  $e^A, e^B$  die daraus resultierenden Kanten:

$$\begin{aligned} e^A & : \begin{bmatrix} \hat{x}_1^{A1} \\ \hat{x}_2^{A1} \end{bmatrix} \implies \begin{bmatrix} \hat{x}_1^{A2} \\ \hat{x}_2^{A2} \end{bmatrix} \\ e^B & : \begin{bmatrix} \hat{x}_1^{B1} \\ \hat{x}_2^{B1} \end{bmatrix} \implies \begin{bmatrix} \hat{x}_1^{B2} \\ \hat{x}_2^{B2} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Mit Definition der beiden Kantenvektoren

$$\begin{aligned} v^A & := \hat{x}^{A2} - \hat{x}^{A1} \\ v^B & := \hat{x}^{B2} - \hat{x}^{B1} \end{aligned}$$

sind die Kanten darstellbar als

$$\begin{aligned} e^A & : \hat{x}^{A1} + \lambda v^A \quad \lambda \in [0, 1] \\ e^B & : \hat{x}^{B1} + \mu v^B \quad \mu \in [0, 1] \end{aligned}$$

und das Ermitteln des Schnittpunktes der beiden Kanten erfordert die Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\begin{bmatrix} v^A & -v^B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{x}^{B1} - \hat{x}^{A1} \end{bmatrix} .$$

Im Falle, dass die Systemmatrix singulär ist, verlaufen die Kanten parallel und brauchen nicht weiter betrachtet zu werden.

Im regulären Fall existiert eine eindeutige Lösung für  $\lambda$  und  $\mu$ , falls

$$0 \leq \lambda, \mu \leq 1$$

gilt, so schneiden sich die beiden Kanten und der Test ist positiv.

### 2.1.3.3 Eindringungstest über Schnitte von Verschiebungen und Kanten

Dieser Test betrachtet den Schnitt zwischen dem Verschiebungsweg eines Kantenmittenknotens des einen Körpers und einer Kante des anderen Körpers.

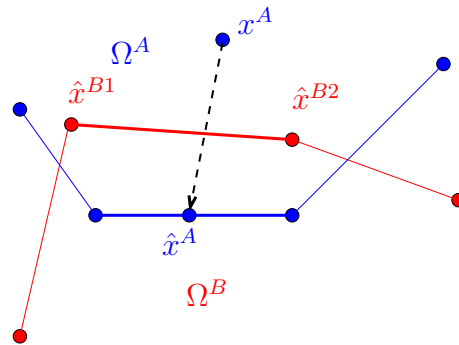


Abbildung 2.3: Variante 2 des Eindringungstestes

Dazu wird, wie in Abbildung 2.3 skizziert, ein Schnittpunkt zwischen einer Kante  $(\hat{x}^{B1}, \hat{x}^{B2})$  und dem Verschiebungsvektor  $(x^A, \hat{x}^A)$  über die Lösung eines auf analoge Weise wie eben hergeleiteten  $2 \times 2$  Gleichungssystems für zwei Parameter  $\lambda$  und  $\mu$  bestimmt. Im Falle

$$0 \leq \lambda, \mu \leq 1$$

ist der Test wiederum positiv und aus den zueinandergehörigen Anfangs-, Mitten- und Endknoten der beiden beteiligten Kanten werden Knotenpaare gebildet.

#### 2.1.3.4 Vergleich der beiden Varianten

Prinzipiell sind beide Varianten geeignet, das Kontaktproblem zweier elastischer Körper zu behandeln.

Aus numerischer Sicht ist aber die zweite Variante, die mit Schnitten von Verschiebungen und Kanten operiert zu bevorzugen, da in der anderen Variante bei fast parallelen Kanten die Berechnung des Kantenschnittpunkts und Auswertung numerisch instabil wird. Insbesondere bei Erreichen einer guten Auflösung der Kontaktzone tritt genau diese Kantenparallelität auf und eine weitere genaue Berechnung wird erschwert.

Dieses Problem hat sich auch bei der Implementierung der beiden Varianten gezeigt, weshalb nach numerischen Experimenten mit beiden Varianten der letzteren der Vorzug gegeben wurde.

Beispielrechnungen zum Kontakt zweier elastischer Körper und zum Kontakt eines elastischen Körpers mit sich selbst sind in den Anhängen 2.4.2 und 2.4.2 zu finden.

#### 2.1.3.5 Definition des Projektors

Für alle die Knotenpaare, für die der Eindringungstest positiv verlaufen ist, wird eine jeweilige gemeinsame Tangentenrichtung  $s$  mit ihrer Normalenrichtung  $n$  und ein auf die Tangente abbildender Projektor festgelegt sowie die Startlösung derart korrigiert, dass

für zwei korrespondierende Knoten  $x^A \in \Omega^A$  und  $x^B \in \Omega^B$

$$\begin{aligned} x^A + \tilde{u}^A &= x^B + \tilde{u}^B \\ \text{mit } u_0^A &:= \tilde{u}^A \\ u_0^B &:= \tilde{u}^B \end{aligned}$$

gilt.

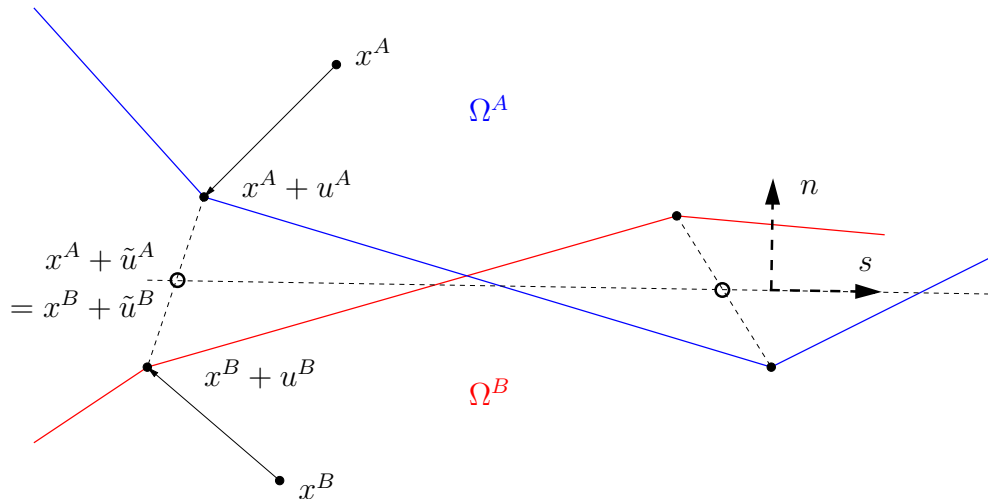


Abbildung 2.4: Korrektur der Verschiebung für das Zweikörperproblem

Die beiden korrigierten Verschiebungen  $\tilde{u}^A$  und  $\tilde{u}^B$  ergeben sich wie auch in Abbildung 2.4 dargestellt durch Ausmittlung der vorhandenen Verschiebungen über die Beziehung

$$x^A + \tilde{u}^A = x^B + \tilde{u}^B = \frac{1}{2}(x^A + u^A) + \frac{1}{2}(x^B + u^B)$$

als

$$\begin{aligned} \tilde{u}^A &= \frac{1}{2}(x^B - x^A) + \frac{1}{2}(u^A + u^B) \\ \tilde{u}^B &= \frac{1}{2}(x^A - x^B) + \frac{1}{2}(u^A + u^B) \end{aligned}$$

Analog wird das andere Knotenpärchen der Kante behandelt und somit die gemeinsame Tangenten- und Normalenrichtung festgelegt.

### 2.1.3.6 Betrachtung des Projektors im $2d$ -Fall

Das mit dieser Startlösung beginnende CG-Verfahren würde nun im unrestringierten Falle Korrekturterme  $w^A, w^B \in \mathbb{R}^2$  berechnen, zusammen hätte man also ein Problem mit 4 Freiheitsgraden.

Um aber die Kontaktbedingung zu erfüllen, wird es derart restringiert, dass die berechneten Korrekturterme  $w^A, w^B$  für  $u^A, u^B$  den folgenden Bedingungen genügen:

$$w^A = \lambda s + \nu n \quad (2.1)$$

$$w^B = \mu s + \nu n \quad (2.2)$$

was bedeutet, dass zwar eine unabhängige Verschiebung entlang der Tangentenrichtung  $s$  möglich ist, jedoch in Normalenrichtung  $n$  nur eine gemeinsame Verschiebung für Knoten A und B zulässig ist.

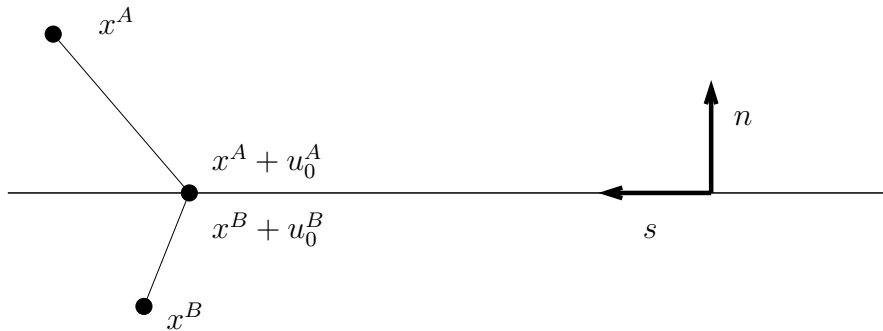


Abbildung 2.5: Konforme Startlösung für das Zweikörperproblem

Man hat also an Stelle von 4 Freiheitsgraden nur noch 3 und braucht einen geeigneten Projektor, der diesen Restriktionen genügt.

Die folgendermaßen definierte Abbildung

$$P = \begin{bmatrix} I - \frac{1}{2}nn^T & \frac{1}{2}nn^T \\ \frac{1}{2}nn^T & I - \frac{1}{2}nn^T \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

ist ein Projektor mit

$$P : \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{U} \subset \mathbb{R}^4 \quad \dim(\mathbb{U}) = 3$$

der die in (2.1) und (2.2) geforderten Bedingungen erfüllt.

Die den Projektor definierende Eigenschaft

$$P^2 = P$$

kann man durch einfaches Nachrechnen von  $P \cdot P$  unter Beachtung von  $n^T n = 1$ , da  $n$  normiert ist, zeigen.

Um nun zu zeigen, dass die geforderten Eigenschaften erfüllt werden, betrachten wir für  $w^A, w^B \in \mathbb{R}^2$  das Bild von  $\begin{bmatrix} w^A \\ w^B \end{bmatrix}$ .

Für  $w^A, w^B \in \mathbb{R}^2$  existieren eindeutig die orthogonalen Zerlegungen

$$w^A = \lambda s + \nu_1 n$$

$$w^B = \mu s + \nu_2 n$$

Ziel ist es zu zeigen, dass

$$P \begin{bmatrix} w^A \\ w^B \end{bmatrix} \quad \text{als} \quad \begin{bmatrix} \lambda s \\ \mu s \end{bmatrix} + \nu \begin{bmatrix} n \\ n \end{bmatrix}$$

darstellbar ist.

$$\begin{aligned} P \begin{bmatrix} w^A \\ w^B \end{bmatrix} &= P \begin{bmatrix} \lambda s + \nu_1 n \\ \mu s + \nu_2 n \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} (I - \frac{1}{2}nn^T)(\lambda s + \nu_1 n) + \frac{1}{2}nn^T(\mu s + \nu_2 n) \\ \frac{1}{2}nn^T(\lambda s + \nu_1 n) + (I - \frac{1}{2}nn^T)(\mu s + \nu_2 n) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Ausmultiplizieren und erkennen, dass alle Terme mit  $n^T s$  wegen der Orthogonalität von  $n$  und  $s$  verschwinden und sich Terme der Art  $\frac{1}{2}\nu_i nn^T n$  wegen  $n^T n = 1$  zu  $\frac{1}{2}\nu_i n$  vereinfachen ergibt:

$$\begin{aligned} &= \begin{bmatrix} \lambda s + \nu_1 n - \frac{1}{2}\nu_1 n + \frac{1}{2}\nu_2 n \\ \mu s + \frac{1}{2}\nu_1 n + \nu_2 n - \frac{1}{2}\nu_2 n \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \lambda s + \frac{1}{2}\nu_1 n + \frac{1}{2}\nu_2 n \\ \mu s + \frac{1}{2}\nu_1 n + \frac{1}{2}\nu_2 n \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \lambda s \\ \mu s \end{bmatrix} + \nu \begin{bmatrix} n \\ n \end{bmatrix} \quad \text{mit} \quad \nu := \frac{1}{2}(\nu_1 + \nu_2) \end{aligned}$$

Also erfüllt das Bild  $Pw$  eines beliebigen Vektors  $w \in \mathbb{R}^4$  tatsächlich die geforderten Bedingungen.

### 2.1.3.7 Gemeinsamkeiten zum 3d-Fall

Für 3d-Probleme kann man den Projektor ganz analog definieren, man fordert wiederum, dass alle Korrekturen  $w^A$ ,  $w^B$  aus einem nun 2-dimensionalen Unterraum  $\mathbb{U}$  kommen müssen und ein gemeinsames Verschieben beider Knoten in Normalenrichtung zu diesem Unterraum zulässig ist.

Setzt man diesen Unterraum  $\mathbb{U}$  als lineare Hülle von  $s_1, s_2 \in \mathbb{R}^3$  an und sei  $n \in \mathbb{R}^3$  die Normale auf  $\mathbb{U}$  also sein orthogonales Komplement, so ergibt sich analog zur den Forderungen (2.1) und (2.2)

$$w^A = \lambda_1 s_1 + \lambda_2 s_2 + \nu n$$

$$w^B = \mu_1 s_1 + \mu_2 s_2 + \nu n$$

also bleiben 5 Freiheitsgrade und  $P : \mathbb{R}^6 \rightarrow \mathbb{U} \subset \mathbb{R}^6$  mit  $\dim(\mathbb{U}) = 5$  ist der analoge Projektor (2.3) mit dem Unterschied, dass hier  $n \in \mathbb{R}^3$  gilt.

## 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. *M<sup>2</sup>AN 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

Die Hauptbearbeiterin dieser Teilaufgabe, Frau Dipl.-Math.techn. Kornelia Pönitz, konnte nach Schwangerschaft/Mutterschaftsurlaub erst im Zeitraum September 2004 bis 2005 (halbe Stelle) wieder an der Projektarbeit teilnehmen. Andererseits war es möglich, dass Frau Dr. Beate Jung an diesem Thema mitgearbeitet hat. Die Resultate zur Teilaufgabe sind in [HP02, HN03, Hei02, Hei03, HJ04, HJ06, HP03, HP05, Poe05] dargelegt.

Einige Resultate werden hier nochmals kurz in skizzierter Form dargelegt. Bezüglich einer ausführlichen Ergebnisbeschreibung wird auf den umfangreichen Text im Teil 2.4 Ergebnisse des SFB-Berichtes 2004 verwiesen.

#### Singulär gestörte Reaktions-Diffusions-Probleme

In [HP03, HP05, Poe05] wird das Nitsche Mortaring für singulär gestörte Diffusions-Reaktionsprobleme vom Typ  $-\varepsilon^2 \Delta u + cu = f$  in  $\Omega$ ,  $u = 0$  auf  $\partial\Omega$ , weiterentwickelt, wobei  $\Omega$  jetzt ein allgemeines Polygonegebiet ist. Das bei kleinem Parameter  $\varepsilon$  ( $0 < \varepsilon \ll 1$ ) entstehende Randschichtgebiet der Breite  $\mathcal{O}(\varepsilon|\ln\varepsilon|)$  wird mit anisotropen Dreiecken vernetzt, das innere Restgebiet mit isotropen Dreiecken. Die Umgebung einspringender Ecken wird mit gradierten Dreiecken vernetzt, wobei das Maß der Graduierung vom Singularitätsexponenten abhängt. Am Interface  $\Gamma$  der Gebietszerlegung 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 sind in [HP03, HP05, Poe05] für Rechtecke und Polygonegebiete  $\Omega$  sowie reguläre und nun auch singuläre Lösungen  $u \notin H^2(\Omega)$  dargelegt und werden durch numerische Beispiele illustriert.

Betrachtet wird das Modellproblem einer Reaktions-Diffusions Gleichung auf einem Polygonebiet  $\Omega$  wie folgt:

$$\begin{aligned} Lu := -\varepsilon^2 \Delta u + cu &= f \quad \text{in } \Omega \subset \mathbb{R}^2 \\ u &= 0 \quad \text{on } \partial\Omega. \end{aligned} \quad (2.4)$$

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  $\varepsilon$ ,  $0 < \varepsilon \ll 1$ , zeigt die Lösung  $u$  i.a. Randschichtverhalten, in den einspringenden Ecken auch Singularitätsverhalten. Das Gebiet  $\Omega$  wird wieder in nichtüberlappende Teilgebiete  $\Omega_1$  und  $\Omega_2$  zerlegt, so dass die RWA äquivalent zu folgender Aufgabe ist. Finde  $u = (u^1, u^2)$  derart, dass die Gleichungen

$$\begin{aligned} -\varepsilon^2 \Delta u^i + cu^i &= f^i \quad \text{in } \Omega_i, & u^i &= 0 \quad \text{auf } \partial\Omega_i \cap \partial\Omega, & \text{für } i = 1, 2, \\ \frac{\partial u^1}{\partial n_1} + \frac{\partial u^2}{\partial n_2} &= 0 \quad \text{auf } \Gamma, & u^1 &= u^2 \quad \text{auf } \Gamma, \end{aligned} \quad (2.5)$$

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  $V^i := \{v^i : v^i \in H^1(\Omega_i), v^i|_{\partial\Omega_i \cap \partial\Omega} = 0\}$  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.

Der Finite-Elemente-Raum  $V_h^i$  (Unterraum von  $V^i$ ) von Funktionen  $v^i$  auf  $\Omega_i$  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  $\gamma$  sowie reelle Parameter  $\alpha_1, \alpha_2$  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:

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_h(u_h, v_h) &:= \sum_{i=1}^2 \left( \varepsilon^2 (\nabla u_h^i, \nabla v_h^i)_{\Omega_i} + (cu_h^i, v_h^i)_{\Omega_i} \right) - \left\langle \alpha_1 \varepsilon^2 \frac{\partial u_h^1}{\partial n_1} - \alpha_2 \varepsilon^2 \frac{\partial u_h^2}{\partial n_2}, v_h^1 - v_h^2 \right\rangle_{\Gamma} \\ &\quad - \left\langle \alpha_1 \varepsilon^2 \frac{\partial v_h^1}{\partial n_1} - \alpha_2 \varepsilon^2 \frac{\partial v_h^2}{\partial n_2}, u_h^1 - u_h^2 \right\rangle_{\Gamma} + \varepsilon^2 \gamma \sum_{E \in \mathcal{E}_h} h_E^{-1} (u_h^1 - u_h^2, v_h^1 - v_h^2)_E, \\ \mathcal{F}_h(v_h) &:= \sum_{i=1}^2 (f, v_h^i)_{\Omega_i}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

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  $\gamma$  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

$$\mathcal{B}_h(u_h, v_h) = \mathcal{F}_h(v_h) \quad \forall v_h \in V_h. \quad (2.7)$$

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. In den einspringenden Ecken wird das Netz entsprechend dem kleinsten Singularitätsexponenten graduiert. Für Details siehe [HP03, HP05, Poe05]. Zur Herleitung der Stabilität der Bilinearform  $\mathcal{B}_h(\cdot, \cdot)$  führen wir die diskrete Energie-ähnliche Norm  $\|\cdot\|_{1,h}$  ein, die von  $\varepsilon^2$ ,  $c(x)$  und vom Netz abhängt:

$$\|v_h\|_{1,h}^2 = \sum_{i=1}^2 \left( \varepsilon^2 \|\nabla v_h^i\|_{0,\Omega_i}^2 + \|\sqrt{c}v_h^i\|_{0,\Omega_i}^2 \right) + \varepsilon^2 \sum_{E \in \mathcal{E}_h} h_E^{-1} \|v_h^1 - v_h^2\|_{0,E}^2. \quad (2.8)$$

In dieser Norm können Stabilität und Beschränktheit der Bilinearform gleichmäßig bezüglich  $\varepsilon$  und  $h$  bewiesen werden. Die Fehlerabschätzungen basieren auf der in [HP03, HP05, Poe05] bewiesenen Ungleichung

$$\|u - u_h\|_{1,h} \leq C \|u - I_h u\|_{h,\Omega}, \quad (2.9)$$

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:

$$\begin{aligned} \|v\|_{h,\Omega}^2 &= \sum_{i=1}^2 \left( \varepsilon^2 \|\nabla v^i\|_{0,\Omega_i}^2 + \|\sqrt{c}v^i\|_{0,\Omega_i}^2 + \varepsilon^2 \sum_{E \in \mathcal{E}_h} h_E \left\| \alpha_i \frac{\partial v^i}{\partial n_i} \right\|_{0,E}^2 \right) \\ &\quad + \varepsilon^2 \sum_{E \in \mathcal{E}_h} h_E^{-1} \|v^1 - v^2\|_{0,E}^2. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Unter der Annahme realistischer Glattheitsvoraussetzungen über die Lösung  $u$  in Abhängigkeit von  $\varepsilon$ , vergl. etwa [Ape99], kann die folgende Abschätzung für den Fehler  $u - u_h$  ( $u_h$  von (2.7)) bewiesen werden, die zugleich die Konvergenz gleichmäßig bezüglich des Parameters  $\varepsilon$  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 durch numerische Beispiele wird auf [HP03, HP05, Poe05] verwiesen.

## Die Fourier-Finite-Elemente-Methode mit Nitsche-Mortaring

Für die effiziente Behandlung von RWA in 3D werden häufig sowohl Methoden zur Dimensionsreduktion als auch Gebietszerlegungsmethoden angewendet. Beide Methoden ermöglichen die Parallelisierung der numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen.

Eine Kombination der sog. Fourier-Finite-Elemente-Methode (vgl. [Hei96, HJ04, HJ06]) mit der Nitsche-Finite-Elemente-Methode als Mortar-Methode (siehe auch [HP02, HJ04, HJ06]) wurde für die Poisson-Gleichung mit homogenen Dirichletrandbedingungen:

$$-\Delta_3 \hat{u} := -\sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x_i^2} = \hat{f} \quad \text{in } \hat{\Omega}, \quad \hat{u} = 0 \quad \text{auf } \partial \hat{\Omega}, \quad \hat{\Omega} \in \mathbb{R}^3 \quad (2.11)$$

untersucht. Dabei sei  $\widehat{\Omega}$  ein beschränktes, axialsymmetrisches Gebiet, und die Punktmenge  $\widehat{\Omega} \setminus \Gamma_0$  ( $\Gamma_0$ : der in der  $x_3$ -Achse enthaltene Teil von  $\widehat{\Omega}$ ) werde durch Rotation einer polygonalen Meridianebene  $\Omega_a$  um die  $x_3$ -Achse erzeugt, siehe Abbildung 2.6(a).

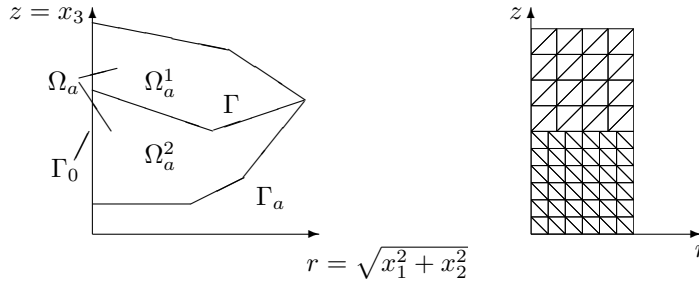


Abbildung 2.6: (a) Gebiet  $\Omega_a$  mit Teilgebieten; (b) Non-matching mesh

Im weiteren wird davon ausgegangen, dass die Geometrie des Gebietes  $\widehat{\Omega}$  die Voraussetzungen erfüllt um eine reguläre Lösung (d.h.  $\hat{u} \in H^2(\widehat{\Omega})$ ) des Randwertproblems zu garantieren, siehe [HJ06]. Auf Grund der Axialsymmetrie des Gebietes  $\widehat{\Omega}$  wird eine Transformation in Zylinderkoordinaten  $r, \varphi, z$  ( $x_1 = r \cos \varphi, x_2 = r \sin \varphi, x_3 = z$ ), mit  $r > 0$  und  $\varphi \in (-\pi, \pi]$  vorgenommen, wodurch die RWA (2.11) die Gestalt

$$-\Delta_{r,\varphi,z} u := -\left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right\} = f \text{ in } \Omega, \quad u = 0 \text{ auf } \Gamma_a \times (-\pi, \pi] \quad (2.12)$$

erlangt, mit  $u(r, \varphi, z) := \hat{u}(r \cos \varphi, r \sin \varphi, z)$  (und analog mit  $f, \hat{f}$ ) sowie  $\Gamma_a := \partial\Omega_a \setminus \Gamma_0$ , vgl. Abbildung 2.6(a). Für die Funktionen  $u$  und  $f$  wird mit Hilfe des Funktionensystems  $\{e^{ik\varphi}\}_{k \in \mathbb{Z}}$  ( $i^2 = -1; \mathbb{Z} = \{0, \pm 1, \pm 2, \dots\}$ ) eine partielle Fourieranalyse bzgl. des Rotationswinkels  $\varphi$  vorgenommen:

$$u(r, \varphi, z) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} u_k(r, z) e^{ik\varphi}, \quad u_k(r, z) := \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} u(r, \varphi, z) e^{-ik\varphi} d\varphi \text{ für } k \in \mathbb{Z}.$$

Mit Hilfe dieser Fourieranalyse wird die 3D-RWA (2.12) in eine unendliche Folge entkoppelter 2D-RWA:

$$-\left\{ \frac{\partial^2 u_k}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 u_k}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_k}{\partial r} \right\} + \frac{k^2}{r^2} u_k = f_k \text{ in } \Omega_a \quad \forall k \in \mathbb{Z}, \quad (2.13)$$

$$u_k = 0 \text{ on } \Gamma_a \quad \forall k \in \mathbb{Z}, \quad u_k = 0 \text{ on } \Gamma_0 \quad \forall k \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$$

zerlegt, wobei  $u_k$  ( $k \in \mathbb{Z}$ ) die Fourierkoeffizienten der Lösung  $u$  von (2.12) sind. Zur näherungsweisen Lösung der 2D-RWA (2.13) wird die im folgenden beschriebene Nitsche-Finite-Elemente-Diskretisierung (kurz: Nitsche-FE-Diskretisierung) eingesetzt. Hierzu wird eine Zerlegung des Gebietes  $\Omega_a$  in zwei polygonal berandete Teilgebiete  $\Omega_a^1, \Omega_a^2$  mit  $\overline{\Omega}_a = \overline{\Omega}_a^1 \cup \overline{\Omega}_a^2, \quad \Omega_a^1 \cap \Omega_a^2 = \emptyset, \quad \Gamma = \overline{\Omega}_a^1 \cap \overline{\Omega}_a^2$  (siehe Abbildung 2.6(a)) vorgenommen. Für jedes  $k \in \mathbb{Z}$  ist dann die Lösung der RWA (2.13) äquivalent zur Lösung des folgenden Problems:

Finde  $(u_k^1, u_k^2) = (u_k|_{\Omega_a^1}, u_k|_{\Omega_a^2})$  derart, dass

$$-\left\{ \frac{\partial^2 u_k^i}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 u_k^i}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_k^i}{\partial r} \right\} + \frac{k^2}{r^2} u_k^i = f_k \text{ in } \Omega_a^i, \quad i = 1, 2,$$

$$\frac{\partial u_k^1}{\partial n_1} + \frac{\partial u_k^2}{\partial n_2} = 0 \text{ auf } \Gamma, \quad u_k^1 = u_k^2 \text{ auf } \Gamma \quad (2.14)$$

sowie die Randbedingungen  $u_k^i = 0$  auf  $\partial\Omega_a^i \cap \Gamma_a$ ,  $u_k^i = 0$  auf  $\partial\Omega_a^i \cap \Gamma_0$  (nur für  $k \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$ ) erfüllt sind; in (2.14) bezeichnet  $n_i$  ( $i = 1, 2$ ) die Außennormale zu  $\partial\Omega_a^i \cap \Gamma$ .

Für die numerische Approximation der Lösungen von (2.14) werden auf den Teilgebieten  $\Omega_a^i$  ( $i = 1, 2$ ) quasi-uniforme Triangulationen  $\mathcal{T}_h^i$  ( $i = 1, 2$ ;  $h \in (0, h_0]$ : Vernetzungsparameter), bestehend aus Dreiecken  $T$  ( $T = \bar{T}$ ), eingeführt. Die Triangulationen  $\mathcal{T}_h^1$  und  $\mathcal{T}_h^2$  sind unabhängig voneinander und müssen an der Schnittlinie  $\Gamma$  der beiden Teilgebietsränder nicht zusammenpassen (non-matching mesh). Abbildung 2.6(b) zeigt ein einfaches Beispiel für eine solche Vernetzung. Die mit Hilfe von  $\mathcal{T}_h^1, \mathcal{T}_h^2$  definierten Finite-Elemente-Räume werden mit  $V_{ah} := V_{ah}^1 \times V_{ah}^2$  und  $W_{ah} := W_{ah}^1 \times W_{ah}^2$  bezeichnet, wobei  $V_{ah}^i$  ( $i = 1, 2$ ) den Raum der über  $\Omega_a^i$  stetigen, stückweise linearen Funktionen bezeichnet; für die Funktionen aus  $W_{ah}^i$  ist zusätzlich die homogene Dirichlet-Randbedingung auf  $\Gamma_0$  (vgl. auch (2.13)) erfüllt. Weiterhin wird eine aus Intervallen  $E = \bar{E}$  bestehende Vernetzung  $\mathcal{E}_h$  der Schnittlinie  $\Gamma$  eingeführt. In [HJ04, HJ06] werden weitere Bedingungen an  $\mathcal{E}_h$  genauer erläutert.

Die Nitsche-FE-Approximationen  $u_{0h} = (u_{0h}^1, u_{0h}^2) \in V_{ah}$  und  $u_{kh} = (u_{kh}^1, u_{kh}^2) \in W_{ah}$ ,  $k \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$ , der Lösungen  $u_k = (u_k^1, u_k^2)$  von (2.14) sind definiert als Lösungen der Gleichungen

$$\mathcal{B}_{h,k}(u_{kh}, v_h) = \mathcal{F}_{h,k}(v_h) \quad \forall v_h \in W_{ah}, \quad k \in \mathbb{Z} \setminus \{0\} \quad (\text{bzw. } \forall v_h \in V_{ah}, \quad k = 0) \quad (2.15)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{h,k}(u_h, v_h) &:= \sum_{i=1}^2 \left\{ (\nabla u_h^i, \nabla v_h^i)_{1/2, \Omega_a^i} + k^2 (u_h^i, v_h^i)_{-1/2, \Omega_a^i} \right\} - \left\langle \alpha_1 \frac{\partial u_h^1}{\partial n_1} - \alpha_2 \frac{\partial u_h^2}{\partial n_2}, v_h^1 - v_h^2 \right\rangle_{1/2, \Gamma} \\ &\quad - \left\langle \alpha_1 \frac{\partial v_h^1}{\partial n_1} - \alpha_2 \frac{\partial v_h^2}{\partial n_2}, u_h^1 - u_h^2 \right\rangle_{1/2, \Gamma} + \gamma \sum_{E \in \mathcal{E}_h} h_E^{-1} (u_h^1 - u_h^2, v_h^1 - v_h^2)_{1/2, E} \quad (2.16) \\ \mathcal{F}_{h,k}(v_h) &:= \sum_{i=1}^2 (f_k^i, v_h^i)_{1/2, \Omega_a^i} \end{aligned}$$

und reellen Parametern  $\alpha_i$  ( $i = 1, 2$ ) mit  $\alpha_1, \alpha_2 \geq 0$ ,  $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ . Mit  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{1/2, \Gamma}$  ist das  $[H_{1/2, *}^{1/2}(\Gamma)]' \times H_{1/2, *}^{1/2}(\Gamma)$ -Dualitätspaar (siehe [HJ04]) bezeichnet,  $(\cdot, \cdot)_{\beta, E}$  ( $\beta = \pm 1/2$ ) ist das gewichtete  $L_{2, 1/2}(E)$  Skalarprodukt  $(v, w)_{\beta, E} = \int_E v \bar{w} r^\beta ds$  ( $r$ : Abstand zur Rotationsachse) und  $\gamma$  eine hinreichend große positive Konstante (siehe [HJ04, HJ06]). Die wesentlichen Unterschiede zwischen  $\mathcal{B}_{h,k}(\cdot, \cdot)$  aus (2.16) und den in [HP02, HN03] betrachteten Bilinearformen bestehen im Vorhandensein von Gewichtsfaktoren der Form  $r^\beta$ ,  $\beta = \pm 1/2$ , im Skalarprodukt sowie in der Abhängigkeit vom Fourierparameter  $k$ . Dies erfordert modifizierte Techniken beim Nachweis der Elliptizität und Beschränktheit von  $\mathcal{B}_{h,k}(\cdot, \cdot)$  sowie vor allem beim Beweis von Abschätzungen für den Approximationsfehler  $u_k - u_{kh}$  ( $k \in \mathbb{Z}$ ) in geeigneten Normen; für Details sei auf [HJ04, HJ06] verwiesen.

Mit Hilfe der Räume  $V_{hN}$  und der Funktionale  $\mathcal{B}_h^N(\cdot, \cdot)$ ,  $\mathcal{F}_h^N(\cdot, \cdot)$ :

$$\begin{aligned} V_{hN} &:= \left\{ v(r, \varphi, z) = \sum_{|k| \leq N} v_{kh}(r, z) e^{ik\varphi} : v_{0h} \in V_{ah}, v_{kh} \in W_{ah} \quad (1 \leq |k| \leq N) \right\}, \\ \mathcal{B}_h^N(u, v) &:= 2\pi \sum_{|k| \leq N} \mathcal{B}_{h,k}(u_k, v_k), \quad \mathcal{F}_h^N(v) := 2\pi \sum_{|k| \leq N} \mathcal{F}_{h,k}(v_k) \end{aligned}$$

wird die kombinierte Fourier-Nitsche-FE-Methode zur Lösung der 3D-RWA (2.12) definiert:

$$\text{Finde } u_{hN} \in V_{hN} \text{ so dass } \mathcal{B}_h^N(u_{hN}, v_{hN}) = \mathcal{F}_h^N(v_{hN}) \quad \forall v_{hN} \in V_{hN}. \quad (2.17)$$

Die Lösung  $u_{hN}$  von (2.17) entsteht durch Fouriersynthese der Lösungen  $u_{kh} = (u_{kh}^1, u_{kh}^2)$  der 2D-RWA (2.15):

$$u_{hN} = (u_{hN}^1, u_{hN}^2) \quad \text{mit} \quad u_{hN}^i = \sum_{|k| \leq N} u_{kh}^i(r, z) e^{ik\varphi} \quad \text{für } i = 1, 2.$$

Das Hauptresultat der Konvergenzanalyse für die kombinierte Fourier-Nitsche-FE-Methode besteht in den folgenden Abschätzungen (zum Beweis siehe [HJ04, HJ06]):

$$\|u - u_{hN}\|_{1,h,\Omega} \leq C(h + N^{-1})\|f\|_{X_{1/2}^0(\Omega)}, \quad \|u - u_{hN}\|_{X_{1/2}^0(\Omega)} \leq C(h^2 + N^{-2})\|f\|_{X_{1/2}^0(\Omega)} \quad (2.18)$$

für die Lösung  $u$  der 3D-RWA (2.12) und ihre Approximation  $u_{hN}$  aus (2.17). Die  $H^1$ -ähnliche Norm  $\|\cdot\|_{1,h,\Omega}$  in (2.18) ist gegeben durch

$$\|v\|_{1,h,\Omega}^2 := \sum_{i=1}^2 |v^i|_{X_{1/2}^1(\Omega^i)}^2 + \sum_{E \in \mathcal{E}_h} h_E^{-1} \|v^1 - v^2\|_{X_{1/2}^0(E \times (-\pi, \pi])}^2, \quad (2.19)$$

mit  $\Omega^i := \Omega_a^i \times (-\pi, \pi]$ ,  $i = 1, 2$ . Die  $X_{1/2}^1$ -Halbnorm (bzw. die  $X_{1/2}^0$ -Norm) in (2.19) resultiert aus der  $H^1$ -Halbnorm (bzw.  $L_2$ -Norm) nach Transformation der entsprechenden Funktion in Zylinderkoordinaten, siehe auch [Hei96, HJ04, HJ06]. Die Abschätzungen in (2.18) sagen insbesondere aus, dass die Diskretisierungsparameter  $h$  und  $N$  unabhängig voneinander gewählt werden können.

Bei den numerischen Experimente zur kombinierten Fourier-Nitsche-FE-Methode wurde eine RWA vom Typ (2.12) mit zwei Varianten einer Gebietszerlegung untersucht. Die Meridianebene  $\Omega_a$  ist ein Fünfeck mit den Eckpunkten  $(0, 0)$ ,  $(1, 0)$ ,  $(2, 1)$ ,  $(1, 2)$  und  $(0, 2)$ , siehe Abbildung 2.7. Die rechte Seite  $f$  wird so gewählt, dass die exakte Lösung der RWA (2.12) lautet:

$$u(r, \varphi, z) = -r^2(r - z - 1)(r + z - 3)(z^2 - 2z)\Phi(\varphi) \quad \text{mit} \quad \Phi(\varphi) := -[|\varphi|(\pi + \varphi)]^{1.51} \quad \text{für } \varphi \in (-\pi, 0] \quad \text{und} \quad \Phi(\varphi) := [\varphi(\pi - \varphi)]^{1.51} \quad \text{für } \varphi \in (0, \pi].$$

Für das Beispiel 1 sind die Teilgebiete durch  $\Omega_a^1 = \{(r, z) \in \Omega_a : z > 1\}$  und  $\Omega_a^2 = \{(r, z) \in \Omega_a : z < 1\}$  gegeben. Abbildung 2.7(a) zeigt dieses Gebiet mit der Anfangsvernetzung. Für das Beispiel 2 wurden die Teilgebiete  $\Omega_a^1 = \Omega_a \setminus \bar{\Omega}_a^2$ ,  $\Omega_a^2 = (0.5, 1) \times (0.5, 1.5)$  gewählt, siehe Abbildung 2.7(b). Die Anfangsvernetzung wurde jeweils durch Dreiecksviertelung verfeinert, wobei insgesamt fünf Verfeinerungslevel verwendet wurden:  $\{h_1, h_2, \dots, h_5\}$ . Für die Diskretisierung bzgl.  $N$  (Anzahl der Fourierkoeffizienten der Näherungslösung) wurden die folgenden fünf Level verwendet:  $N_1 = 8$  und  $N_{i+1} = 2N_i$  für  $i = 1, 2, 3, 4$ . Der experimentellen Ermittlung der Konvergenzordnung liegen die Relationen

$$\|u - u_{hN}\|_{X_{1/2}^0(\Omega)} \approx C_1^{(0)} h^{\beta_0} + C_2^{(0)} N^{-\delta_0}, \quad \|u - u_{hN}\|_{1,h,\Omega} \approx C_1^{(1)} h^{\beta_1} + C_2^{(1)} N^{-\delta_1} \quad (2.20)$$

zugrunde. Die Parameter  $C_1^{(i)}$  und  $C_2^{(i)}$  ( $i = 1, 2$ ) wurden für zwei benachbarte Level von  $h$  und  $N$  als annähernd konstant vorausgesetzt. Die Tabelle 2.1 zeigt die in den Experimenten erzielten Fehlernormanteile  $e_{h,0}$ ,  $e_{h,1}$  bzgl. des Diskretisierungsparameters  $h$

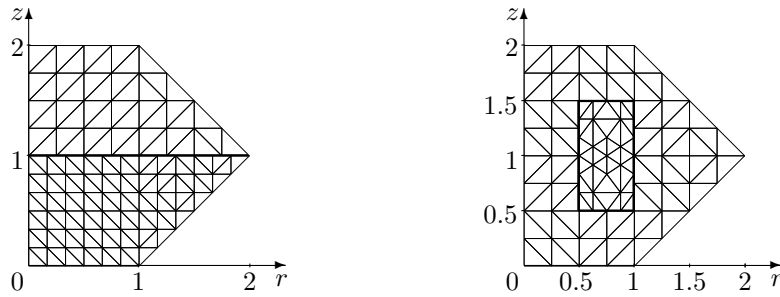


Abbildung 2.7: (a) Teilgebiete für Beispiel 1; (b) Teilgebiete für Beispiel 2

für die Level  $h_1, \dots, h_5$  bei festem  $N = 64$  und die daraus ermittelten Konvergenzordnungen  $\beta_{obs,0}, \beta_{obs,1}$ .

Level	Beispiel 1				Beispiel 2			
	$e_{h,0}$	$\beta_{obs,0}$	$e_{h,1}$	$\beta_{obs,1}$	$e_{h,0}$	$\beta_{obs,0}$	$e_{h,1}$	$\beta_{obs,1}$
$h_1$	1.9744e-1	–	3.2666e 0	–	2.1707e-1	–	3.2335e 0	–
$h_2$	5.2963e-2	1.90	1.6019e 0	1.03	5.7896e-2	1.91	1.6267e 0	0.99
$h_3$	1.3735e-2	1.95	7.9030e-1	1.02	1.4979e-2	1.95	8.1276e-1	1.00
$h_4$	3.4580e-3	1.99	3.9249e-1	1.01	3.7667e-3	1.99	4.0595e-1	1.00
$h_5$	8.6936e-4	1.99	1.9562e-1	1.00	9.4788e-4	1.99	2.0286e-1	1.00

Tabelle 2.1: Fehlernormen und Konvergenzordnungen für  $h = h_1, \dots, h_6$  und  $N = 64$ 

Level	$e_{N,0}$	$\delta_{obs,0}$	$e_{N,1}$	$\delta_{obs,1}$
$N_1$	4.3976e-2	–	5.9030e-1	–
$N_2$	1.1859e-2	1.89	3.0529e-1	0.95
$N_3$	3.0510e-3	1.96	1.5447e-1	0.98
$N_4$	7.6852e-4	1.99	7.6487e-2	1.01
$N_5$	1.8893e-4	2.02	3.6008e-2	1.09

Tabelle 2.2: Fehlernormen und Konvergenzordnungen für  $h = h_5$  und  $N = N_1, \dots, N_5$ 

Die beobachteten Konvergenzordnungen zeigen für beide Beispiele eine gute Übereinstimmung mit den gemäß der Abschätzungen (2.18) theoretisch erwarteten Werten  $\beta_{exp,0} = 2, \beta_{exp,1} = 1$ .

In der Tabelle 2.2 sind die experimentell ermittelten Fehlernormanteile  $e_{N,0}, e_{N,1}$  bzgl. des Diskretisierungsparameters  $N$  für die Level  $N_1, \dots, N_5$  bei festem  $h = h_5$  und die entsprechenden Werte  $\delta_{obs,0}, \delta_{obs,1}$  dargestellt. Es wird nicht zwischen Beispiel 1 und Beispiel 2 unterschieden, da die erzielten Resultate übereinstimmten. Die Resultate aus Tabelle 2.2 bestätigen die theoretisch erwarteten Konvergenzordnungen  $\delta_{exp,0} = 2, \delta_{exp,1} = 1$ .

## Lamé Gleichungen

In [Poe05] wird die Mortar-Methode nach Nitsche für die Lamé Gleichungen betrachtet, wobei gemischte Randbedingungen und Polygonegebiete zugelassen sind. Für die Lösungen  $u$  (Lösung, Räume jeweils vektoruell) des Randwertproblems gilt:  $u \in H^{1+\delta}(\Omega)$ ,

$\delta > 0$ ,  $\delta$ . In [Poe05] werden für die Behandlung der Normalspannungen Sobolevräume mit Potenzgewichten  $r^\beta$  angewendet (da  $\sigma n|_\Gamma \notin L_2(\Gamma)$  gilt) und neue Werkzeuge (Fehlerfunktionale, Spursätze) für die Fehlerabschätzung bearbeitet. 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  $\Gamma$  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.

## 2.4.2 Teilproblem: Kontakt

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

### A) Zwei Körper

Als erstes Beispiel zum Kontakt eines elastischen Körpers mit einem zweiten sei das in Abbildung 2.8 skizzierte Problem betrachtet.

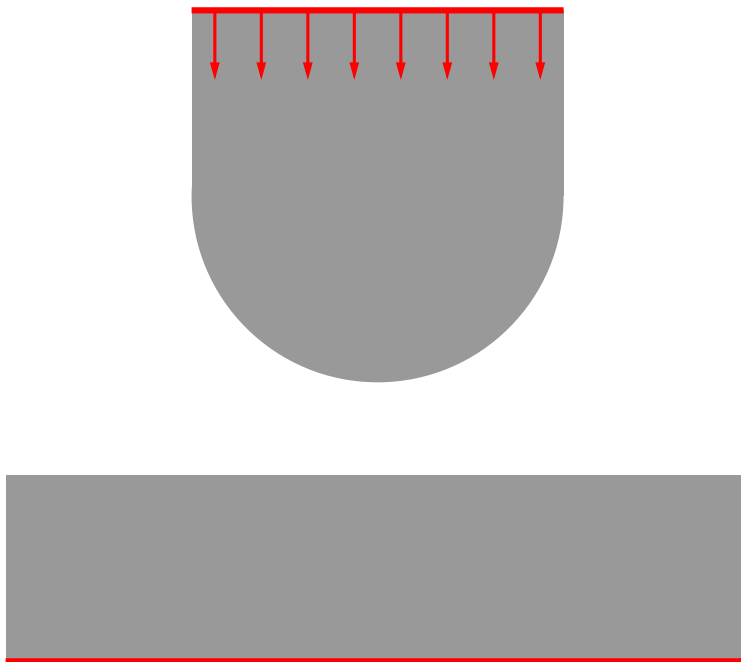


Abbildung 2.8: Zweikörperkontaktproblem

Der unterer rechteckige Körper ruht auf einer festen Unterlage, d.h. in seinem rot markierten unteren Kantenbereich ist durch eine Dirichlet-Randbedingung einer Verschiebung von Null vorgegeben.

Der obere Körper wird an seiner oberen Kante durch eine vorgegebene Verschiebung in den unteren Körper hineingedrückt.

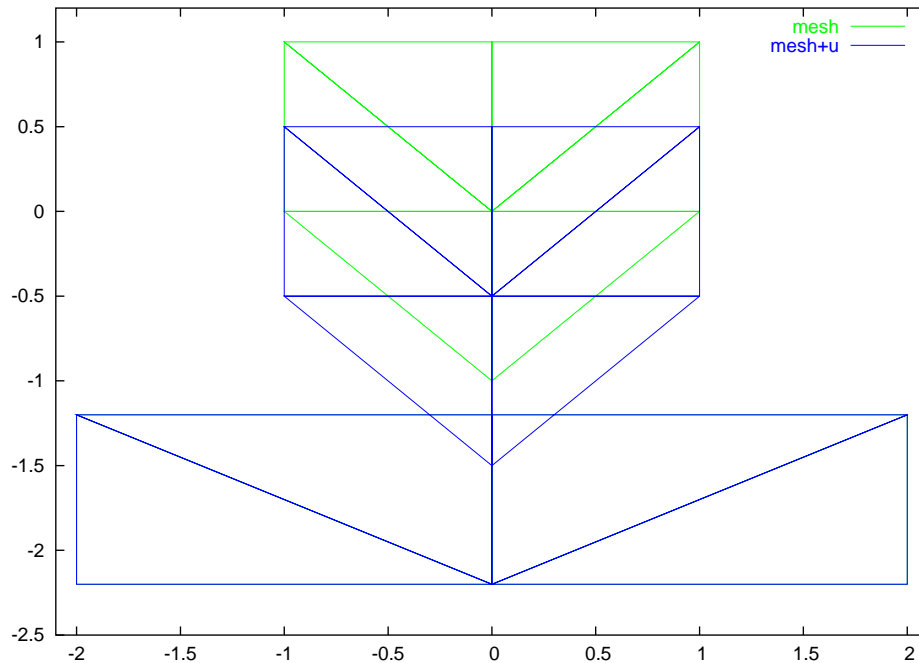


Abbildung 2.9: Ausgangsvernetzung zum Zweikörperkontaktproblem

Beide Körper bestehen aus gleichartigem Material. In Abbildung 2.9 ist die Vernetzung der Ausgangssituation dargestellt. Das halbkeisförmige untere Stück des oberen Körpers ist erst durch zwei Elemente vernetzt, weshalb es als Dreieck erscheint. Die zugehörigen Kanten tragen jedoch die notwendigen Geometrieinformationen, so dass bei weiterer Verfeinerung die wahre Geometrie immer besser approximiert wird.

Insbesondere ist im 0-ten Schritt noch kein Eindringungstest vorgenommen worden, der mittlere untere Knoten des oberen Körpers ist in den unteren Körper eingedrungen.

Im nächsten Schritt der Verfeinerung (Abbildung 2.10) wird dieses Eindringen erkannt und eine konforme Lösung bestimmt.

Mit weiteren Verfeinerungsschritten wird die Kontaktzone und die Kantengeometrie immer besser aufgelöst. In den Abbildung 2.11 und 2.12 ist die Lösung nach 8 Verfeinerungsschritten dargestellt. Zur besseren Übersicht in der Kontaktzone wurde jedoch in Abbildung 2.12 der obere Körper bei der Darstellung ein kleines Stück vom unteren Körper zurückgezogen.

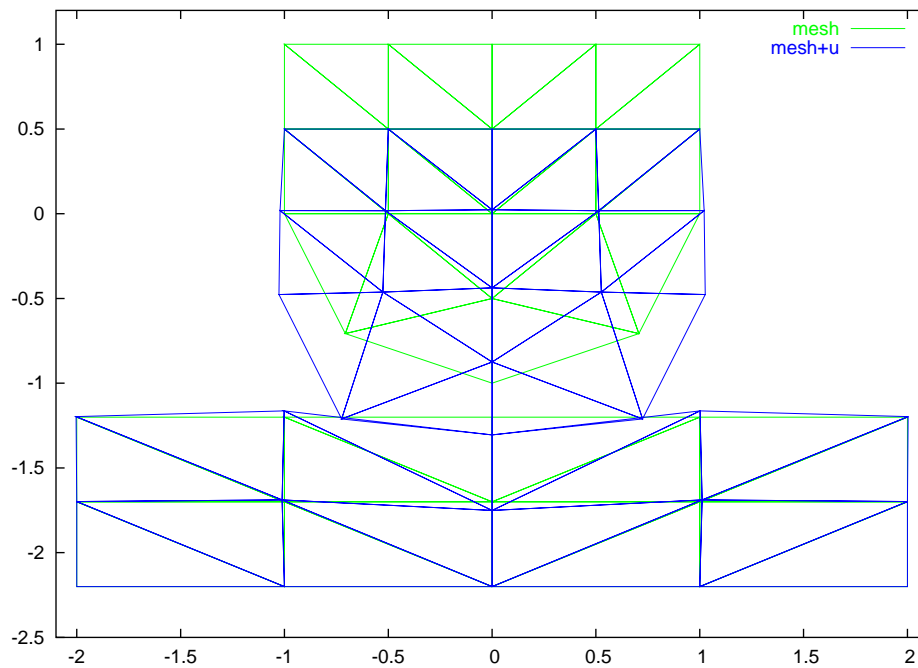


Abbildung 2.10: Zweikörperkontaktproblem nach dem ersten Verfeinerungsschritt

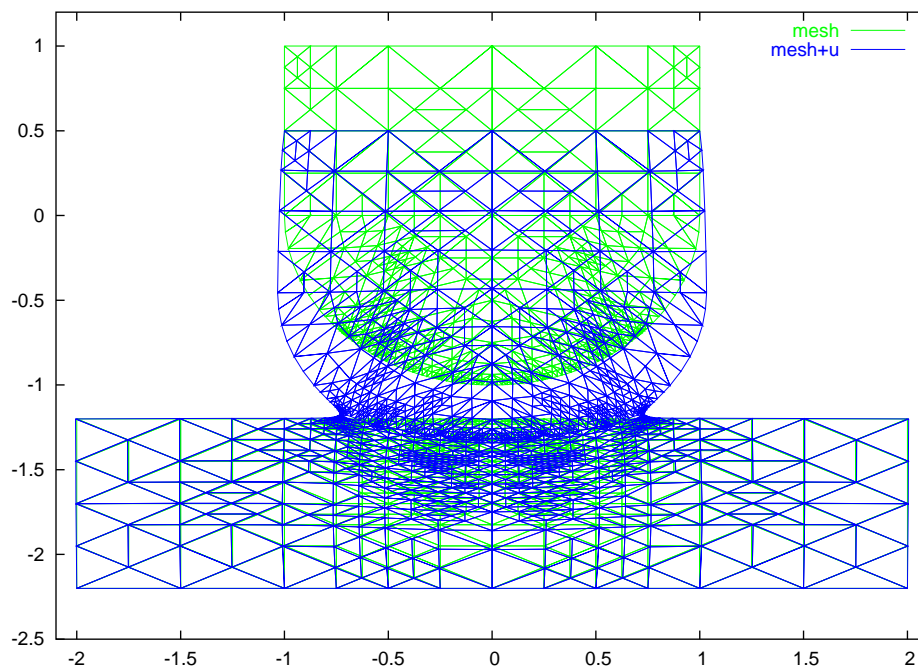


Abbildung 2.11: Zweikörperkontaktproblem nach mehreren Verfeinerungsschritten



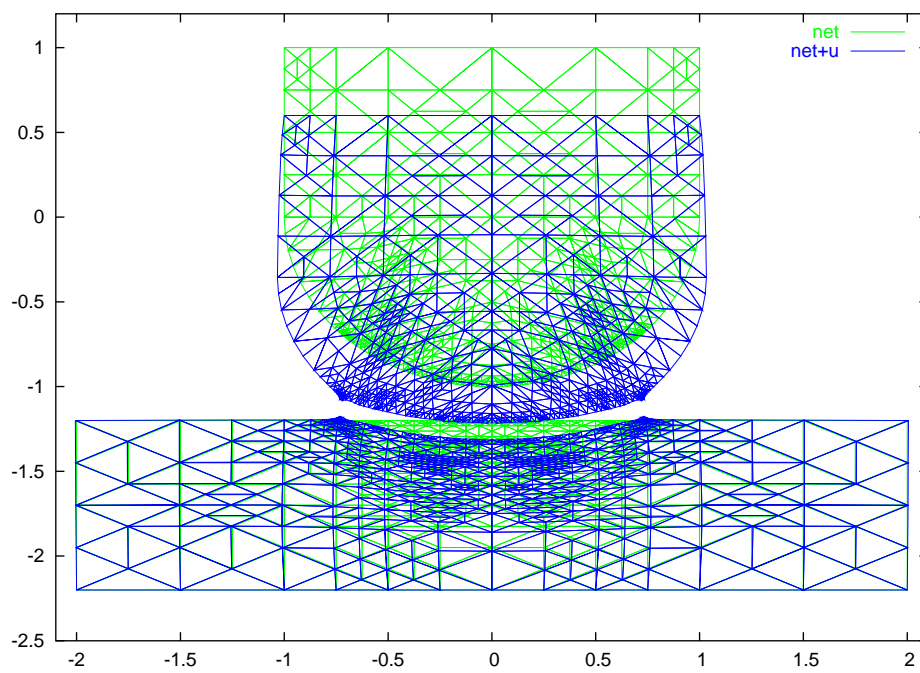


Abbildung 2.12: Abbildung 2.11 mit getrennten Körpern

## B) Kontakt eines elastischen Körpers mit sich selbst

Als Beispiel zum Kontakt eines elastischen Körpers mit sich selbst sei das in Abbildung 2.13 skizzierte Problem betrachtet.

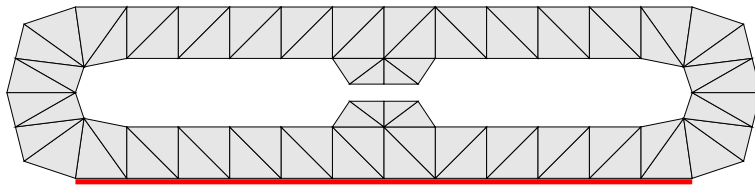


Abbildung 2.13: Kontaktproblem eines Körpers in sich

Ein elastischer Körper ruht auf einer festen Unterlage, d.h. im rot markierten Kantenbereich ist durch eine Dirichlet-Randbedingung einer Verschiebung von Null vorgegeben.

Im inneren des Körpers greift eine konstante, nach unten gerichtete Volumenlast an.

Ohne Berücksichtigung des Kontaktes des Körpers in sich, führt die Berechnung des Verschiebungsfeldes zu einer Selbstdurchdringung des Körpers, wie in Bild 2.14 dargestellt ist.

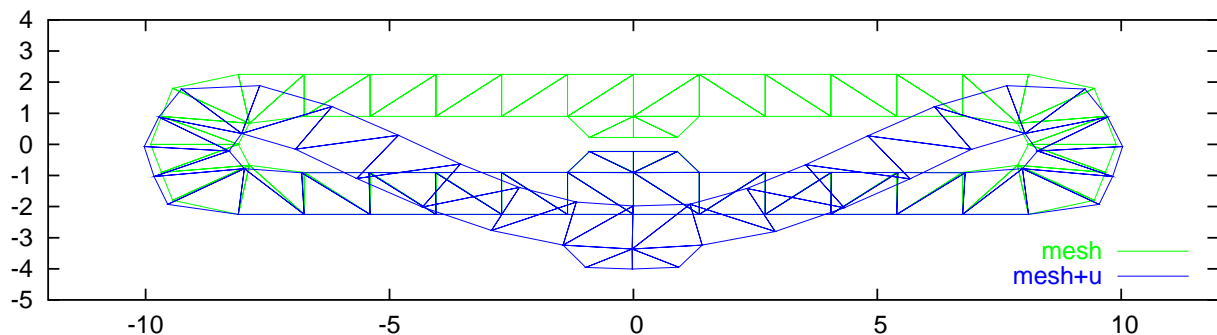


Abbildung 2.14: Verschiebungsfeld ohne Kontakt

Beachtet man jedoch die potentielle Kontaktzone in der Mitte des Körpers, so erhält man ein konformes Verschiebungsfeld wie in den Bildern 2.15 und 2.16 dargestellt.

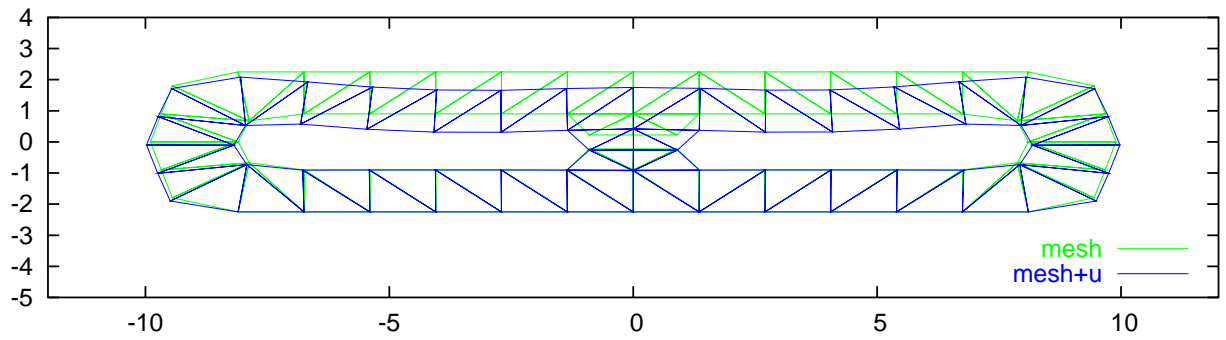


Abbildung 2.15: Verschiebungsfeld mit Kontakt

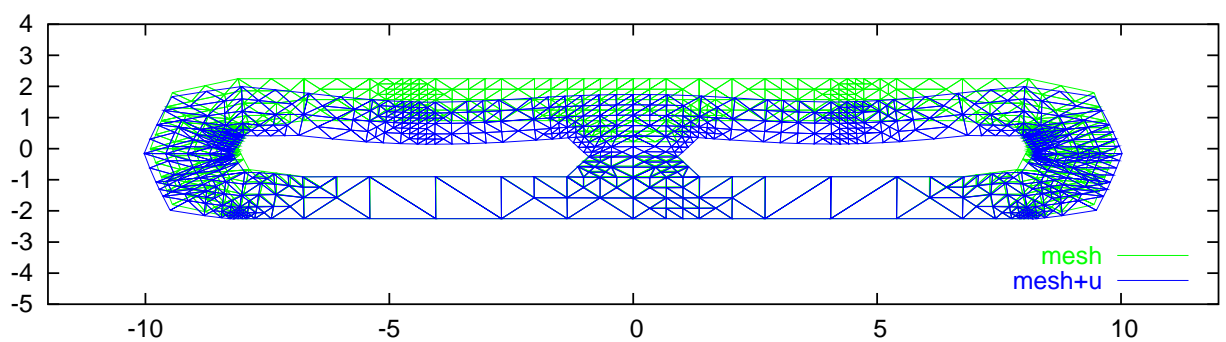
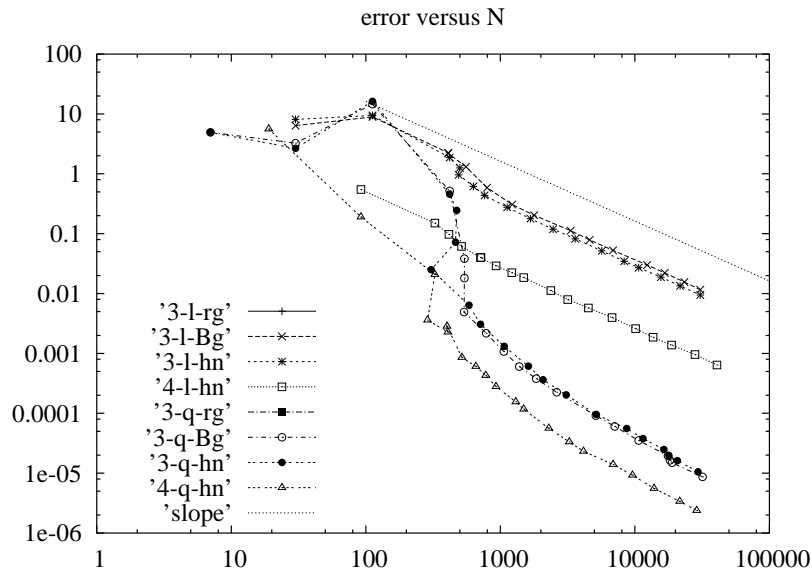


Abbildung 2.16: Verschiebungsfeld mit Kontakt

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.



### 2.4.3 Teilaufgabe: randkonzentrierte $hp$ -FEM

Wollen wir die Lösung eines Randwertproblems mittels randkonzentrierter  $hp$ -FEM bestimmen, so führt dies auf ein großdimensionales lineares Gleichungssystem, wobei die Anzahl  $N$  der Unbekannten durchaus die Größenordnung von einigen Millionen annehmen kann. Speziell für den 2D-Fall wurde bereits in [KM02] ein auf der  $LU$ -Zerlegung der Steifigkeitsmatrix beruhender Lösungsalgorithmus vorgestellt, der uns die gesuchte Lösung nach  $O(N \log^8 N)$  Rechenoperationen liefert. Wollen wir jedoch 3D-Probleme lösen, die schwache Besetztheit der Steifigkeitsmatrix ausnutzen oder aber haben wir, um Speicherplatz zu sparen, die Steifigkeitsmatrix gar nicht explizit aufgestellt, sondern stattdessen nur eine Matrix-Vektor-Multiplikation implementiert, so kommen eigentlich nur iterative Lösungsverfahren in Frage. Das wohl bekannteste Iterationsverfahren ist der PCG-Algorithmus. Betrachten wir das zu lösende lineare Gleichungssystem

$$Au = b \quad (2.21)$$

mit symmetrisch positiv definiten Matrix  $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ,  $b \in \mathbb{R}^N$  und geeignetem Vorkonditionierer  $B^{-1} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ , ebenfalls symmetrisch positiv definit, so bestimmt der PCG-Algorithmus, ausgehend von einer Startnäherung  $u_0 \in \mathbb{R}^N$ , eine Folge  $\{u^k\}_{k=0,1,\dots} \subset \mathbb{R}^N$ , die mit

$$\langle u, v \rangle_A := \langle Au, v \rangle, \quad \|u\|_A^2 := \langle u, u \rangle_A$$

und exakte Lösung  $u^*$ , der Abschätzung

$$\|u^* - u^k\|_A \leq 2 \left( \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^k \|u^* - u^0\|_A, \quad \kappa = \text{cond}_2(AB^{-1}) = \frac{\lambda_{\max}(AB^{-1})}{\lambda_{\min}(AB^{-1})}$$

genügt. Wie wir an dieser Fehlerabschätzung sehen, ist die Konditionszahl  $\kappa$  von entscheidender Bedeutung für die Konvergenzgeschwindigkeit des PCG-Algorithmus. Leider ist bei der randkonzentrierten FEM aber ausschließlich das reine Dirichlet-Problem von Haus aus gut konditioniert. Aus der hierfür in [KM03] gezeigten Schranke von  $O(\log^\beta N)$  für die Konditionszahl der diagonalskalierten Steifigkeitsmatrix, wobei  $\beta \geq 0$  von der Wahl der Formfunktionen abhängt, folgt, dass sich im Falle reiner Dirichlet-Randbedingungen selbst mit simpler Diagonalskalierung noch akzeptable Konvergenzraten im PCG erzielen lassen. Ganz anders sieht die Sache jedoch aus, sobald wir es mit Neumann- bzw. gemischten Randbedingungen zu tun haben. Um auch diese Probleme effektiv lösen zu können, ist ein guter Vorkonditionierer unentbehrlich.

Wir haben zwei auf der Additiv-Schwarz-Methode basierende Vorkonditionierer für die randkonzentrierten FEM entwickelt, die sowohl für 2- als auch 3-dimensionale Probleme mit Dirichlet-, Neumann- oder gemischten Randbedingungen anwendbar sind und dabei beweisbar zu optimalen, von der Problemgröße  $N$  unabhängigen Konditionszahlen  $O(1)$  führen. Für eine detaillierte Beschreibung sowie den theoretischen Hintergrund verweisen wir auf [Eib06] und betrachten an dieser Stelle stattdessen zwei Beispielrechnungen.

Unser erstes Beispiel ist ein Randwertproblem auf dem L-Gebiet: Wir betrachten

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f & \text{auf} & \quad \Omega = (0, 1)^2 \setminus ([0, 1] \times [-1, 0]) \\ \frac{\partial u}{\partial n} &= 0 & \text{auf} & \quad \Gamma_N = (\{-1\} \times [-1, 1]) \cup ([-1, 1] \times \{1\}) \\ u &= 0 & \text{auf} & \quad \Gamma_D = \partial\Omega \setminus \Gamma_N \end{aligned}$$

mit einer rechten Seite  $f$ , so dass die exakte Lösung gegeben ist durch

$$u = r^{\frac{2}{3}} \sin\left(\frac{2}{3}\varphi\right) (1 - r^2 \cos^2 \varphi) (1 - r^2 \sin^2 \varphi) (1 + r \cos \phi)(1 - r \sin \phi).$$

Mit dem zweiten Beispiel wollen wir ein Gebiet mit kompliziertem Rand betrachten: Auf dem in Abbildung (2.18) dargestellten Gebiet betrachten wir das Randwertproblem

$$\begin{aligned} -\Delta u &= 1 & \text{auf} & \quad \Omega \\ \frac{\partial u}{\partial n} &= 0 & \text{auf} & \quad \Gamma_N = \{(x, y) \in \partial\Omega \mid y < 0\} \\ u &= 0 & \text{auf} & \quad \Gamma_D = \partial\Omega \setminus \Gamma_N. \end{aligned}$$

In beiden Beispielen starten wir mit einem Grobgitter  $\mathcal{N}_0$  und erzeugen mittels eines geeigneten Algorithmus (siehe [Eib06]) eine Folge hierarchisch geschachtelter geometrischer Netze  $\{\mathcal{N}_j\}_{j=0,1,\dots,M}$  mit Randgitterweiten  $h_j \sim 2^{-j}h_0$ . Die zum Netz  $\mathcal{N}_j$  gehörige Polynomgradverteilung definieren wir zu

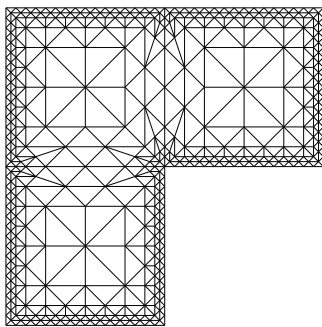
$$p_{K,j} := \left\lfloor \frac{3}{2} + \alpha \ln \left( \frac{h_K}{h_j} \right) \right\rfloor \quad \forall K \in \mathcal{T}(\mathcal{N}_j), \quad \underline{h}_j := \text{Länge der kürzesten Kante aus } \mathcal{N}_j,$$

wobei wir konkret  $\alpha = 1$  wählen.

Die Ergebnisse unserer Rechnungen sind in den Abbildungen 2.17 und 2.18 dargestellt. CG steht hierbei für den nicht vorkonditionierten CG-Algorithmus und mit PCG-1 bzw.

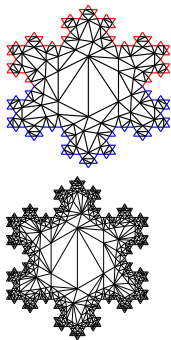
PCG-2 bezeichnen wir unsere beiden Vorkonditionierer. Alle Iterationen wurde mit  $u^0 \equiv 0$  gestartet. Die angegebenen Iterationszahlen beziehen sich auf die Anzahl von Iterationsschritten, die notwendig ist, um das Residuum um einen vorgegeben Faktor zu reduzieren. Wie anhand unserer theoretischen Überlegungen (siehe [Eib06]) zu erwarten, bleiben die Iterationszahlen der PCG-Algorithmen beschränkt und liegen deutlich unter denen des CG-Algorithmus.

Abbildung 2.17: (Beispiel L-Gebiet) Links: Netz von Level 4. Rechts: Iterationszahlen um  $\|\underline{r}^k\|^2 / \|\underline{r}^0\|^2 \leq 10^{-12}$  zu erreichen



L	#Elemente	$p_{max}$	N	CG	PCG-1	PCG-2
0	12	1	6	4	4	4
1	48	1	24	14	14	11
2	168	1	84	29	25	18
3	392	1	196	46	36	22
4	840	2	525	87	44	24
5	1736	3	1181	195	51	25
6	3528	3	2657	263	55	27
7	7112	4	5818	368	60	27
8	14280	5	12114	474	63	28
9	28616	6	25070	581	66	29
10	57288	6	51202	691	69	30
11	114632	7	103843	884	71	31
12	229320	8	209003	1120	74	31
13	458696	8	419807	1316	77	31
14	917448	9	841904	1596	79	33
15	1834952	10	1685928	—	81	33

Abbildung 2.18: (Beispiel Schneeflocke) Links: Grobgitter & Netz von Level 1 Rechts: Iterationszahlen um  $\|\underline{r}^k\|^2 / \|\underline{r}^0\|^2 \leq 10^{-10}$  zu erreichen



L	#Elemente	$p_{max}$	N	CG	PCG-1	PCG-2
0	298	1	149	63	44	44
1	1054	3	619	185	78	57
2	3346	4	2096	318	79	62
3	8398	5	5227	477	104	65
4	18826	5	12963	659	106	70
5	40006	6	30024	927	112	78
6	82690	7	66228	1156	120	79
7	168382	7	141311	1644	128	80
8	340090	8	296938	2321	133	81
9	683830	9	613767	3282	138	81
10	1371634	10	1253012	4638	142	81

**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.
- [Eib06] K. Pietsch. Adaptive- und randkonzentrierte hp-FEM. Manuskript zur Dissertation (unveröffentlicht), Fakultät für Mathematik, TU Chemnitz, 2006.
- [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.
- [HJ04] B. Heinrich and B. Jung. The Fourier-finite-element method with Nitsche mortaring. Preprint SFB393 04-11, TU Chemnitz, 2004.
- [HJ06] B. Heinrich and B. Jung. The Fourier-finite-element method with Nitsche mortaring. to appear in *IMA J. Num. Anal.*, 2006.
- [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.
- [HP05] B. Heinrich and K. Poenitz. Nitsche type mortaring for singularly perturbed reaction-diffusion problems. *Computing*, 75: 257–279, 2005.
- [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.
- [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.

- [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.
- [Poe05] K. Pietsch. Finite-Elemente-Mortaring nach einer Methode von Nitsche für elliptische Probleme der Ebene. Manuskript zur Dissertation (unveröffentlicht), Fakultät für Mathematik, TU Chemnitz, 2005.
- [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 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 definiert werden können.

Teilweise sind auftretende Oszillationen im Bereich der Kontaktzone des Zweikörperproblems noch problematisch. Weiterhin ist eine effektive Verwaltung der Knoten und Kantenpaarungen im zweidimensionalen und besonders von Facepaarungen im dreidimensionalen für eine effektive Implementierung noch offen.

Diese Fragen werden zum Teil in der Fortsetzung der Problematik innerhalb des DFG-Projektes ME 1224/5-1 im Paketantrag „Numerische Simulation gekoppelter Aufgaben der Mechanik“ bearbeitet werden.



**Nitsche-Mortaring**

- a) Für parabolische Differentialgleichungen wären Finite-Elemente-Methoden vom Nitsche-Typ für Gebietszerlegungen im Fall allgemeiner polygonaler Gebiete aus der Sicht der Numerischen Analysis zu begründen. Unter sehr schwachen und anwendungsrelevanten Voraussetzungen interessiert der Nachweis von Eigenschaften der Diskretisierung sowie von Fehlerabschätzungen und Konvergenzraten.
- b) Für elliptische Probleme (Poisson, Lamé) mit gemischten Randbedingungen über allgemeinen polygonalen Gebieten  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  wären a posteriori Fehlerabschätzungen für die Finite-Elemente-Methode vom Nitsche-Typ (Nitsche-Mortaring) aus der Sicht der Numerischen Analysis zu begründen.



# Teilprojekt

## **A15**

Parallele numerische Lösung von  
Optimalsteuerungsproblemen für instationäre  
Diffusions-Konvektions-Reaktionsgleichungen



## 2.1 Teilprojekt A15

Parallele numerische Lösung von Optimalsteuerungsproblemen für instationäre Diffusions-Konvektions-Reaktionsgleichungen

### 2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Peter Benner  
25.05.1967  
Professur Mathematik in Industrie und Technik  
Fakultät für Mathematik  
Technische Universität Chemnitz  
09107 Chemnitz  
Tel.: (0371) 531-8367  
Fax: (0371) 531-2657  
benner@mathematik.tu-chemnitz.de

### 2.1.2 Projektbearbeiter

Dipl.-Math. Jens Saak (04/04-12/05)  
Dipl.-Math. Sabine Görner (10/04-12/05)

## 2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Das Ziel dieses Projektes bestand darin, numerische Algorithmen für die optimale Steuerung von stationären Diffusions-Konvektions- oder auch Diffusions-Reaktionsgleichungen mit Methoden der Zustands- bzw. Ausgangsrückführung zu entwickeln. Dabei sollten sowohl lineare als auch nichtlineare Probleme behandelt werden.

### 2.2.1 Lineare Probleme

Betrachtet man zunächst Rand- oder Punktsteuerungsprobleme für lineare parabolische Probleme (lineare Diffusions-Konvektions- oder Diffusions-Reaktionsgleichungen mit der instationären Wärmeleitungsgleichung als einfachstem Beispiel) und legt ein quadratisches Kostenfunktional vor, so lässt sich die Aufgabe der Berechnung der optimalen Steuerung durch Interpretation als abstraktes linear-quadratisches Optimalsteuerungsproblem (oder auch linear-quadratisches Regelungsproblem, kurz: LQR Problem) auf die Berechnung einer stabilisierenden Zustandsrückführung (Feedback) für ein unendlichdimensionales lineares System zurückführen. Dazu muss eine nichtlineare Operatorgleichung gelöst werden, die aufgrund der quadratischen Nichtlinearität auch als Operator-Riccatigleichung bezeichnet wird. Bei der numerischen Lösung des LQR Problems wird zunächst die zugrundeliegende PDE semidiskretisiert, dadurch entsteht ein i.d.R. hochdimensionales endlichdimensionales LQR Problem. Für solche Probleme wurden vom

Antragsteller schon im Vorfeld des Projektes neue, effiziente Verfahren (mit-)entwickelt, die jedoch nur einen algorithmischen Rahmen bildeten. Diese sollten über geeignet zu definierende Schnittstellen mit Lösern für das zugrundeliegende stationäre (elliptische) Vorwärtsproblem gekoppelt werden. Mit der Bereitstellung numerischer Methoden zur Lösung des LQR Problems lässt sich dann auch das duale Problem der Berechnung eines Kalman-Filters lösen, da die selben Rechentechniken benötigt werden. Damit kann dann insgesamt ein LQG (linear-quadratisch Gauß'sches) Design für parabolische Probleme durchgeführt werden.

## 2.2.2 Nichtlineare Probleme

Bei nichtlinearen Aufgabenstellungen, die durch nichtlineare Differentialoperatoren oder nichtlineare Randbedingungen entstehen, kann eine Klasse von Optimalsteuerungsproblemen, die sogenannten Folgeregelungsprobleme, mit Hilfe von Zustands- oder Ausgangsrückführungen gelöst werden. Da im Allgemeinen eine Berechnung der optimalen Steuerung nicht direkt oder nicht mit vertretbarem Aufwand möglich ist wie im linearen Fall, verwendet man verschiedene suboptimale Strategien. Dazu sollte hier modellprädiktive Steuerung (kurz MPC, von engl., *model predictive control*, auch *receding horizon control* oder, in Spezialfällen, instantane Kontrolle genannt) eingesetzt werden. Im gewählten Ansatz wird der gesamte Zeithorizont mit kürzeren Zeitfenstern überdeckt, auf denen dann mit Hilfe eines LQG Designs Hilfsprobleme gelöst werden. Für das LQG Design benötigt man die oben genannten numerischen Methoden für das nach Linearisierung entstehende parabolische Problem. Aufgrund der Laufzeit von insgesamt nur einem Jahr (für den mit nichtlinearen Problemen erfassten Projektteil) konnte für die nichtlineare Aufgabenstellung nur ein erster Einblick gewonnen werden. Dieses Problem wird in einem Nachfolgeprojekt (DFG Normalverfahren, BE3715/1-1) detailliert bearbeitet.

## 2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

Im Allgemeinen betrachten wir folgende Problemstellung:

$$\min_{\mathbf{u} \in L_2(0, T_f; \mathcal{U})} \int_0^{T_f} \mathbf{g}(\mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t)) dt + m(y(T_f)) \quad (2.1)$$

für  $0 < T_f \leq \infty$  unter der dynamischen Nebenbedingung

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) + \mathbf{B}\mathbf{u}(t) \quad \text{für } t > 0, \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0, \quad \mathbf{u}(t) \in \mathcal{U} \quad (2.2)$$

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{C}\mathbf{x}(t), \quad (2.3)$$

wobei  $\mathbf{x}, \mathbf{x}_0 \in \mathcal{X}$ ,  $\mathbf{y} \in \mathcal{Y}$ . Es bezeichnen  $\mathbf{x}$  die Zustände und  $\mathbf{u}$  die Steuerungsfunktion. Der Tatsache, dass nicht immer alle Zustände für die Optimierung zugänglich sind, tragen wir durch Hinzunahme der Ausgangsfunktion  $\mathbf{y}$  Rechnung. Dabei sind im Allgemeinen  $\mathbf{u}(t) \in \mathcal{U}$  die Eingangsgrößen (Kontrollen, Stellgrößen, Regelungsparameter),

$\mathbf{y}(t) \in \mathcal{Y}$  die Ausgangsgrößen (Beobachtungen, Messungen), und  $\mathbf{x}(t) \in \mathcal{X}$  die Zustandsvariablen, die sich als Lösung einer (partiellen oder gewöhnlichen) Differentialgleichung ergeben. Wir haben uns hier auf den Fall konzentriert, dass  $\mathbf{x}$  Lösung einer instationären partiellen Differentialgleichung,  $\mathbf{f}$  mithin ein linearer oder nichtlinearer partieller Differentialoperator von elliptischem Typ, ist.

### 2.3.1 Lineare Probleme

Im Mittelpunkt standen Optimalsteuerungsprobleme der in (2.1) und (2.2) beschriebenen Form, die durch abstrakte *linear-quadratische Optimalsteuerungsprobleme* bzw. *linear-quadratische Regelungsprobleme*, kurz *LQR Probleme* beschrieben werden können. Das heißt, (2.1) ist quadratisch in  $y$  und  $u$  und (2.2) ist linear in  $x$  und  $u$ .

Die optimale Steuerung dieses Problems lässt sich als Feedback-Steuerung der Form

$$\mathbf{u}_*(t) = -\mathbf{R}^{-1}\mathbf{B}^*\Pi_\infty\mathbf{x}_*(t),$$

angeben, wobei  $\Pi_\infty$  die eindeutige nichtnegative Lösung der Riccatigleichung

$$0 = \mathfrak{R}(\Pi) = \mathbf{C}^*\mathbf{Q}\mathbf{C} + \mathbf{A}^*\Pi + \Pi\mathbf{A} - \Pi\mathbf{B}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{B}^*\Pi,$$

ist.

Für die numerische Umsetzung war eine Diskretisierung erforderlich. Im Vorfeld [Saa03, Ben04] des Projektes wurde basierend auf [BK84, BI91] die Strategie “semi-discretize–optimize–semi-discretize” vorgestellt, welche auf ein lineares, endlich-dimensionales Problem führt. Analog zum unendlichdimensionalen Problem ergibt sich die Lösung wieder als Zustandsrückführung, zu deren Berechnung die Lösung einer algebraischen Riccatigleichung erforderlich ist. Dafür hat der Antragsteller schon Algorithmen (mit-)entwickelt, welche in diesem Teilprojekt eingebunden werden sollten. Die Verfahren basieren auf einem Newton-Verfahren für algebraische Riccatigleichungen, welches auf einer ADI-artigen Lösung der linearen Matrixgleichung [BLP00, LW02, Wac88] in jedem Newton-Schritt beruht.

Dabei sollte die Lösung des endlichdimensionalen Problems für immer feinere Diskretisierungen gegen die Lösung des unendlichdimensionalen Problems konvergieren. Unter einigen Voraussetzungen an das Diskretisierungsschema, die z.B. von Standard-Galerkin-Verfahren erfüllt werden, konnte in [BK84] für lineare parabolische Probleme mit verteilter Kontrolle und homogenen Dirichlet-Randbedingungen gezeigt werden, dass die Lösungen der endlichdimensionalen LQR Probleme gleichmäßig gegen die gesuchte Lösung des unendlichdimensionalen Problems konvergieren. Diese Aussagen konnten in [BS05] auf Probleme mit gemischten Randbedingungen übertragen werden.

Die obigen Ausführungen beziehen sich auf Stabilisierungsprobleme. Betrachtet man nun Folgeregelungsprobleme, das heißt, Probleme, bei denen an eine gegebene Referenztrajektorie gesteuert werden soll, dann kann man das ebenfalls als Stabilisierungsproblem für die Abweichung des aktuellen Zustands von der Referenztrajektorie auffassen. Es kam also die Frage auf, ob man dieses Problem mit den vorhandenen Routinen für das Stabilisierungsproblem lösen kann.

### 2.3.2 Nichtlineare Probleme

Hier betrachteten wir nichtlineare Diffusions-Konvektions- bzw. Diffusions-Reaktionsprobleme der Form

$$\frac{\partial}{\partial t} S\mathbf{x} + \nabla \cdot (\mathbf{C}(\mathbf{x}) - \mathbf{K}(\nabla\mathbf{x})) - \mathbf{Q}(\mathbf{x}) = \mathcal{B}\mathbf{u}(t), \quad t \in [0, T_f], \quad (2.4)$$

auf  $\Omega \in \mathbb{R}^d$ ,  $d = 1, 2, 3$ , mit geeigneten Anfangs- und Randbedingungen. Hierbei sind  $S$  ein (nur von Ort und Zeit abhängiger) Speicherterm,  $\mathbf{C}$  der konvektive Anteil,  $\mathbf{K}$  der diffusive Anteil, und  $\mathbf{Q}$  ein ungesteuerter Quellterm. Die Steuerung erfolgt entweder über den gesteuerten Quellterm  $\mathcal{B}\mathbf{u}$  oder die Randbedingungen, wobei nichtlineare Probleme auch bei linearen Gleichungen der Form (2.4) durch nichtlineare Randbedingungen entstehen.

Im ersten Schritt wurde sich hier zunächst auf semilineare und quasilineare Probleme konzentriert, wobei Steuerungsprobleme für die nichtlineare Wärmeleitungsgleichung und die Burgers-Gleichung als erste Modellbeispiele dienen sollten.

Die Lösungsstrategie folgte der modellprädiktiven Kontrolle (MPC) (bzw. Receding Horizon Regelung). Dabei werden kleinere linearisierte Probleme auf kleinen Teilintervallen gelöst. Die Approximation an die optimale Steuerung wird dann zusammengesetzt aus den optimalen Steuerungen auf den Teilintervallen.

Es gibt verschiedene Techniken, die Probleme auf den Teilintervallen zu lösen. Ein vielversprechender Zugang ist das LQG Design, welches in [IK03] vorgestellt wird. Diese Methode verlangt je nach Art der Linearisierung die Lösung von zwei algebraischen Riccati-Gleichungen oder zwei Riccati-Differentialgleichungen. Somit konnten dieselben Algorithmen wie im linearen Fall verwendet werden.

### 2.3.3 Zusammenfassung der Aufgaben

Es waren im linearen Fall also folgende Aufgaben zu bearbeiten:

- Numerische Implementierung anhand eines 2D-Modellbeispiels
- Integration des ADI-artigen Lösers für die Lösung der Riccati-Gleichung
- Untersuchung theoretischer Aspekte, um die verwendeten numerischen Methoden zu rechtfertigen
- Untersuchung von Folgeregelungsproblemen

Im nichtlinearen Fall waren folgende Schritte geplant:

- Einführende Betrachtungen zur modellprädiktiven Kontrolle
- Einführende Betrachtungen zum linear-quadratisch Gauß'schen Design
- Numerische Implementierung anhand eines 1D-Modellbeispiels



## Literaturverzeichnis (eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

- [Ben04] P. Benner. Solving large-scale control problems. *IEEE Control Systems Magazine*, 14(1):44–59, 2004.
- [BI91] H.T. Banks and K. Ito. A numerical algorithm for optimal feedback gains in high dimensional linear quadratic regulator problems. *SIAM J. Cont. Optim.*, 29(3):499–515, 1991.
- [BK84] H.T. Banks and K. Kunisch. The linear regulator problem for parabolic systems. *SIAM J. Cont. Optim.*, 22:684–698, 1984.
- [BLP00] P. Benner, J.-R. Li, and T. Penzl. Numerical solution of large Lyapunov equations, Riccati equations, and linear-quadratic control problems. Unpublished manuscript, 2000.
- [BS05] P. Benner and J. Saak. A semi-discretized heat transfer model for optimal cooling of steel profiles. In P. Benner, V. Mehrmann, and D. Sorensen, editors, *Dimension Reduction of Large-Scale Systems*, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, pages 353–356. Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, Germany, 2005.
- [IK03] K. Ito and K. Kunisch. Receding horizon control with incomplete observations. Preprint, October 2003.
- [LW02] J.-R. Li and J. White. Low rank solution of Lyapunov equations. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 24(1):260–280, 2002.
- [Saa03] J. Saak. Effiziente numerische Lösung eines Optimalsteuerungsproblems für die Abkühlung von Stahlprofilen. Diplomarbeit, Fachbereich 3/Mathematik und Informatik, Universität Bremen, D-28334 Bremen, September 2003.
- [Wac88] E.L. Wachspress. Iterative solution of the Lyapunov matrix equation. *Appl. Math. Letters*, 107:87–90, 1988.

## 2.4 Ergebnisse

Da dieses Teilprojekt nur 21 Monate am SFB beteiligt war, sind nur beschränkt Ergebnisse vorzuweisen.

### 2.4.1 Lineare Probleme

Das lineare Problem wurde anhand eines 2D-Modellbeispiels numerisch implementiert. Als Beispiel diente die optimale Abkühlung von Stahlprofilen, wie sie in Walzwerken zwischen den einzelnen Bearbeitungsschritten benötigt wird. Dabei wird aus Düsen eine kühlende Flüssigkeit auf die Oberfläche des Stahls gesprüht. Die Modellgleichungen beruhen auf [ET01a, ET01b, KSTW97, TU01] und werden unter anderem in [BS05] genauer erläutert.

Die theoretischen Grundlagen für die numerischen Methoden werden ebenfalls in [BS05] aufgezeigt. Damit konnte nachgewiesen werden, dass das endlichdimensionale System,

welches aus der Optimierung des semidiskretisierten Problems resultiert, gegen das unendlichdimensionale System konvergiert.

Für das approximierende endlichdimensionale System wurden für die Zustandsrückführung Matrizen benötigt, deren Dimensionen größer als 1000 war. Damit waren klassische Methoden zur Lösung der Riccatigleichungen nicht mehr anwendbar. In [BLP00, Pen00a] wurde ein Verfahren zum effizienten Lösen der Riccatigleichungen entwickelt, welches auch für große dünnbesetzte Riccatigleichungen angewendet werden kann. Dabei wird auf die nichtlineare Riccatigleichung ein Newtonverfahren angewendet und in jedem Schritt eine Lyapunovgleichung mit einer ADI-artigen Methode gelöst. Details sind in [BGS] zu finden.

Für die Implementierung des gesamten Problems wurden die Programmpakete **LyaPack** [Pen00b] und **ALBERTA** [SS05] verwendet. Die Initialisierung erfolgt in **MATLAB**. Die Parameter werden an eine C-Funktion übergeben, welche die FEM-Bibliothek **ALBERTA** nutzt, um die Systemmatrizen zu assemblieren. Diese werden wieder an **MATLAB** übergeben, um mit Hilfe von **LyaPack** die Rückführungsmatrix zu berechnen. In [BGS] wird dies genauer erläutert. Ergebnisse zu den numerischen Tests für das oben aufgeführte

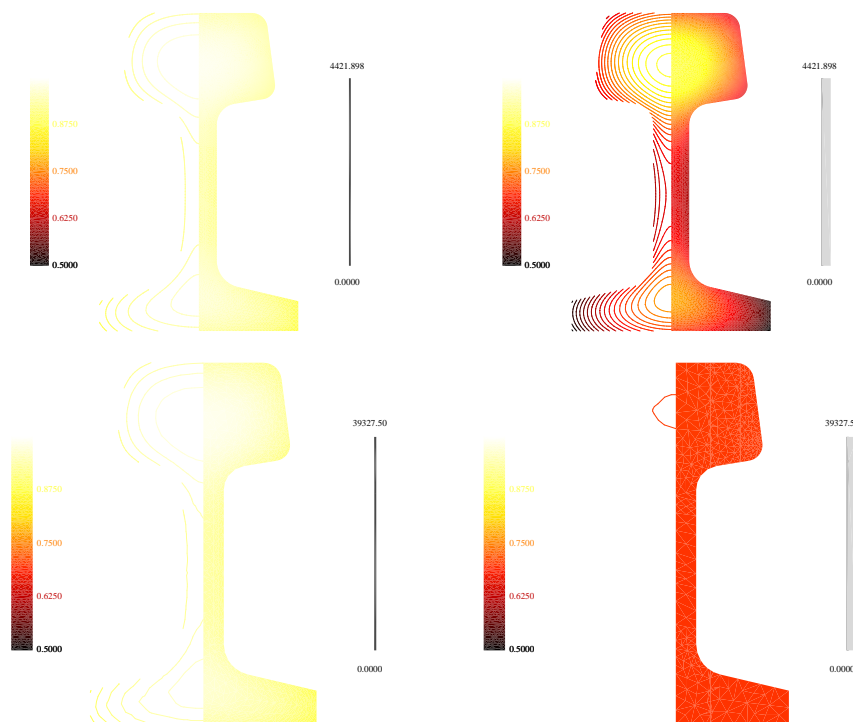


Abbildung 2.1: Anfangs- (links) und Endtemperaturverteilungen (rechts) für das Stabilisierungs- (oben) und Folgeregelungsproblem (unten) bei der optimalen Abkühlung von Stahlprofilen.

Beispiel werden in [BS05] vorgestellt. Ein beispielhaftes Testergebnis ist in Abbildung 2.1 oben dargestellt.

In [BGS] wurde ebenfalls gezeigt, wie sich das Folgeregelungsproblem als Stabilisierungsproblem für die Abweichung des aktuellen Zustands von einer gegebenen Referenztra-

jektorie auffassen lässt. Damit kann dieses Problem mit den Methoden für Stabilisierungsprobleme gelöst werden.

Numerische Resultate für das Folgeregelungsproblem sind in [BGS] zu finden. Abbildung 2.1 unten zeigt das Ergebnis einer Simulation zur Abkühlung auf konstante  $700^{\circ}\text{C}$ .

## 2.4.2 Nichtlineare Probleme

Für den nichtlinearen Fall wurde das Kontrollproblem bezüglich der eindimensionalen Burgers-Gleichung formuliert und erste Testrechnungen mit dem MPC/LQG Schema durchgeführt. Dabei stand das Stabilisierungsproblem im Vordergrund, d.h., der Zustand sollte in den Nullzustand gesteuert werden. In Abbildung 2.2 (links) sieht man

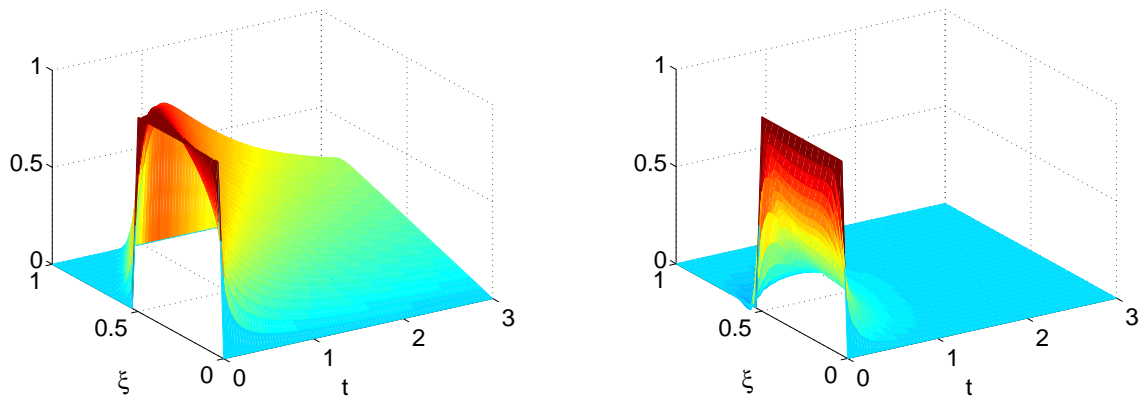


Abbildung 2.2: Lösung der ungesteuerten Burgers-Gleichung (links) und gesteuerte Lösung über das Zwei-Punkt-Randwertproblem (rechts)

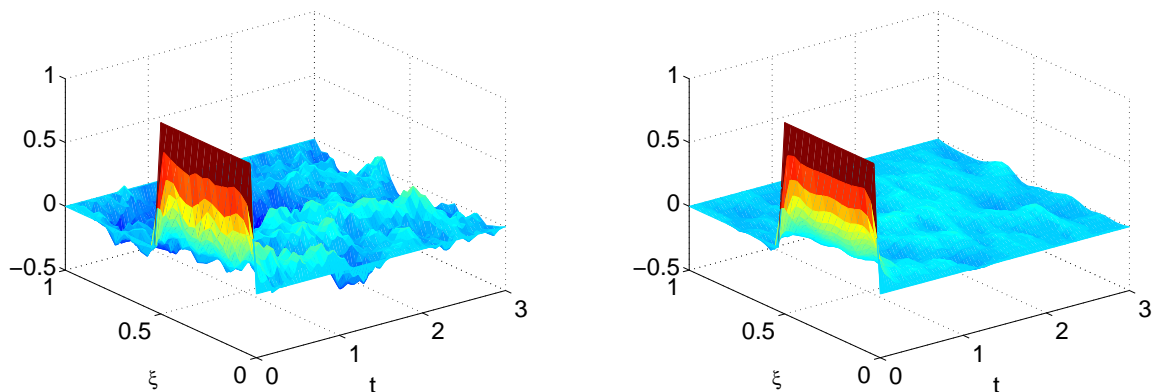


Abbildung 2.3: Gesteuerte Lösung über das Zwei-Punkt-Randwertproblem mit Eingangsstörung (links) und MPC/LQG Lösung mit Eingangsstörung (rechts)

die Lösung der Burgers-Gleichung. Die Anfangsbedingung zum Zeitpunkt  $t = 0$  ist eine Rechteckfunktion. Charakteristisch für die Burgers-Gleichung als Transportgleichung

ist, dass der Sprung an der Stelle  $\xi = \frac{1}{2}$  für wachsendes  $t$  in Richtung  $\xi = 1$  transportiert wird, während die Höhe kleiner wird. Im rechten Bild sollte der Zustand des ungestörten Systems in die Null gesteuert werden. Dazu wurde über die Hamilton-Funktion ein nicht-lineares Zwei-Punkt-Randwertproblem gelöst.

Das Zwei-Punkt-Randwertproblem wurde in Abbildung 2.3 (links) erneut gelöst, wobei das System von einer Eingangsstörung beeinflusst wurde.

Im Gegensatz dazu sieht man die MPC/LQG-Lösung in der Abbildung 2.3 (rechts). Der Zustand ist hier deutlich geglätteter als in Abbildung 2.3 (links). Fügt man dem System noch eine Ausgangsstörung (Messfehler) und eine Störung in der Anfangsbedingung hinzu, dann ergibt sich ein ähnlich geglätteter Zustand wie in Abbildung 2.3 (rechts).

## Literaturverzeichnis

- [BGS] P. Benner, S. Görner, and J. Saak. Numerical solution of optimal control problems for parabolic systems. In K.H. Hoffmann and A. Meyer, editors, *Parallel Algorithms and Cluster Computing. Implementations, Algorithms, and Applications*, Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, Germany. to appear.
- [BLP00] P. Benner, J.-R. Li, and T. Penzl. Numerical solution of large Lyapunov equations, Riccati equations, and linear-quadratic control problems. Unpublished manuscript, 2000.
- [BS05] P. Benner and J. Saak. Linear-quadratic regulator design for optimal cooling of steel profiles. Technical Report SFB393/05-05, Sonderforschungsbereich 393 *Parallele Numerische Simulation für Physik und Kontinuumsmechanik*, TU Chemnitz, D-09107 Chemnitz (Germany), 2005. Available from <http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/sfb05pr.html>.
- [ET01a] K. Eppler and F. Tröltzsch. Discrete and continuous optimal control strategies in the selective cooling of steel profiles. *Z. Angew. Math. Mech.*, 81(2):247–248, 2001.
- [ET01b] K. Eppler and F. Tröltzsch. Discrete and continuous optimal control strategies in the selective cooling of steel profiles. Preprint 01-3, DFG Schwerpunktprogramm *Echtzeit-Optimierung großer Systeme*, 2001. Available from <http://www.zib.de/dfg-echtzeit/Publikationen/Preprints/Preprint-01-3.html>.
- [KSTW97] R. Kregel, R. Standke, F. Tröltzsch, and H. Wehage. Mathematisches Modell einer optimal gesteuerten Abkühlung von Profilstählen in Kühlstrecken. Preprint 98-6, Fakultät für Mathematik TU Chemnitz, November 1997.
- [Pen00a] T. Penzl. A cyclic low rank Smith method for large sparse Lyapunov equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(4):1401–1418, 2000.
- [Pen00b] T. Penzl. LYAPACK Users Guide. Technical Report SFB393/00-33, Sonderforschungsbereich 393 *Numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern*, TU Chemnitz, 09107 Chemnitz, FRG, 2000. Available from <http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/sfb00pr.html>.

- [SS05] A. Schmidt and K. Siebert. *Design of Adaptive Finite Element Software; The Finite Element Toolbox ALBERTA*, volume 42 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*. Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, 2005.
- [TU01] F. Tröltzsch and A. Unger. Fast solution of optimal control problems in the selective cooling of steel. *Z. Angew. Math. Mech.*, 81:447–456, 2001.

## 2.5 Offene Fragen / Ausblick

Folgende Dinge konnten aufgrund des zu kurzen Zeitraums noch nicht untersucht bzw. umgesetzt werden:

- Weiterentwicklung des 2D-Lösers auf nicht-selbstadjungierte Probleme, wobei für die Lösung der entstehenden Gleichungssysteme auch Schnittstellen zu direkten Lösern geschaffen werden sollen. Geeignet erscheinen hier insbesondere UMFPACK<sup>1</sup> und PARDISO<sup>2</sup> für nicht-selbstadjungierte Probleme, sowie TAUCS<sup>3</sup> und PARDISO für selbstadjungierte Probleme. Außerdem sollen die Schnittstellen zu den in ALBERTA-1.2 enthaltenen iterativen Methoden (PCG für selbstadjungierte Probleme, vorkonditioniertes GMRES und BiCGStab für nicht-selbstadjungierte Probleme) bereitgestellt/erhalten werden, so dass ein möglichst allgemeiner und vielseitig einsetzbarer Löser entsteht.
- Entwicklung von Residuen-basierten a posteriori Fehlerschätzern für das gesteuerte Problem, wobei dies durch eine Anpassung der in der FEM Bibliothek ALBERTA-1.2 enthaltenen Fehlerschätzer erfolgen soll.
- Erweiterung des Lösers auf lineare 3D-Probleme
- Implementierung des nichtlinearen MPC/LQG Problems für 2D und 3D
- Theoretische Untersuchungen zur Konvergenz des MPC/LQG Schemas

Teile der offenen Fragen sollen im Laufe des DFG-Nachfolgeprojektes *Numerische Lösung von Optimalsteuerungsproblemen für instationäre Diffusions-Konvektions- und Diffusions-Reaktionsgleichungen* (BE3715/1-1) bearbeitet werden.

---

<sup>1</sup>Siehe <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/umfpack>.

<sup>2</sup>Siehe <http://www.computational.unibas.ch/cs/scicomp/software/pardiso/>

<sup>3</sup>Siehe <http://www.tau.ac.il/~stoledo/taucs/>.



Projektbereich

**B**

Hard- und Softwarearchitekturen





Teilprojekt

**B8**

Parallelisierung irregulärer numerischer Algorithmen



## 2.1 Teilprojekt B8

Parallelisierung irregularer numerischer Algorithmen

### 2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Gudula Runger  
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, Praktische Informatik, Projektstelle: 01/2002 - 12/2005

Dr. Robert Reilein-Ru, Praktische Informatik, Grundausrattung: 07/2001 - 09/2005

## 2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Gegenstand des Teilprojektes ist die effiziente parallele Realisierung irregularer Algorithmen auf Rechnern mit verteiltem Speicher, Clustern oder Clustern von SMPs (*symmetric multiprocessor*). Die Klasse der irregularen Algorithmen umfasst 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ares Verhalten sind vielfaltig und umfassen dunn-besetzte, blockstrukturierte, adaptive oder hierarchische Anwendungsalgorithmen mit unterschiedlicher Dynamik der Daten- und Berechnungsstrukturen. Entsprechend der Auspragung der Irregularitat variieren auch die anzuwendenden 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arer 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 Taskpools fur das Scheduling und die 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 Softwareerstel-

lung erganzend einbringen konnen. Als Anwendungsalgorithmen wurden das hierarchische Radiosity-Verfahren, adaptive gitterbasierte Losungsverfahren fur partielle Differentialgleichungen, strukturiert irregulare Probleme sowie Berechnungen im Zusammenhang mit nichtlinearen dynamischen Systemen untersucht. Letztere erfordern Kooperationen mit anderen Teilprojekten des SFB393. 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 Multiprozessor Tasks,
- Parallelisierung im Bereich nichtlinearer dynamischer Systeme.

## 2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

### 2.3.1 Task Pool Teams zur Parallelisierung hierarchischer Algorithmen

Das hierarchische Radiosity Verfahren, ein globales Beleuchtungsverfahren der Computergrafik, dient zur Simulation der Beleuchtung 3-dimensionaler Szenen in geschlossenen Rumen. 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<sup>+</sup>95, PRR98, KR02, KR04]. Dabei wurde der Algorithmus in Berechnungsaufgaben, sogenannte Tasks, unterteilt und diese mit Taskpools [SHT<sup>+</sup>95, But97, RR00c] abgearbeitet.

Taskpools werden zur dynamischen Rebalancierung der Last eingesetzt. Die Taskpool Datenstruktur dient hierbei zum Speichern und Verwalten der Tasks. Eine feste Anzahl von Threads entnimmt Tasks aus dem Pool zur Abarbeitung und stellt dynamisch neue Tasks ein. Bei entsprechendem Scheduling der Threads auf die verfugbaren Prozessoren erfolgt eine effiziente Auslastung, da nach Abarbeitung eines Tasks durch einen Taskpoolthread automatisch ein neuer Task aus dem Pool entnommen wird. Je nach Anwendungsproblem konnen verschiedene interne Umsetzungen der Taskpools von Nutzen sein. Gangig sind Pools mit einer zentralen Taskqueue aber auch mit separaten Queues fur die einzelnen Threads. Vorteilhaft beim Einsatz mehrerer Taskqueues sind die fehlenden Zugriffskonflikte bei zeitgleich zugreifende Threads. Um hier jedoch Lastbalancierung zu erreichen, sind zusatzliche Mechanismen, z. B. Taskstealing, 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 Kommunika-

tionsmustern 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 asynchronen, multi-threaded fahigen Kommunikationsroutinen, verteilten Verwaltungsdatenstrukturen fur die effiziente Identifikation von Daten in nicht-lokalen Speicherbereichen und geeigneten Lastbalancierungsmechanismen fur die Migration von Tasks zwischen den Clusterknoten. Zur Umsetzung der Anforderungen wurde im Projekt das Konzept der Task Pool Teams entwickelt.

### 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 der Herausforderungen der parallelen Realisierung adaptiver gitterbasierter Losungsverfahren fur partielle Differentialgleichungen bildet die durch die Verteilung der adaptiven Gitterstrukturen auf die Prozessoren notwendige Organisation eines effizienten Datentransfers. Datenstrukturbestandteile des Gitters, die sich bzw. deren uber- oder untergeordnete Strukturen sich 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.

Fur die Berechnung balancierter Partitionen existieren eine Reihe von Algorithmen, die je nach Eingabeproblem und Anwendung unterschiedlich gute Leistung erzielen. [TDF06] gibt einen Uberblick und unterscheidet nach geometrischen und graphbasierten Methoden. Space filling curves [GZ02] und rekursive Bisektionstechniken [Pot96, Els97] arbeiten mit den Koordinatenwerten der zu partitionierenden Elemente und zahlen deshalb zu den geometrischen Methoden. Graphbasierte Methoden fuhren die Berechnung der Umverteilung auf das NP-vollstandige Graphpartitionierungsproblem zuruck. Die rekursive Graphbisektionen [KL70] betrachtet im Gegensatz zur rekursiven Spektralbisektionen [PSWB92], die mit Eigenwerten der Adjazenzmatrix arbeitet, lokale Grapheneigenschaften. Multilevel-Algorithmen zur Graphpartitionierung [KK99, HL95, SKK00] stellen wie die rekursive Spektralbisektionen globale Methoden dar und ahneln der Idee der Mehrgitterverfahren. Algorithmen zur effizienten Partitionierung implementieren beispielsweise ParMETIS [KSK02], METIS [KK95] und CHACO [HL93]. Die tatsachliche effiziente Umverteilung anhand der neu berechneten Partitionen liegt meist in der Verantwortung des Anwendungsprogrammierers.

Mit Hinblick auf die variable Einsetzbarkeit adaptiver gitterbasierter Lösungsverfahren bietet ein gekapselt implementierter Lösungsansatz oben genannter Probleme erhebliche Vorteile. So können Erweiterungen und Optimierungen leichter eingebracht, Plattformunabhängigkeit erzielt und der Anwendungsprogrammierer von der Realisierung effizienter Kommunikationmechanismen und verteilter Datenstrukturen entlastet werden. Systeme mit Unterstützung irregulärer Anwendungen durch Aufsetzen eines globalen Adressraummodells sind beispielsweise Titanium [YSP<sup>+</sup>98] oder TreadMarks [ACD<sup>+</sup>96]. Die Sicht auf einen verteilten Adressraum für den Anwender zu erhalten, bietet jedoch durchaus Vorteile, da vom Anwendungsprogrammierer anwendungsspezifische Details und Optimierungen speziell für verteilte Berechnungen eingebracht werden können. Zudem existiert meist bereits eine sequentielle Programmversion, die dann mit nicht zu umfangreichen Modifizierungen auf verteilten Speicher portiert werden kann.

### 2.3.3 Kommunikationsbibliothek für orthogonale Prozessorgruppen

Obwohl die parallele Programmierung im SPMD-Stil mit Standardkommunikationsbibliotheken wie MPI oder PVM häufig zu guten Ergebnissen auf Rechnern mit verteiltem Speicher führt, kann dies auf Maschinen mit sehr großer Prozessoranzahl Skalierbarkeits- und Effizienzprobleme verursachen, insbesondere wenn kollektive Kommunikationsoperationen eingesetzt werden, etwa für Konvergenztests oder zur Akkumulation lokaler Teilergebnisse. Ein Grund ist die Ausführungszeit kollektiver Kommunikationsoperationen, die logarithmisch oder linear in der Anzahl der teilnehmenden Prozesse steigt [LYSK04, RR04e], so dass Kommunikation auf kleineren Teilgruppen von Prozessoren ausgeführt werden sollte, wenn dies aus algorithmischen Gründen möglich ist.

Eine solche Eigenschaft weisen Algorithmen mit zwei- oder höher-dimensionalen Taskgittern auf, in denen Berechnungs- und Kommunikationsphasen der Abarbeitung so strukturiert sind, dass Tasks jeweils nur mit Tasks innerhalb eines oder weniger Teilgitter 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 höherdimensionales Prozessorgitter bereit, für das eine feste Anzahl von Prozessorpartitionen betrachtet wird, die jeweils disjunkten mehrdimensionalen Teilgittern entsprechen. Ein entsprechendes Mapping von Tasks zu Prozessoren führt so zu Berechnungs- und Kommunikationsphasen auf den alternativ zur Verfügung stehenden Partitionen im Gruppen-SPMD-Stil. Zur Programmierung solcher Programmstrukturen wird eine komfortable Programmierumgebung benötigt, die einerseits eine leichte Spezifikation der Task-, Partitions- und Mappingstruktur erlaubt und andererseits die benötigten Gruppen, Kommunikatoren und Zuordnungen im Hintergrund effizient aufbaut und verwaltet.

### 2.3.4 Bibliotheksunterstutzung fur hierarchische Multiprozessor Tasks

Multiprozessor Tasks (M-Task) bezeichnen Teilaufgaben eines Anwendungsalgorithmus, die jeweils auf mehreren Prozessoren ausgefuhrt werden konnen. Der gesamte Algorithmus kann aus einer Menge solcher, miteinander kooperierender Multiprozessor Tasks bestehen und durch einen M-Task Graphen mit Abhangigkeiten dargestellt werden. Solche auch als strukturiert irregular bezeichnete Algorithmen finden sich in groen gekoppelten Anwendungen, aber auch in neuen parallelen Losungsverfahren fur gewohnliche Differentialgleichungssysteme oder in grobkornigen hierarchischen Verfahren 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. Auch hier konnen Skalierbarkeit und Effizienz durch Nutzung von Prozessorteilgruppen erreicht werden. Zur Programmierung existieren eine Reihe von Ansatzen, u. a. Fx [SSOG93, SY97], Paradigm [BCG<sup>+</sup>95, RSB97], Braid, Opus und Orca. 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 Taskscheduling genutzt werden [TWY92, TLW<sup>+</sup>94, RR96, RR00a]. Eine Herausforderung ist die dynamische Entstehung von M-Task Strukturen, beispielsweise bei hierarchischen Algorithmen. Hierfur muss die Erzeugung und Abarbeitung 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 Reorthogonalisierung der erzeugten Matrix von Lyapunovvektoren unterbrochen werden.

Die Berechnung der Matrix der Lyapunovvektoren und die Reorthogonalisierung stellen den zeitaufwendigsten Programmteil 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 hohe Effizienz zu erzielen.

### Literaturverzeichnis zu 2.3 (eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

- [ACD<sup>+</sup>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<sup>+</sup>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.
- [Els97] U. Elsner. Graph Partitioning. Technical Report SFB 393/97\_27, TU Chemnitz, Chemnitz, Germany, 1997.
- [GZ02] M. Griebel and G. Zumbusch. In H. Rollnik and D. Wolf, editors, *NIC Symposium 2001*, volume 9, pages 479–492. Forschungszentrum Julich, 2002.
- [HL93] B. Hendrickson and R. Leland. The CHACO User’s Guide. Technical Report 93-2339, Sandia National Lab, Albuquerque, NM, 1993.
- [HL95] B. Hendrickson and R. Leland. A multi-level algorithm for partitioning graphs. In *Proc. of the ACM/IEEE Conf. on Supercomputing (http://www.supercomp.org/sc95/proceedings)*, San Diego, CA, USA, 1995.
- [KK95] G. Karypis and V. Kumar. *METIS Unstructured Graph Partitioning and Sparse Matrix Ordering System*. <http://www-users.cs.umn.edu/~karypis/metis/>, 1995.
- [KK99] G. Karypis and V. Kumar. A Fast and High 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*. <http://www-users.cs.umn.edu/~karypis/metis/>, 2002.
- [LYSK04] G. R. Luecke, J. Yuan, S. Spanoyannis, and M. Kraeva. Performance and Scalability of MPI on PC Clusters. *Concurrency: Practice and Experience*, 16(1):79–107, 2004.



- [Pot96] A. Pothen. Graph Partitioning Algorithms with Applications to Scientific Computing. In D. F. Keyws, A. H. Sameh, and V. Venkatakrisnan, editors, *Parallel Numerical Algorithms*. Kluwer, 1996.
- [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.
- [PSWB92] A. Pothen, H. D. Simon, L. Wang, and S. T. Barnard. Towards a Fast Implementation of Spectral Nested Dissection. In *Proc. of the ACM/IEEE Conf. on Supercomputing*, pages 42–51, 1992.
- [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.
- [RR04] T. Rauber and G. Runger. Modelling the Runtime of Scientific Programs on Parallel Computers. In Y. Pan and L. T. Yang, editors, *Parallel and Distributed Scientific and Engineering Computing: Practice and Experience*, volume 15 of *Advances in Computation: Theory and Practice*, pages 51–65. Nova Science Publishers, 2004.
- [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<sup>+</sup>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. In *Proc. of the ACM/IEEE Conf. on Supercomputing, CD-ROM*, Dallas, TX, USA, 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.

- [TDF06] J. D. Teresco, K. D. Devine, and J. E. Flaherty. Partitioning and Dynamic Load Balancing for the Numerical Solution of Partial Differential Equations. In A. M. Bruaset and A. Tveito, editors, *Numerical Solution of Partial Differential Equations on Parallel Computers, Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, volume 51. Springer, 2006.
- [TLW<sup>+</sup>94] J. Turek, W. Ludwig, J. Wolf, L. Fleischer, P. Tiwari, J. Glasgow, U. Schwieghelhohn, 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<sup>+</sup>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<sup>+</sup>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 [HR06b] stellen ein Programmierkonzept fur verteilten Adressraum bzw. hybriden Adressraum dar und konnen als Erweiterung und Verallgemeinerung des Taskpool Konzeptes verstanden werden. Dem Nutzer werden Task Pool Teams uber eine einfache Schnittstelle zur Verfugung gestellt. Das hybride Programmiermodell kombiniert Shared-Memory- und Message-Passing-Programmierung durch Taskpools und asynchrone Kommunikationsroutinen. Das Konzept der Taskpools wird fur Plattformen mit gemeinsamem Speicher zur dynamischen Rebalancierung der Last eingesetzt. Task Pool Teams stellen verschiedene Taskpool Realisierungen (zentrale, verteilte Taskqueues, LI-FO/FIFO Zugriffsprinzip fur die Taskqueues, Taskstealingmechanismen) zur Verfugung, 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 Taskpools 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 [HR03a].

Task Pool Teams wurden fur die Umsetzung des hierarchischen Radosity Algorithmus [HR03b] eingesetzt. Zur Erfassung der dynamisch variierenden Kommunikationsmuster wurden zusatzlich verteilte Verwaltungsdatenstrukturen entwickelt und in den Radosity 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 anwendungsspezifische Optimierung wurde ein Software-Cache implementiert, der nicht-lokale Daten im lokalen Speicher dupliziert und in festgelegten Abstanden aktualisiert.

Task Pool Teams unterstutzen zweistufige Lastbalancierung. So wird innerhalb eines Clusterknotens je nach eingesetzter Task Pool Implementierung eine Balancierung der Tasks unter den verfugbaren CPUs durch zentrale Taskqueues bzw. Taskstealingmechanismen erzielt. Zusatzlich konnen durch die Migration von Tasks die Lastimbilanzen zwischen den verschiedenen Clusterknoten verringert werden. Der Nutzer hat durch Auswahl geeigneter Taskpool Implementierungen die Moglichkeit zwischen den verschiedenen Lastbalancierungsebenen je nach Erfordernis des Anwendungsalgorithmus zu wahlen. Ein globales Optimierungsverfahren [HR02] wurde mit mehrstufiger Lastbalancierung realisiert und getestet [HR06b].

Task Pool Teams und Task Pool Team Konzepte wurden weiterhin zur parallelen Realisierung der Simulation von Diffusionsprozessen auf Fraktalen [Hof05, HHRS05] und einer auf Simulated Annealing basierenden Anwendung [Sch04] des SFB Teilprojektes C3 eingesetzt. Insbesondere bei der Simulation von Diffusionsprozessen konnte im Vergleich zur parallelen Implementierung mit MPI aufgrund des Einsatzes variablerer Kommunikationsmuster eine erhebliche Leistungssteigerung erzielt werden.

## 2.4.2 Kommunikations- und Datenverteilungsschicht fur adaptive Algorithmen

Innerhalb des Teilprojektes 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 [HR04] zur Erzeugung sogenannter Koharenzlisten basieren auf den bereits bei den verteilten Verwaltungsdatenstrukturen des hierarchischen Radosity 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 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 korrektheitserhaltende 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 durch die Kommunikationsschicht ermittelt.

Die parallele Abarbeitung der FEM Implementierung wird insbesondere auf SMP Clustern durch eine Vielzahl von Hardware und anwendungsspezifischen Faktoren beeinflusst. Zur effizienten Ausfuhrung und fur dynamische Rebalancierungsentscheidungen wurden diese Faktoren und ihre Abhangigkeiten ermittelt [HR06a]. Die Kommunikations- und Datenverteilungsschicht wurden hinsichtlich der Funktionalitat so gestaltet, dass zur Lastverteilung notwendige Datenumverteilungen unterstutzt werden. Zur Berechnung der neuen Partitionen wurden verschiedene Algorithmen, u. a. aus ParMETIS, eingebunden und ihre Leistung hinsichtlich verschiedener Eingabeprobleme getestet sowie die Korrektheit der implementierten Umverteilungsfunktionen der Kommunikations- und Datenverteilungsschicht verifiziert.

### 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, RRR04a] 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 herkommlichen parallelen Implementierungen erreicht werden.

#### 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 [RR04c], [RR05b], [RR05d]. Das bereitgestellte Bibliotheks-API [RR02] 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 Schachteln von Funktionen beider Gruppen ist moglich, d. h. neu erzeugte M-Tasks konnen 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 wurden hierarchische Strukturen bei unterschiedlichen Verfahren zur parallelen Matrix-Matrix-Multiplikation [HRR04a, HRR04b], die das derzeit schnellste parallele Verfahren an Effizienz ubertreffen, sowie Verfahren zur Losung gewohnlicher Differentialgleichungssysteme betrachtet [RR04a]. Zusatzliche Effizienzgewinne bei der Losung gewohnlicher Differentialgleichungssysteme konnten durch Lokalitatsausnutzung erzielt werden [RR03, RR04b, RR04d]. 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.

Zur Unterstutzung der M-Task Programmierung wurde eine Bibliothek fur die Umverteilung feldbasierter Datenstrukturen realisiert [RR05a, RR06]. Es werden ein Datenverteilungsformat und Umverteilungsoperationen fur Programme mit gemischter Task- und Datenparallelitat auf verteiltem Speicher zur Verfugung gestellt. Der Einsatz von M-Task Programmierung fur heterogene Systeme und Grids wurde durch eine Trennung der Beschreibung der M-Task Struktur von deren verteilter Ausfuhung ermoglicht [RR05c]. Hierfur werden die M-Tasks explizit durch einen speziellen Taskgraph reprasentiert, dessen Teilgraphen von den verschiedenen Servern der verteilten Architektur zur Ausfuhung gebracht bzw. re-scheduled werden.

[RRR04b, Rei05] stellen das TwoL Modell, ein Sprach- und Compileransatz zur Realisierung von Programmen mit gemischter Task- und Datenparallelitat, vor. Ausgehend von der Spezifikation der inharenten Parallelitat eines Algorithmus wird in einem Transformationsprozess ein Koordinationsprogramm erzeugt, was an die spezifischen Parameter der Zielplattform angepasst ist.

## 2.4.5 Parallelisierung im Bereich nichtlinearer dynamischer Systeme

Die durchgefuhrten Arbeiten konzentrierten sich auf parallele Orthogonalisierungsverfahren und deren effiziente Einbindung in die Programmumgebung, wobei verschiedene Varianten entworfen, realisiert und getestet wurden.

Zur Orthogonalisierung wurden parallele Versionen der Gram-Schmidt Orthogonalisierung [RS05] 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 Datenaufteilung in spalten- und/oder zeilenzyklische Blockverteilung der Eingabematrix auf einem logisch zweidimensionalen Prozessgitter und der verwendeten BLAS Basisoperationen. Weiterhin wurden Varianten von Gram-Schmidt und QR-Dekomposition entwickelt, die eine Uberlappung von Kommunikation und Berechnung erlauben und somit die Effizienz der Orthogonalisierung deutlich erhohen.

Es konnte eine unmittelbare Abhangigkeit zwischen der Laufzeit der verwendeten Orthogonalisierungsalgorithmen und den verwendeten Blocklangen sowie der Kantenlange des Prozessgitters festgestellt werden. Die Ursache sind zum einen erhohete Lastimbilanzen, die einer Steigerung der Effizienz der lokalen BLAS Operationen bei wachsender Blocklange entgegenwirken. Zum anderen wirken sich unterschiedliche Ausdehnungen des Prozessgitters entscheidend auf das Kommunikationsvolumen aus. Es wurde daher an der Schnittstelle zwischen Integrationsteil und Reorthogonalisierung eine Moglichkeit der Umverteilung der Matrix der Lyapunovvektoren vorgesehen, die durch Anpassung der Blocklangen und Gitterdimensionen eine effizientere Reorthogonalisierung unterstutzt.

Je nach Kommunikationsoverhead der Umverteilung und Kosten der parallelen Reorthogonalisierung kann auch eine suboptimale Orthogonalisierungskomponente zur besten Gesamtleistung fuhren. Starken Einfluss hat hierbei die verwendete parallele Hardware. Es wurden daher Experimente auf verschiedenen Plattformen, wie dem Beowulf-Cluster CLiC und einem Dual-XEON-Cluster der TU-Chemnitz sowie dem IBM Regatta-System des NIC durchgefuhrt [RRSY06]. Die entstandene Bibliothek von parallelen Orthogonalisierungsverfahren und zugehorigen Schnittstellen [Sch05] erlaubt eine flexible, modulare Zusammensetzung des Gesamtprogramms zur effizienten Nutzung der Hardware.

## Literaturverzeichnis

### Referierte Zeitschriftenbeitrage

- [HRT05] K. Hering, G. Runger, and S. Trautmann. Modular Construction of Model Partitioning Processes for Parallel Logic Simulation, *Int. Journal of Computational Science and Engineering*, Inderscience, 1:22–33, 2005.
- [HR06b] J. Hippold and G. Runger. Task Pool Teams: A Hybrid Programming Environment for Irregular Algorithms on SMP Clusters. *Erscheint in: Concurrency and Computation: Practice and Experience*, 2006.

- [KRR05] C. Koziar, R. Reilein, and G. Runger. Load imbalance aspects in atmosphere simulations, Angenommen fur Special Issue: Int. Journal of Computational Science and Engineering, Inderscience, 2005.
- [OR04] J. O’Donnell and G. Runger. Derivation of a Logarithmic Time Carry Lookahead Addition Circuit. *Journ. of Functional Programming, Special Issue on Functional Pearls*, 14(6):697–713, 2004.
- [RR04b] T. Rauber and G. Runger. Improving Locality for ODE Solvers by Program Transformations. *Scientific Programming*, 12(3):133–154, 2004.
- [RR04d] T. Rauber and G. Runger. Program-Based Locality Measures for Scientific Computing. *Int. Journ. of Foundations of Computer Science, Special Issue on Advances in Parallel and Distributed Computational Models*, 15(3):535–554, 2004.
- [RR05d] T. Rauber and G. Runger. Tlib - A Library to Support Programming with Hierarchical Multi-processor Tasks. *Journ. of Parallel and Distributed Comput.*, 65(4):347–360, 2005.
- [RR06] T. Rauber and G. Runger. A Data Re-Distribution Library for Multi-Processor Task Programming. *Angenommen fur: International Journal of Foundations of Computer Science*, 2006.
- [RRR04a] 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

- [RR04c] 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.
- [RR04e] T. Rauber and G. Runger. Modelling the Runtime of Scientific Programs on Parallel Computers. In Y. Pan and L. T. Yang, editors, *Parallel and Distributed Scientific and Engineering Computing: Practice and Experience*, volume 15 of *Advances in Computation: Theory and Practice*, pages 51–65. Nova Science Publishers, 2004.
- [RR05b] T. Rauber and G. Runger. Exploiting Multiple Levels of Parallelism in Scientific Computing. In A. Doncescu, T. Leng, M. K. Ng, and L. T. Yang, editors, *IFIP TC5 Workshop on High Performance Computational Science and Engineering (HPCSE), World Computer Congress*, volume 172 of *High Performance Computational Science and Engineering*. Springer, Toulouse, France, 2005.

### 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 SMP Clusters. In J. Dongarra, D. Lafarenza, and S. Orlando, editors, *Proc. of the 10th EuroPVM/MPI*, volume 2840 of *LNCS*, pages 455–463, Venice, Italy, 2003. Springer.

- [HR03b] J. Hippold and G. Runger. Task Pool Teams for Implementing Irregular Algorithms on Clusters of SMPs. In *Proc. of the 17th Intl. Parallel and Distributed Processing Symp. (IPDPS'03)*, CD-ROM, Nice, France, 2003. IEEE Computer Society Press.
- [HR04] J. Hippold and G. Runger. A Data Management and Communication Layer for Adaptive, Hexahedral FEM. In M. Danelutto, D. Laforenza, and M. Vanneschi, editors, *Proc. of Euro-Par 2004*, volume 3149 of *LNCS*, pages 718–725, Pisa, Italy, 2004. Springer.
- [HR06a] J. Hippold and G. Runger. Performance Analysis for Parallel Adaptive FEM on SMP Clusters. In Dongarra, J.; Madsen, K.; Wasniewski, J., editors, *Applied Parallel Computing - State of the Art in Scientific Computing. Proc. of PARA'04*, volume 3732 of *LNCS*, pages 730–739, Lyngby (Copenhagen), Denmark, 2006. Springer.
- [HRR04a] 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.
- [HRR04b] S. Hunold, T. Rauber, and G. Runger. Multilevel Hierarchical Matrix-Matrix Multiplication on Clusters. In *Proc. of the 18th Int. Conf. of Supercomputing (ICS'04)*, pages 136–145, Saint-Malo, France, 2004. ACM.
- [ORR04] J. O'Donnell, T. Rauber, and G. Runger. Functional Realization of Coordination Environments for Mixed Parallelism. In *Proc. of IPDPS'04 Workshop on Advances in Parallel and Distributed Computational Models (APDCM'04)*, CD-ROM, Santa Fe, New Mexico, USA, 2004. IEEE.
- [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.
- [RR03] T. Rauber and G. Runger. Program-Based Locality Measures for Scientific Computing. In *Proc. of IPDPS: Workshop on Advances in Parallel & Distributed Computational Models (APDCM03)*, (CD-ROM), Nizza, Frankreich, 2003.
- [RR04a] T. Rauber and G. Runger. Execution Schemes for Parallel Adams Methods. In M. Danelutto, D. Laforenza, and M. Vanneschi, editors, *Proc. of Euro-Par 2004*, volume 3149 of *LNCS*, pages 708–717, Pisa, Italy, 2004. Springer.
- [RR05a] T. Rauber and G. Runger. A Data-Re-Distribution Library for Multi-Processor Task Programming. In *Proc. of the 19th IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS'05) - Workshop 8*, Denver, CA, USA, 2005. IEEE.
- [RR05c] T. Rauber and G. Runger. M-Task-Programming for Heterogeneous Systems and Grid Environments. In *Proc. of the 19th IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS'05) - Workshop 4*, Denver, CA, USA, 2005. IEEE.
- [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.
- [RRR04b] T. Rauber, R. Reilein, and G. Runger. On Compiler Support for Mixed Task and Data Parallelism. In G. R. Joubert, W. E. Nagel, F. J. Peters, and W. V. Walter, editors, *Proc. of 12th Int. Conf. on Parallel Computing (ParCo'03)*, Parallel Computing: Software Technology, Algorithms, Architectures & Applications, pages 23–30, Dresden, Germany, 2004. Elsevier.
- [RRSY06] G. Radons, G. Runger, M. Schwind, and H. Yang. Parallel Algorithms for the Determination of Lyapunov Characteristics of Large Nonlinear Dynamical Systems. In Dongarra, J.; Madsen, K.; Wasniewski, J., editors, *Applied Parallel Computing - State of the Art in Scientific Computing. Proc. of PARA '04*, volume 3732 of LNCS, pages 1131–1140, Lyngby (Copenhagen), Denmark, 2006. Springer.
- [RS05] G. Runger and M. Schwind. Comparison of Different Parallel Modified Gram-Schmidt Algorithms. In *Proc. of 11th International Euro-Par Conference*, LNCS 3648, pages 826–836, Lisboa, Portugal, 2005. Springer.

#### Interne Berichte und Arbeiten

- [HHRS05] K. H. Hoffmann, M. Hofmann, G. Runger, and S. Seeger. Task Pool Teams for Implementing Irregular Algorithms on Clusters of SMPs. Preprint SFB393/05, TU-Chemnitz, 2005.
- [Hof05] M. Hofmann. Verwendung von Task Pool Team Konzepten zur parallelen Implementierung von Diffusionsprozessen auf Fraktalen, Studienarbeit TU-Chemnitz, Fakultat fur Informatik, 2005.
- [HR02] J. Hippold and G. Runger. Task Pool Teams for Implementing Irregular Algorithms on Clusters of SMPs. Preprint SFB393/02-18, TU-Chemnitz, 2002.
- [Rei05] R. Reilein. *Eine komponentenbasierte Realisierung der TwoL Spracharchitektur*. Dissertation, TU Chemnitz, Fakultat fur Informatik, 2005.
- [Sch04] C. Schuster. Evaluierung von Task Pool Teams fur eine Master Worker Anwendung, Studienarbeit TU-Chemnitz, Fakultat fur Informatik, 2004.
- [Sch05] M. Schwind. Implementierung und Laufzeitevaluierung paralleler Algorithmen zur Gram-Schmidt Orthogonalisierung und zur QR-Zerlegung, Diplomarbeit TU-Chemnitz, Fakultat fur Informatik, 2005.



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

### 2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. Philipp Cain  
Dr. Viktor Cerovski  
Alexander Croy  
Rajkumar Brojen Singh  
Dr. Ahmed Jellal  
M.Sc. Macleans Ndawana  
Peter Karmann

## 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? Welche Bedeutung haben atypische Eigenzustände in den Bandausläufern und in der Nähe des Übergangs, wo anormal große Amplituden als Vorläufer von Lokalisierung im metallischen Bereich gedeutet wurden? Welchen Einfluss haben langreichweitige Korrelationen in der Unordnung auf das kritische Verhalten am Phasenübergang? 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 Renormierungsgruppenansatz wird bei der Beschreibung des Quanten-Hall-Effektes benutzt. Die direkte Berechnung der thermischen und elektrischen Transportgrößen geschieht mit Hilfe der linearen Antwort-Theorie.

## 2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

### 2.3.1 Teilaufgabe “Schichtsysteme”

Umfangreiche analytische und numerische Untersuchungen des Anderson-Modells haben gezeigt, dass im reell-symmetrischen Fall (also für die orthogonale Universalitätsklasse) die untere kritische Dimension den Wert 2 annimmt, dass also in zweidimensionalen Systemen alle Eigenzustände lokalisiert sind und nur in dreidimensionalen Systemen ein Metall-Isolator-Übergang auftritt. Experimentell wurde jedoch auch in zweidimensionalen Systemen ein Phasenübergang beobachtet. Deshalb erschien es interessant, Schichtsysteme zu untersuchen, also das Anderson-Modell auf zweidimensionale Strukturen endlicher Dicke anzuwenden.

### 2.3.2 Teilaufgabe “Binäre Unordnung”

Das Anderson-Modell mit binärer Unordnung, das heißt aus einer dichotomischen Verteilung zufällig gewählten potentiellen Energien, modelliert sehr gut binäre Legierungen. Bei genügend großem Unterschied der beiden Werte der potentiellen Energien spaltet das Spektrum in 2 separate Bänder auf. Im Grenzfall ergibt sich das Quanten-Perkulations-Modell. In der mathematischen Literatur ist das Anderson-Modell mit binärer Unordnung als Bernoulli-Anderson-Modell bekannt und von besonderem Interesse, weil im Gegensatz zu dem normalen Anderson-Modell mit stetiger Verteilung der potentiellen Energien in dieser Variante mit singulärer Verteilung nur wenige analytische Ergebnisse vorliegen.

### 2.3.3 Teilaufgabe “Langreichweitige Unordnung”

Um den Einfluss von langreichweitig korrelierten Unordnungspotentialen auf das kritische Verhalten beim Anderson-Modell zu untersuchen, kann man durch eine im Fourier-Raum durchgeführte Faltung der Werte der potentiellen Energien auf eine einfache Weise numerisch zufällige Potentialwerte bestimmen, deren Korrelationen mit einem Potenzgesetz abfallen. Die sich so ergebende Unordnung wird auch als “scale-free“ bezeichnet,



weil sie unabhängig von der gewählten Längenskala ist.

### 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 “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.

### 2.3.6 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.

### 2.3.7 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

In den bisherigen Förderungsperioden wurden verschiedene Algorithmen weiterentwickelt und parallelisiert. Dabei handelt es sich insbesondere um den Lanczos-Algorithmus zur Diagonalisierung der Säkularmatrizen sowie die Transfer-Matrix-Methode zur Bestimmung der Lokalisierungslänge von sehr langen quasieindimensionalen Systemen, deren Ergebnisse dann durch “finite-size-scaling“ auf dreidimensionale Systeme extrapoliert werden können [s05b]. Eine neuartige Variante dieser Transfer-Matrix-Methode, bei der die Konvergenz durch vielfaches Betrachten desselben vergleichsweise kurzen ungeordneten quasieindimensionalen Systems erreicht wird, haben wir entwickelt, um langreichweitig korrelierte Unordnungspotentiale im Anderson-Modell verwenden zu können [NRS04, NRS05, nrs04a, nrs04b, nrs05, snr04]. Als Alternative zur Transfer-Matrix-Methode wurde auch die rekursive Greensfunktionsmethode implementiert, um die Transporteigenschaften und die Zustandsdichte zu analysieren. [CR06, CRS06, crms05].

### 2.4.1 Teilaufgabe “Schichtsysteme”

Schichtstrukturen unterschiedlicher Dicke wurden mit Hilfe der Transfer-Matrix-Methode untersucht [CBS06, bcs05, cbs05]. Im Gegensatz zu bisher veröffentlichten Arbeiten, in denen bereits für relativ dünne Schichten ein Metall-Isolator-Übergang gefunden wurde, zeigen unsere sehr genauen numerischen Daten keinen derartigen Phasenübergang. Vielmehr lassen sich alle Daten für die Lokalisierungslänge unterschiedlicher Schichtdicken auf eine gemeinsame Skalenkurve abbilden. In der Bandmitte wächst die Lokalisierungslänge exponentiell mit der Schichtdicke, aber metallisches Verhalten kann nicht beobachtet werden.

Die Leitfähigkeit in zweidimensionalen Heterostrukturen wurde auch mit einer quantenkinetischen Gleichung beschrieben, wodurch der Metall-Isolator-Übergang reproduziert werden konnte [mos06].

### 2.4.2 Teilaufgabe “Binäre Unordnung”

Für das Bernoulli-Anderson-Modell in dreidimensionalen Systemen wurde die Zustandsdichte berechnet [KRSS06, kcs05, kcs06]. Dabei wurden charakteristische Strukturen in der Mitte der beiden Subbänder gefunden, die sich nicht durch die geringen Systemgrößen bei der Diagonalisierung erklären lassen. Eine genauere Analyse dieser Feinstrukturen auch mit analytischen Methoden steht noch aus [KRSS06].

### 2.4.3 Teilaufgabe “Langreichweitige Unordnung”

Die erwähnte neuartige Variante der Transfer-Matrix-Methode, bei der ein vergleichsweise kurzes System zu Grunde gelegt wird, wurde benutzt, um das Anderson-Modell mit langreichweitig korrelierter Unordnung zu untersuchen. 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 [NRS04, NRS05, nrs04a, nrs05, snr04]. Dies bedeutet, dass ein kritischer Wert der Potenz existiert, unterhalb dessen die Korrelationen relevant werden. Allerdings haben Berechnungen mit der üblichen Transfer-Matrix-Methode, bei der die Rekursion in einem langen quasieindimensionalen System bis zur Konvergenz durchgeführt wird, Zweifel an diesen Daten aufkommen lassen, weil auch für kleinere Werte dieser Potenz der kritische Exponent dem des Modells mit unkorrelierter Unordnung zu entsprechen scheint [ccs05].

### 2.4.4 Teilaufgabe “Topologische Unordnung”

Die Energiespektren und Eigenzustände von quasiperiodischen Systemen wurden mit Hilfe der Multifraktalanalyse und der Energieniveaustatistik beschrieben, wodurch sich die universellen Eigenschaften der Spektren nachweisen ließen [GS05, s04a, s04b, s04c, s04d, s04e, s04f]. In dreidimensionalen Systemen deuten erste Rechnungen zur Propagation von Wellenpaketen [CGS05, csg04, scg04] auf eine Mobilitätskante hin. Durch Untersuchung der Rückkehrwahrscheinlichkeit und der Wellenpaketsbreite konnte nicht nur der Übergang von ballistischem Transport an den Bandkanten zu superdiffusivem Verhalten in der Bandmitte beobachtet werden, sondern auch interessante hierarchische Strukturen bei der Ausbreitung der Wellenpakete auf eindimensionalen Ketten. Durch Hinzufügen einer einzelnen Störstelle ist es möglich, eine Lokalisierung des Wellenpakets auf einzelnen Unterketten hervorzurufen [CSG06, csg05].

### 2.4.5 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 [CR06, crms05]. Alle kinetischen Koeffizienten der linearen Antwort-Theorie lassen sich durch eine rekursive Formulierung der Methode berechnen.

Durch Berechnung des Leitwerts mit Hilfe der Greensfunktionsmethode wurde dann der Phasenübergang auch für Energien außerhalb der Bandmitte analysiert und der kritische Wert der Energie bzw. der Unordnung bestimmt [CRS06].

### 2.4.6 Teilaufgabe “Quanten-Hall-Effekt”

Der Phasenübergang beim ganzzahligen quantisierten Hall-Effekt wurde für ein langreichweitig korreliertes Unordnungspotential beschrieben. Zur Charakterisierung des Übergangs wurde auch die Energieniveaustatistik benutzt. Dabei wurde wieder ein Renormierungsgruppenansatz verwendet [C04, CR04, CR05]. In diesem Zusammenhang wurden auch analytische Untersuchungen zu einem Matrix-Modell für den quantisierten Hall-Effekt durchgeführt [GJSS04, JRS06, JS04].

### 2.4.7 Teilaufgabe “Statistik der Wellenfunktionen von seltenen Zuständen”

Wir haben die Verteilung von Wellenfunktionsamplituden im Anderson-Modell untersucht [MS06]. Dabei wurden auch Korrekturen zu den aus der Zufallsmatrizentheorie gewonnenen Resultaten berücksichtigt. Insbesondere wurde der Gültigkeitsbereich von störungstheoretischen Korrekturen analysiert.

Die räumliche Struktur der anormalen lokalisierten Zustände großer dreidimensionaler Systeme wurde ebenfalls numerisch bestimmt, dabei zeigen sich bei den Korrelationskoeffizienten charakteristische Fluktuationen, durch die die anormalen Zustände identifiziert werden können [SC05, cs05, s05a].

## Literaturverzeichnis

- [C04] P. Cain. Real-space renormalization group approach to the integer quantum Hall effect. *PhD thesis*, Chemnitz University of Technology, 2004.
- [CBS06] V. Cerovski, R. K. Brojen Singh, and M. Schreiber. Localization of non-interacting electrons in thin layered disordered systems. *Phys. Rev. B.*, 2006 (submitted for publication).
- [CGS05] V. Cerovski, M. Schreiber, and U. Grimm. Spectral and diffusive properties of silver-mean quasicrystals in 1,2, and 3 dimensions. *Phys. Rev. B*, 72:054203/1–9, 2005.
- [CR04] P. Cain and R.A. Römer. Fluctuating Hall resistance defeats the quantized Hall insulator. *Europhys. Lett.*, 66:104–110, 2004.
- [CR05] P. Cain and R.A. Römer. Real-space renormalization-group approach to the integer quantum Hall effect. *Int. J. Mod. Phys. B*, 19:2085–2119, 2005.
- [CR06] A. Croy and R.A. Römer. Scaling at the energy-driven metal-insulator transition and the thermoelectric power. *phys. stat. sol. (c)*, 2006. (accepted for publication).
- [CRS06] A. Croy, R.A. Römer, and M. Schreiber. Localization of electronic states in amorphous materials: recursive Green function method and the metal-insulator transition at  $E \neq 0$ , in *Parallel Algorithms and Cluster Computing - Implementations, Algorithms, and Applications* - eds. K.H. Hoffmann, and A. Meyer. *Springer Lecture Notes in Computational Science and Engineering (Springer, Berlin)* 2006 (submitted for publication).

- [CSG06] V. Cerovski, M. Schreiber, and U. Grimm. Multiscaling, ergodicity and localization in quasiperiodic chains. *Phys. Rev. B.*, 2006 (submitted for publication).
- [GJSS04] S.J. Gates Jr., A. Jellal, E.-H. Saidi, and M. Schreiber. Supersymmetric embedding of the quantum Hall matrix model. *J. High Energy Phys. JHEP* 11:075/1–29, 2004.
- [GS05] U. Grimm and M. Schreiber. Electronic structure of quasicrystals, in *Encyclopedia of Condensed Matter Physics* eds. F. Bassani, J. Liedl and P. Wyder (*Elsevier, Amsterdam*) pp. 95-100, 2005.
- [JRS06] A. Jellal, R.A. Römer, and M. Schreiber. Anisotropic quantum Hall matrix model. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 2006 (submitted for publication).
- [JS04] A. Jellal and M. Schreiber. A matrix model of bilayered quantum Hall systems. *J. Phys. A: Math. Gen.* 37:3147–3157, 2004.
- [KRSS06] P. Karmann, R. Römer, M. Schreiber, and P. Stollmann. Fine structure of the integrated density of states for Bernoulli-Anderson models, in *Parallel Algorithms and Cluster Computing - Implementations, Algorithms, and Applications* - eds. K.H. Hoffmann, and A. Meyer. *Springer Lecture Notes in Computational Science and Engineering (Springer, Berlin)* 2006 (submitted for publication).
- [MS06] B. Mehlig and M. Schreiber. Energy-level and wave-function statistics in the Anderson model of localization, in *Parallel Algorithms and Cluster Computing - Implementations, Algorithms, and Applications* - eds. K.H. Hoffmann, and A. Meyer. *Springer Lecture Notes in Computational Science and Engineering (Springer, Berlin)* 2006 (submitted for publication)
- [NRS04] M.L. Ndwana, R. Römer, and M. Schreiber. The Anderson metal-insulator transition in the presence of scale-free disorder. *Europhys. Lett.* 68:678–684, 2004.
- [NRS05] M. Ndwana, R.A. Römer, and M. Schreiber. Effects of scale-free disorder on the metal-insulator transition, in *Physics of Semiconductors* eds. J. Menendez and C. van de Walle *AIP Conf. Proc.* 772:1259–1260, 2005.
- [SC05] M. Schreiber and P. Cain. Anomalously localized electronic states in three-dimensional disordered system. *Proc. 11th IASBS meeting condensed matter physics*, Zanzan, Iran, 2005.

### Konferenzbeiträge:

- [bcs05] R.K. Brojen Singh, V. Cerovski, and M. Schreiber. Delocalization of electrons in disordered films induced by parallel magnetic field and film thickness. Spring Meeting German Physical Society, Berlin 03/05.
- [cbs05] V. Cerovski, R.K. Brojen Singh, and M. Schreiber. Localization of non-interacting electrons in thin layered disordered systems. Spring Meeting German Physical Society, Berlin 03/05.
- [ccs05] A. Croy, V.Z. Cerovski, and M. Schreiber. The role of power-law correlated disorder in the Anderson metal-insulator transition. Spring Meeting German Physical Society, Berlin 03/05.

- [crms05] A. Croy, R.A. Römer, A. MacKinnon, and M. Schreiber. Thermoelectric properties of disordered systems. Spring Meeting German Physical Society, Berlin 03/05.
- [cs05] P. Cain and M. Schreiber. Anomalous localized states in the 3D Anderson model of localization. Spring Meeting German Physical Society, Berlin 03/05.
- [csg04] V. Cerovski, M. Schreiber, and U. Grimm. Spectral and diffusive properties of silver-mean quasicrystals in 1,2 and 3 dimensions. Europhysics Conference on Computational Physics (CCP 2004), Genua, Italien 09/04.
- [csg05] V. Cerovski, M. Schreiber, and U. Grimm. Multiscaling, ergodicity and localization in quasiperiodic chains. Spring Meeting German Physical Society, Berlin 03/05.
- [kcs05] P. Karmann, V. Cerovski, and M. Schreiber. Density of states of the three dimensional Bernoulli-Anderson model. Spring Meeting German Physical Society, Berlin 03/05.
- [kcs06] P. Karmann, V. Cerovski, and M. Schreiber. Properties of the density of states of the three dimensional Bernoulli-Anderson model. Spring Meeting German Physical Society, Dresden 03/06.
- [mos06] K. Morawetz, C. Olbrich, and M. Schreiber. Metal-insulator transition in heterojunctions. Spring Meeting German Physical Society, Dresden 03/06
- [nrs04a] M. Ndawana, R.A. Römer, and M. Schreiber. The extended Harris criterion and scale-free disorder in the 3D Anderson model of localization. Int. Conf. Statistical Physics STATPHYS22, Bangalore, Indien 07/04.
- [nrs04b] M. Ndawana, R.A. Römer, and M. Schreiber. The extended Harris criterion and scale-free disorder in the 3D Anderson model of localization. 27th Int. Conf. Physics of Semiconductors ICPS-27, Flagstaff Arizona, USA 07/04.
- [nrs05] M.L. Ndawana, R.A. Römer, and M. Schreiber. Scale-free disorder and its effects on the localization-delocalization transition in 3D. Transport in Interacting and Disordered Systems (TIDS11), Egmond aan Zee 08/05.
- [s04a] M. Schreiber. Quasikristalle - oder: Warum man fünfeckige Fliesen so schlecht verlegen kann. Schüler-Sommerschule für Physik, Chemnitz 07/04.
- [s04b] M. Schreiber. Quasikristalle. WE-Heraeus Ferienschule für Physik "Neue Materialien für morgen und übermorgen in Experimenten und Simulationen" Chemnitz 10/04.
- [s04c] M. Schreiber. Quasicrystals - introduction and mathematical models. Ruhuna Int. School on Computational and Mathematical Physics (RISCMAP), Matara, Sri Lanka 12/04.
- [s04d] M. Schreiber. Quasicrystals - electronic properties. Ruhuna Int. School on Computational and Mathematical Physics (RISCMAP), Matara, Sri Lanka 12/04.
- [s04e] M. Schreiber. Quasicrystals - computer laboratory course. Ruhuna Int. School on Computational and Mathematical Physics (RISCMAP), Matara, Sri Lanka 12/04.
- [s04f] M. Schreiber. Quasicrystals - experiments and application. Ruhuna Int. School on Computational and Mathematical Physics (RISCMAP), Matara, Sri Lanka 12/04.

- [s05a] M. Schreiber. Anomalously localized electronic states in three-dimensional disordered systems. 11th annual IASBS meeting on condensed matter physics, Zanjan, Iran 05/05.
- [s05b] M. Schreiber. Electronic states in disordered systems. Summer School NANOMA 2005, Physics and Chemistry of Nanomaterials, Cluj-Napoca, Rumänien 08/05.
- [scg04] M. Schreiber, V. Cerovski, and U. Grimm. Electronic states and anomalous diffusion in quasiperiodic systems. Workshop Cooperative Phenomena in Optics and Transport in Nanostructures, Dresden 06/04.
- [snr04] M. Schreiber, M.L. Ndawana, and R.A. Römer. Effects of scale-free disorder on the Anderson metal-insulator transition. Europhysics Conference on Computational Physics (CCP 2004), Genua, Italien 09/04.

## 2.5 Offene Fragen / Ausblick

Bei den Schichtsystemen wurden bisher nur Systeme mit einem Magnetfeld senkrecht zu den Schichten betrachtet. Es wäre interessant, auch Systeme mit einem Magnetfeld parallel zu den Schichten zu untersuchen.

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, stellen eine andere interessante Variante des Anderson-Modells dar. 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.

Eine genauere Analyse der Umstände, die zum Auftreten der anormalen lokalisierten Zustände erforderlich sind, sollte zu einer besseren quantitativen Beschreibung führen, so dass ein Vergleich mit verschiedenen analytischen Resultaten möglich wird. Dazu wären allerdings aufwändige Berechnungen erforderlich, da die anormalen Zustände sehr selten auftreten.

Die Feinstruktur der Zustandsdichte im Bernoulli-Anderson-Modells erfordert ebenfalls noch genauere Berechnungen, außerdem wäre es interessant, zu untersuchen, wie die räumliche Struktur der Wellenfunktionen aussieht, die zu diesen Feinstrukturen beitragen.





# 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  
Dipl.-Phys. F. Heilmann, Computerphysik  
Dipl.-Phys. A. Nemnes, Computerphysik  
Dr. S. Schubert, 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<sup>+</sup>88, SGN<sup>+</sup>87, HLO<sup>+</sup>92, VHO<sup>+</sup>97, JVH<sup>+</sup>98, MJN<sup>+</sup>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<sup>+</sup>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 Grundlage für die Beschreibung des dynamischen Verhaltens solcher Systeme. Dabei wird der Zustandsraum häufig als Oberfläche einer gebirgsartigen Landschaft mit vielen verschiedenen hohen Bergen, Tälern und Pässen visualisiert [Hof02, HS02]. Die Analyse dieser Zustandsraumstruktur für ausgewählte, physikalisch relevante Modellsysteme wie z.B. Ising-Spins war erneut ein primäres Ziel unserer Untersuchungen, da an dieser Stelle eine der Ursachen für eine Reihe interessanter thermodynamischer Nichtgleichgewichtsphänomene zu finden ist.

Die teilweise bereits in den vergangenen Bewilligungsperioden begonnenen Arbeiten zur Untersuchung der Zustandsraumstruktur wurden fortgesetzt, aber im Jahr 2005 konnten nicht alle der für den Zeitraum 2005–2007 gesteckten Ziele erreicht werden.

Ein Ziel unserer Untersuchungen war die Charakterisierung durch Enumeration im niedrigerenergetischen Bereich sowie in der Umgebung lokaler Minima und die Gewinnung von Zustandsdichten auch für höhere Energien. Weiterhin sollte die Enumeration durch Einsatz eines parallel implementierten Branch-and-Cut-Algorithmus verbessert werden.

Nachdem wir durch die Implementation einer automatischen Vergrößerung des Zustandsraums eine Reihe interessanter Erkenntnisse über Barrierenstrukturen gewonnen hat-

ten, wurden darauf aufbauend die Modelle komplexer Zustandsräume verbessert, und es konnte ein tieferes Verständnis des Wechselspiels zwischen Struktur des Zustandsraums, der Konnektivität seiner Zustände sowie kinetische Eigenschaften gewonnen werden. Hierzu wurde zunächst anhand eines einfachen Modellsystems die Dynamik untersucht, wobei besonders der Einfluss verschiedener Zustandsdichten getestet wurde.

Weiterhin sollte die Vergöberung enumerierter Zustandsräume in Hinblick auf die Alterungsphänomene fortentwickelt werden. Hierbei war es besonders interessant, ob das bisher im Versuchsstadium befindliche Zulassen innerer Barrieren ausreicht, um wesentlich größere Zustandsraumbereiche zusammenfassbar zu machen. Danach sollten die schon bewährten Methoden zum Einsatz kommen, die aber eine parallele Erweiterung benötigen: speziell die in unserem NB-Clustering-Algorithmus auftretenden großen Cluster benötigen eine innere Struktur, um eine stärkere Vergröberung zuzulassen.

Für die Systeme, für die eine Enumeration aufgrund der Größe nicht in Frage kommt, wollten wir den Zugriff auf die Zustandsdichte verbessern. Zur Berechnung der globalen Zustandsdichte solcher Systeme ist eine neue Parallelisierungsstrategie erforderlich, die es erlaubt, die entstehenden sehr großen Übergangsmatrizen auf mehrere Knoten eines Compute-Clusters zu verteilen. Außerdem war das Problem des Über- oder Unterlaufs in Standard-Fließkommazahlen lösen.

### 2.3.2 Teilaufgabe Relaxationsverhalten auf Fraktalen

Die Dynamik eines Systems wird nicht nur durch energetische Barrieren, sondern auch von der Zusammenhangsstruktur des Zustandsraums selbst wesentlich beeinflusst. Fraktale Strukturen dienen einerseits als Zustandsraummodell eines komplexen Systems, andererseits als Realraummodell z. B. poröser Materialien. Die besondere Art von Konnektivität zwischen den Zuständen verlangsamt im Allgemeinen die Bewegung von Zufallswanderern bzw. die Diffusion von Teilchen. Auf diesem Gebiet ist es notwendig, Langzeitstudien durchführen zu können. Dazu muss die Beschränkung durch Speicherausbau und CPU-Leistung umgangen werden. Hierzu bietet sich die Benutzung von Compute-Clustern an.

Eine Beschränkung auf Sierpinski-Teppiche ist für die Simulation der Diffusion sinnvoll, weil ein von uns entwickelter effizienter Algorithmus existiert [SFSH01] aber auch komplementäre Methoden zur Bestimmung der Random-Walk-Dimension solcher Strukturen zur Verfügung stehen. Jedoch werden für die Lösung anderer Probleme, wie die Bestimmung von wichtigen fraktalen Dimensionen, auch andere Zufallsstrukturen zu Rate gezogen. Insbesondere gilt dies für das Beispiel der Percolationscluster.

Besonders wichtige Fragestellungen waren: Wie wirkt sich die Mischung von unterschiedlichen Fraktalgeneratoren gleicher Random-Walk-Dimension auf die Dimension des erzeugten Zufallsfraktals aus? Was geschieht, wenn nunmehr Generatoren verschiedener Dimension verwendet werden? Welche gemeinsame Eigenschaften haben die Zufallsfraktale im allgemeinen? Wie können besonders große Sierpinsky-Teppiche und Percolationscluster mit Hilfe von parallelen Algorithmen analysiert werden, wenn sie sich der Untersuchung mit üblichen Algorithmen wegen einer um Größenordnungen zu aufwändigen skalaren Berechnung entziehen?

### 2.3.3 Teilaufgabe Modellierung von Aging-Experimenten in Spingläsern

Zur Beschreibung von Aging-Phänomenen in Spingläsern wurden in der Vergangenheit hierarchisch organisierte Modelle mit großem Erfolg verwendet. Es gelang mit ihrer Hilfe einige der experimentellen Befunde zu reproduzieren. Begonnen wurde dabei mit sehr stark vereinfachten Baummodellen, die, versehen mit einer Mastergleichungsdynamik, zum Teil sogar eine analytische Lösung zuließen. Zusammen mit einer Modellierung der magnetischen Überlappfunktion, die alle für den Einsatz der Resonsetheorie notwendigen Informationen über die magnetischen Eigenschaften des Systems enthält, konnten so die einfachen Agingexperimente mit ihrer charakteristischen Verschiebung des Maximums in der Relaxationsrate wiedergefunden werden.

Zwischenzeitlich konnte auch ein direkter Zusammenhang zwischen den verwendeten Baummodellen und der wirklichen Zustandsraumstruktur gefunden werden, in dem der niederenergetische Teil des Zustandsraumes eines  $\pm I$ -Ising-Spinglases durch Enumeration untersucht und barrierefrei vergrößert wurde; die erhaltene Struktur weist große Ähnlichkeit mit den einfachen hierarchischen Baummodellen auf, ist aber weniger regelmäßig und weniger symmetrisch.

Ziel unserer Untersuchungen war, aufbauend auf dem bisher Erreichten, eine geschlossene Beschreibung der Dynamik unter dem Einfluss von Temperaturrampen zu finden. Dies ist eine Vorarbeit zur Modellierung der sogenannten „temperature-cycling“-Experimente, bei denen die Temperatur in der Wartezeit verändert wird, und der ac-Suszeptibilitätsexperimente. Für diese Experimente ist es bisher noch unklar, ob sie im Rahmen der hierarchischen Baummodelle beschrieben werden können. Gleichzeitig mit den Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Dynamik wurde begonnen, die oben genannten Experimente mit einem alternativen Ansatz, der Zerlegung der Temperaturrampen in diskrete Schritte, zu modellieren.

### Literaturverzeichnis zu 2.3

- [GSN<sup>+</sup>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.
- [HLO<sup>+</sup>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<sup>+</sup>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):097201/4–097201/4, 2002.
- [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<sup>+</sup>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.
- [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.
- [SGN<sup>+</sup>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.
- [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<sup>+</sup>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

Bei der Vergrößerung von Zustandsräumen sind sowohl Effizienz (starke Reduktion der Freiheitsgrade) als auch Wirkungsgleichheit (im dynamischen Verhalten) einerseits grundlegende aber andererseits einander widersprechende Forderungen. Um an dieser Stelle einen optimalen Kompromiss finden zu können ist es wichtig, alle Größen genau zu kennen, die das dynamische Verhalten des Systems beeinflussen. Aufgrund der bisher durchgeführten Untersuchungen konnten wir mit die Barrierenstruktur von Spingläsern charakterisieren und Aussagen zur Verteilung lokaler Minima treffen.

Die thermische Relaxation komplexer Systeme wird im wesentlichen durch drei Einflüsse bestimmt [Hof02]. Erstens sind energetische Barrieren im Zustandsraum zu nennen, die

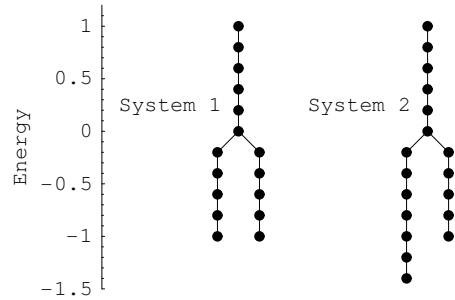


Abbildung 2.1: Zur Analyse des *Preferential Trapping* benutzen wir ein Modellsystem, welches aus zwei Tälern besteht, die in ein Haupttal eingebettet sind. Die Eigenschaften hinsichtlich Energie, Zustandsdichte und Konnektivität werden hierbei durch die Tiefe der Täler, die Entartung der Knoten und die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen benachbarten Knoten repräsentiert.

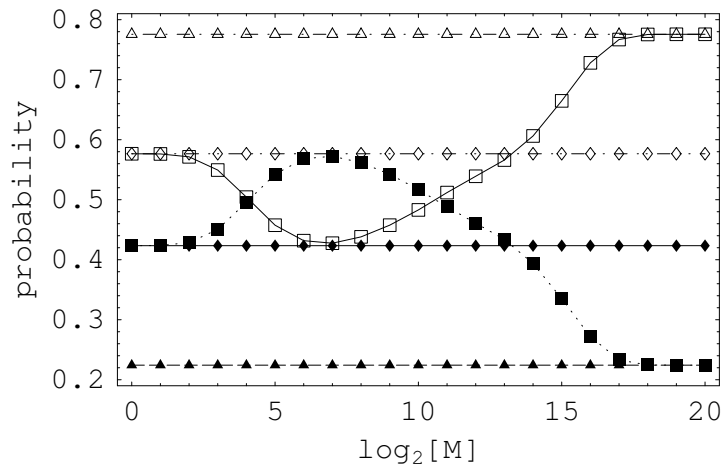


Abbildung 2.2: Die Wahrscheinlichkeit, einen Zufallswanderer in Tal 1 (offene Symbole) oder Tal 2 (ausgefüllte Symbole) zu finden, als Funktion der Anzahl der Annealing-Schritte  $M$ . Dabei repräsentieren normale Kästchen die Wahrscheinlichkeiten, die aus der Iteration der Mastergleichung entlang einer linearen Temperaturrampe mit anschließendem Schockkühlen gewonnen wurden, während auf die Spitze gestellte Kästchen die Startverteilung und Dreiecke die Gleichgewichtsverteilung, jeweils anschließend schockgekühlt, darstellen. Man erkennt, dass bei hohen Annealing-Geschwindigkeiten die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Tal 1 wegen seines größeren Randes höher ist. Ebenso kann bei niedrigen Annealing-Geschwindigkeiten Tal 1 wiederum aufgrund seiner größeren Tiefe mehr Wahrscheinlichkeit in sich vereinen. Demgegenüber gibt es eine mittlere Geschwindigkeit bei der der sogenannte *Trapping-Effekt* eintritt, d.h. dass die Wahrscheinlichkeit in Tal 2 geleitet wird und dieses nicht mehr verlassen kann.



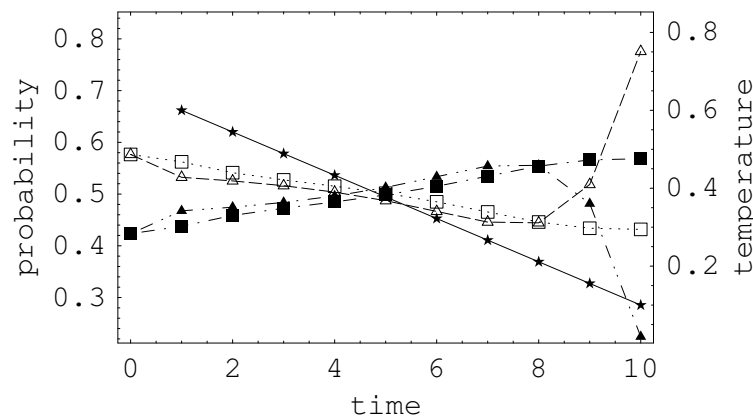


Abbildung 2.3: Der Zeitverlauf der Wahrscheinlichkeiten in Tal 1 (offene Symbole) bzw. Tal 2 (ausgefüllte Symbole) unter dem Einfluss einer linearen Temperaturrampe (Symbol: Stern). Dabei repräsentieren Kästchen die (schockgekühlte) Wahrscheinlichkeit des Annealing-Prozesses, während die Dreiecke den Gleichgewichtszustand bei der jeweiligen Temperatur darstellen. Auch hier erkennt man deutlich, dass bei hohen Temperaturen Tal 1 die höchste Aufenthaltswahrscheinlichkeit in sich vereint. Dies ändert sich ungefähr dann, wenn die Trapping-Temperatur von Tal 2 unterschritten wird. Im Prinzip würde sich die Situation wiederum ändern, wenn die Temperatur so weit gesunken ist, dass sich die größere Tiefe von Tal 1 bemerkbar macht, wie die Gleichgewichtskurven zeigen, aber an dem Punkt ist die Beweglichkeit bereits so gering, dass sich die Wahrscheinlichkeit die Barriere nicht mehr überwinden kann.

lokale Minima bzw. Täler voneinander trennen, und die bei der Relaxation zu überwinden sind. Zweitens spielt die Zustandsdichte eine wesentliche Rolle, und drittens sind die Konnektivitäten im Zustandsraum selbst zu beachten, da diese die Möglichkeiten der Entwicklung des komplexen Systems in das thermische Gleichgewicht definieren.

Infolgedessen wurden diese drei Faktoren anhand eines Referenzsystems (siehe Abb. 2.1) zunächst isoliert, später mehr und mehr in ihrem Wechselspiel untersucht [HS05, Fised]. Dabei stellte sich heraus, dass die Wahrscheinlichkeit, das System in einer bestimmten Region des Zustandsraumes vorzufinden, durch äußere Parameter massiv beeinflusst werden kann. Dieser Vorgang wird als *Preferential Trapping* bezeichnet. Dies hat weitreichende Konsequenzen für das Verständnis der dynamischen Prozesse in komplexen Zustandsräumen, da es einen Erklärungsansatz liefern kann, wieso stochastische Optimierungsverfahren auch in Situationen erfolgreich angewandt werden können, in denen frühere Hypothesen wie *deep valleys have large rims* nicht zutreffen und auch wieso bei Prozessen wie der Proteinfaltung ein bestimmtes und mit einer speziellen Funktionalität verbundenes energetisches Minimum innerhalb kürzester Zeit gefunden werden kann.

In den Abbildungen 2.2 und 2.3 ist ein Beispiel eines solchen *Trapping-Effekts* im Rahmen unseres Modellsystems dargestellt. Dabei stellen wir in einem Aufbau entsprechend System 2 aus Abbildung 2.1 zwei Täler mit exponentiellem Anstieg der Ent-

artung der Knoten aber unterschiedlichen *Trapping-Temperaturen* von  $T^{(1)} \approx 0,259$  und  $T^{(2)} \approx 0,563$ . Zusätzlich ist das Haupttal ebenfalls mit exponentiellem Anstieg der Entartung und  $T^{(\text{HT})} \approx 0,597$  belegt. Das führt insgesamt zu einer Situation, in der Tal 2 einen geringfügig schmalen Rand als Tal 1 hat, aber bereits eine Ebene unterhalb breiter als Tal 1 ist. Demgegenüber ist Tal 1 um 2 Ebenen tiefer, was die Gleichgewichtsverteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten bei tiefen Temperaturen wesentlich beeinflusst.

Innerhalb dieses Aufbaus senken wir die Temperatur linear von  $T_A = 0,6$  bis  $T_E = 0,05$  in 10 Schritten mit jeweils einer (variablen) Anzahl von Annealing-Schritten  $M \in [1 \dots 2^{20}]$  zwischen den Temperaturschritten. Wie man in Abbildung 2.2 gut erkennen kann, befindet sich nach schnellen Annealing-Prozessen (wegen seines breiteren Randes) und langsamen Annealing-Prozessen (wegen seiner größeren Tiefe) der Hauptteil der Wahrscheinlichkeit in Tal 1. Bei Annealing-Prozessen von mittlerer Geschwindigkeit kann jedoch ein Großteil der Wahrscheinlichkeit in Tal 2 fließen und es dann nicht mehr verlassen. Dieser Vorgang wird durch den Zeitverlauf des Prozesses (Abbildung 2.3) noch verdeutlicht.

Dieses Ergebnis widerspricht einerseits der oft verwendeten Annahme, dass bei einem Annealing-Prozess das globale Minimum bei der geringsten Geschwindigkeit mit der größten Wahrscheinlichkeit und beim Schockkühlen mit der geringsten Wahrscheinlichkeit gefunden wird.

Andererseits macht es deutlich, dass der Verlauf dynamischer Prozesse nicht nur von der energetischen Lage der lokalen Minima und der Barrieren abhängt, sondern auch von den lokalen Zustandsdichten und Konnektivitäten wesentlich beeinflusst wird. Deshalb ist bei der Vergrößerung von Zustandsräumen besonders darauf zu achten, dass diese lokalen Zustandsdichten und Konnektivitäten nicht verfälscht werden.

Bei den Untersuchungen der vergrößerten Zustandsraumstruktur unter dem Einfluss innerer Barrieren sowie der Zustandsdichte großer Systeme konnten noch keine Fortschritte erzielt werden.

## 2.4.2 Teilaufgabe Relaxationsverhalten auf Fraktalen

Die Arbeiten auf dem Gebiet der Struktur von Fraktalen und den damit in Verbindung stehenden dynamischen Prozessen im Zustandsraum wurden bis Ende 2005 weitergeführt. Die folgenden im Bericht 2002 bis 2004 ausführlich erläuterten Ergebnisse

- Untersuchungen der Diffusion auf Fraktalen
- Bestimmung der Random-Walk-Dimension
- Random Walker auf dynamisch erzeugten Fraktalen
- Untersuchung der Diffusion mittels Mastergleichung
- Weiterentwicklung paralleler Algorithmen

wurden komplettiert.

Die im Finanzierungsantrag 2005–2007 in Unterkapitel 3.5.1.2 formulierten Ziele konnten bis Ende 2005 teilweise erreicht werden. Wie im folgenden dargestellt, betrifft dies die Unterpunkte „Zufallsfraktale“ sowie den Einsatz und die Verbesserung der Leistungsfähigkeit paralleler Algorithmen.

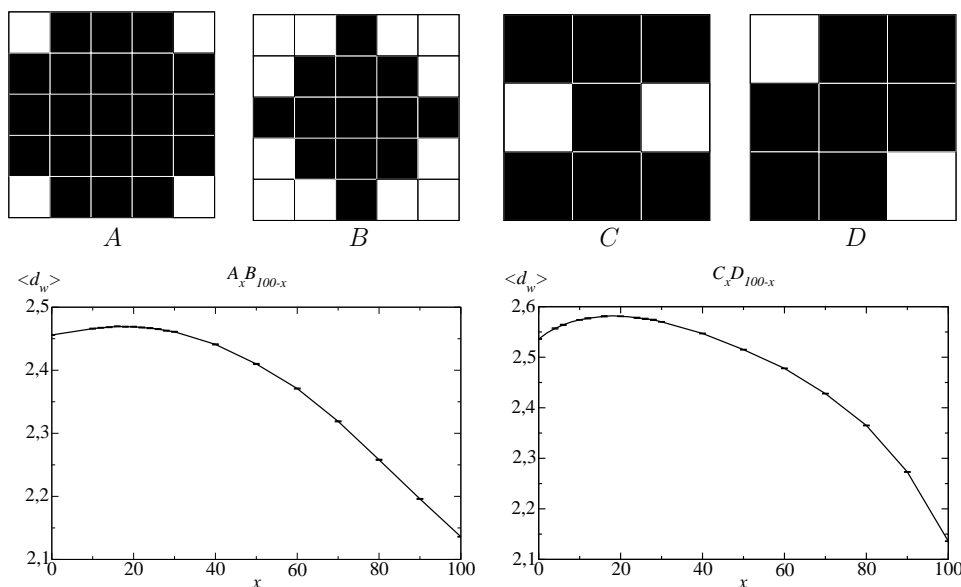


Abbildung 2.4: Oben: Generatoren für die Erzeugung zufälliger Sierpinsky-Carpets. Fraktale Dimensionen:  $d_w^A = 2.14$ ,  $d_w^B = 2.46$ ,  $d_w^C = 2.14$ ,  $d_w^D = 2.54$ . Unten:  $\langle d_w \rangle$  in Abhängigkeit vom prozentualen Anteil  $x$  für die Mischungen  $A_x B_{100-x}$  (links) und  $C_x D_{100-x}$  (rechts).

In einer der neu entstandenen Publikationen [AHST05] steht die Generierung von Sierpinsky-Carpets aus Mischungen von Generatoren gleicher und ungleicher fraktaler Dimension und die Diffusionsvorgänge auf den entstehenden Carpets im Vordergrund. Bedeutsam ist es, die mit der Diffusion verbundene fraktale Dimension  $d_w$  zu ermitteln, die mit dem mittleren Quadrat des Abstandes  $\langle r^2 \rangle$  eines Random Walkers vom Ausgangspunkt nach einer Zeit  $t$  durch die Gleichung

$$\langle r^2 \rangle \sim t^{2/d_w} \quad (2.1)$$

verknüpft ist.

Dazu wurden durch zufällig kombinierte Aufrufe verschiedener Generatoren die dadurch entstandenen zufälligen Sierpinsky-Carpets untersucht. In Abbildung 2.4 ist beispielhaft nur eines der wesentlichsten Resultate dieser Arbeit dargestellt. Jeweils zwei Generatoren für Sierpinsky-Carpets werden gemischt, das heißt, mit verschiedenen prozentualen Wahrscheinlichkeiten aufgerufen, um das Carpet zu erzeugen. Das erstaunliche Ergebnis ist, dass die fraktalen Dimensionen für Random Walker nicht monoton von diesen Wahrscheinlichkeiten abhängen, sondern einen Extremwert bei einem bestimmten Mischungs-

verhältnis annehmen. Wie in [AHST05] dargelegt, trifft dies sogar auf Mischungen von Generatoren gleicher Dimension zu.

Die gefundenen Extrema sind nicht notwendigerweise Maxima. Es wurden auch Kombinationen von Generatoren gefunden, die zu einem Minimum von  $d_w$  für ein bestimmtes Mischungsverhältnis führten. Dies entspricht interessanterweise einer unerwarteten *Erhöhung* der Diffusionsgeschwindigkeit trotz zusätzlich in die Struktur eingebrachter Unordnung.

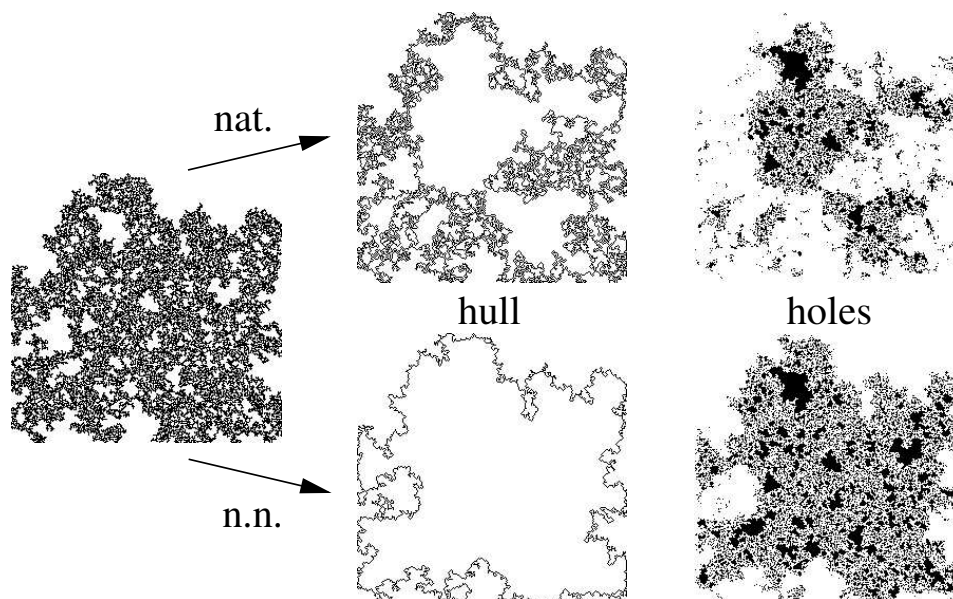


Abbildung 2.5: Beispiel für ein Percolations-Cluster (links): Außenrand und Hohlräume für natürliche Ränder (oben) und Ränder für Transport in Hohlräumen (unten).

Eine weitere interessante Fragestellung betrifft die fraktalen Dimensionen von Randlinien oder Grenzflächen. Diese Frage wurde für die Randlinien verschiedener zweidimensionaler Cluster untersucht. Auf dreidimensionale Gebilde übertragen, könnte die Beantwortung dieser Frage sogar zu unmittelbarer praktischer Bedeutung gelangen, zum Beispiel bei der Untersuchung von geologischen Formationen, die durch natürliche Wachstumsprozesse entstanden sind.

In den vergangenen Monaten gelang es uns, für drei verschiedene Arten von Fraktalen, das reguläre Sierpinsky-Carpet, das zufällig generierte Sierpinsky-Carpet und den zufälligen Percolations-Cluster, den Nachweis zu erbringen, dass die fraktalen Dimensionen des Außenrandes und die Dimensionen der Ränder aller Hohlräume übereinstimmen, wenn der Cluster durch einen einheitlichen Wachstums-Algorithmus entstanden ist [BSS<sup>+</sup>06]. Für den Fall des regulären Sierpinsky-Carpet gelang dieser Nachweis sogar exakt auf analytischem Weg.

Dieses Ergebnis konnte bei allen Strukturen für zwei verschiedene Definitionen für die Ränder erzielt werden, bei denen eine Randlinie durch nur punktweise aneinander stoßen-

de Teile des Clusters entweder unterbrochen wird (natürliche Randlinie) oder fortgesetzt wird (praktisch bedeutsam für Transportvorgänge in Hohlräumen). Der Unterschied zwischen beiden Definitionen ist in Abbildung 2.5 dargestellt (Die für Transportvorgänge in Hohlräumen geeignete Definition wird durch „n.n.“ für „next neighbour“ gekennzeichnet.).

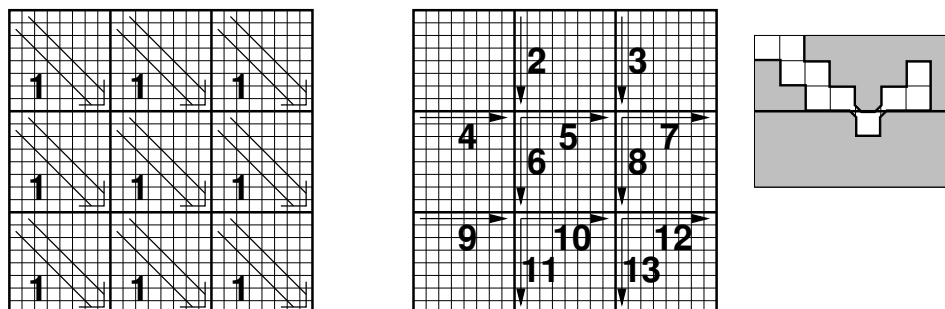


Abbildung 2.6: Parallelisierte Hoshen-Kopelman-Analyse, vereinfacht für eine  $3 \times 3$ -Aufteilung. links: Schritt 1, Analyse der kleinen Teilquadrate, parallel und unabhängig, rechts: Sequentielle Umnummerierung durch Analyse der Grenzlinien (Detail: Beispiel für die Verknüpfung zweier Hohlräume im oberen Quadrat durch einen kleinen Hohlraum im Quadrat darunter).

Für die Analyse der Topologie großer Cluster wird gewöhnlich der Hoshen-Kopelman-Algorithmus benutzt. Dieser erwies sich jedoch als ungenügend für die Untersuchung sehr großer Cluster. Deshalb wurde von uns in [BSS<sup>+</sup>06] ein paralleler Algorithmus entwickelt, dargestellt in Abbildung 2.6, bei dem zunächst kleine Teilmengen der Cluster gleichzeitig analysiert werden und danach durch sorgfältige Untersuchung der Grenzlinien die endgültige Analyse mit vollständiger Numerierung der Cluster-Bestandteile und Hohlräume vorgenommen wird.

	random SC (nat.)	random SC (n.n.)	percolation cluster (nat.)	percolation cluster (n.n.)
hull dim.	1.48	1.37	1.76	1.36
hole dim.	1.474	1.364	<b>1.744</b>	<b>1.346</b>

Tabelle 2.1: Ergebnisse für Außenrand- und Hohlraum-Dimensionen für natürliche Ränder (nat.) und Ränder für Transport in Hohlräumen (n.n.). (500 Cluster  $1024 \times 1024$ , fettgedruckt: 50 Cluster  $4096 \times 4096$ )

Eine Zusammenfassung der numerischen Ergebnisse ist in Tabelle 2.1 dargestellt. Die fraktalen Dimensionen von Außenrand und Hohlräumen stimmen im Rahmen der Standardabweichungen ( $\pm 0.02$  für die Außenrand-Daten,  $\pm 0.006$  für die Hohlraum-Daten) überein.

### 2.4.3 Teilaufgabe Modellierung von Aging-Experimenten in Spingläsern

Bereits in der Vergangenheit konnte das Verhalten verschiedener Alterungsphänomene bei Spingläsern anhand hierarchischer Baummodelle erfolgreich erklärt und nachvollzogen werden. Weiterhin konnte der Ansatz der hierarchischen Baummodelle als Grundlage zur Beschreibung des Zustandsraumes verifiziert werden, indem die Zustandsraumstruktur eines Ising-Spinglases durch Enumeration untersucht und barrierefrei vergrößert wurde. Aufbauend auf diesen Ergebnissen wurde mit der Modellierung der bisher noch nicht beschriebenen ac-Suszeptibilitätsexperimente in zwei Stufen begonnen.

Zum einen wurde zur Darstellung des Propagators einer Temperaturrampe die Temperaturabhängigkeit der Eigenwerte und Eigenvektoren der Übergangsmatrix untersucht. Diese Untersuchungen haben sich als sehr schwierig erwiesen, da die analytische Temperaturabhängigkeit bereits bei relativ kleinen Systemen eine nicht mehr beherrschbare Komplexität aufweist. Um an dieser Stelle weitere Fortschritte erzielen zu können, wurde mit der Suche nach geeigneten Näherungsverfahren zur Darstellung der Temperaturabhängigkeit der Eigenwerte und Eigenvektoren begonnen.

Zum anderen wurde der bisher erfolgreich zur Bestimmung von Magnetisierung und Relaxationsrate verwendete Ansatz der linearen Responsetheorie herangezogen um die ac-Suszeptibilitätsexperimente nachzubilden. Dabei wurden die Temperaturrampen nicht mit Hilfe eines Propagators (siehe oben) sondern als Abfolge diskreter Schritte modelliert. Die Ergebnisse dieser Modellierung zeigen bisher noch keine Übereinstimmung mit den experimentellen Befunden. Mögliche Ursachen hierfür könnten nach dem aktuellen Stand der laufenden Untersuchungen in der Verwendung diskreter Temperaturschritte oder in der speziellen, aber bei vorangegangenen Modellierungen von Alterungsphänomenen erfolgreichen Wahl der magnetischen Überlappfunktion unter Verwendung des ultrametrischen Abstandes der Knoten liegen.

Insgesamt konnten die Arbeiten im Bereich der Modellierung von Aging-Experimenten in Spingläsern im Jahr 2005 noch nicht abgeschlossen werden.

### Literaturverzeichnis

- [AHST05] D. H. N. Anh, K. H. Hoffmann, S. Seeger, and S. Tarafdar. Diffusion in disordered fractals. *Europhys. Lett.*, 70(1):109–115, 2005.
- [BHss] P. Blaudeck and K. H. Hoffmann. Optimizing simulated annealing schedules for amorphous carbons. In K. H. Hoffmann and A. Meyer, editors, *Parallel algorithms and cluster computing*, page 227. Springer Verlag, Berlin, in press.
- [BSS<sup>+</sup>06] P. Blaudeck, S. Seeger, C. Schulzky, K. H. Hoffmann, T. Dutta, and S. Tarafdar. The coastline and lake shores of a fractal island. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 39:1609–1618, 2006.
- [Fised] A. Fischer. PhD thesis, Chemnitz University of Technology, Chemnitz, to be published.

- [FSDH<sup>+</sup>ss] A. Franz, C. Schulzky, N. A. Do Hoang, S. Seeger, J. Balg, and K. H. Hoffmann. Random walks on fractals. In K. H. Hoffmann and A. Meyer, editors, *Parallel algorithms and cluster computing*, page 305. Springer Verlag, Berlin, in press.
- [HFSSss] K. H. Hoffmann, A. Fischer, S. Schubert, and T. Streibert. Modelling aging experiments in spin glasses. In K. H. Hoffmann and A. Meyer, editors, *Parallel algorithms and cluster computing*, page 283. Springer Verlag, Berlin, in press.
- [HH05] F. Heilmann and K. H. Hoffmann. Parq – high-precision calculation of the density of states. *Europhys. Lett.*, 70(2):155–161, 2005.
- [HHS04] K. H. Hoffmann, F. Heilmann, and P. Salamon. Fitness Threshold Accepting over extremal optimization ranks. *Phys. Rev. E*, 70(4):046704–1 – 046704–6, 2004.
- [HMss] K. H. Hoffmann and A. Meyer, editors. *Parallel algorithms and cluster computing - implementations, algorithms, and applications -*. Springer Verlag, Berlin, in press.
- [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, 2002.
- [HS05] K. H. Hoffmann and J. C. Schön. Kinetic features of preferential trapping on energy landscapes. *Foundations of Physics Letters*, 18(2):171–182, 2005.
- [SH06] S. Schubert and K. H. Hoffmann. The structure of enumerated spin glass state spaces. *Comp. Phys. Comm.*, 174:191–197, 2006.

## 2.5 Offene Fragen / Ausblick

Eine Fortsetzung der Arbeiten an den Aufgaben dieses Teilprojektes ist im Rahmen verschiedener Einzelprojekte vorgesehen.

- Kann eine Methode implementiert werden, die den Zustandsraum eines Spinglases gerade soweit vergrößert, dass die dynamischen Eigenschaften des Systems nicht wesentlich verändert werden? 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.
- Wie kann das unterexponentielle Wachstum der Zustandsdichte am besten charakterisiert werden?
- Auf Fraktalen kann auch eine Energiefunktion definiert sein. Dann existieren Vorzugsrichtungen für Zufallswanderer auf diesen. Wie ist dann das Wechselspiel zwischen Random-Walk-Dimension und Energiefunktion zu charakterisieren?
- 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?





# 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

PD 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

Dr. Sibylle Gemming (geb. Köstlmeier) ist seit Januar 2004 an der Technischen Universität Dresden beschäftigt. Sie hat im Dezember 2004 an der Technischen Universität Chemnitz habilitiert und hat dort seit April 2005 die Lehrbefugnis im Fach Physik.

### 2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. Walter Alsheimer (09/05–10/05)

Dr. Andrey Enyashin (07/05–12/05)

Dr. Agnieszka Jaron-Becker (09/05–12/05)

Carsten Olbrich (wiss. Hilfskraft)

## 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 *shared-memory*-Prozessoren verfügt die Arbeitsgruppe über eine geeignete Testplattform, und die gegenwärtigen Entwicklungen der Computertechnik hin zu Mehrprozessor-Rechnern bestätigen daher den gewählten Ansatz. Konkretes Ziel der Untersuchungen war es, den Zusammenhang zwischen den strukturellen Eigenschaften von reaktiven Metall-Halbleiter-Grenzflächen und dem elektronischen Transport im nanoskaligen Bereich zu beschreiben. Der Fokus der Studie ist auf Grenzflächen zwischen Titan und Silizium und die dort

entstehenden dünnen Filme aus binären Modifikationen gerichtet. Insbesondere in der Nanoelektronik spielt diese Materialkombination eine immer bedeutendere Rolle, weil Ti als Haftvermittler für mikro- und nanoskalige Goldkontakte auf Silizium-Oberflächen eingesetzt wird. Konkret sollte die Grenzfläche Ti(0001)|Si(111) als Modellsystem dienen, deren Struktur und Reaktivität in der dritten Förderperiode bereits quantitativ analysiert wurden. Zu diesem Materialsystem liegt somit eine umfangreiche Datenbasis vor, auf der nun der Zusammenhang von Struktur und Transporteigenschaften über die Grenzfläche untersucht werden sollte.

Im Berichtszeitraum wurden dazu folgende Ziele bearbeitet:

- Die Studien zu Ti(0001)|Si(111) wurden auf größere Strukturmodelle ausgedehnt, um den Einfluß weitergehender Relaxationen zu erfassen.
- Parallel dazu wurden die Wechselwirkungen an den neu entstandenen Grenzflächen zum binären Silizid hinsichtlich der Stabilität und der strukturellen und elektronischen Eigenschaften charakterisiert.
- In Ergänzung zur Untersuchung der dünnen Grenzflächenfilme wurden die strukturellen und elektronischen Eigenschaften eindimensional ausgedehnter Titansilizid-Nanostrukturen (Nanoröhren, Nanostäbchen) untersucht, um auch den Zusammenhang zwischen Dimensionalität und Leitfähigkeit quantitativ zu erfassen.

## 2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

Im Berichtszeitraum wurden die Grundlagen für die geplante Untersuchung des elektronischen Transports über Metall-Halbleiter-Grenzflächen und -Nanostrukturen erarbeitet. Die Teilaufgaben 2.3.1 bis 2.3.3 sind verbunden mit den materialwissenschaftlichen Fragestellungen, den Dichtefunktional-Bandstruktur-Rechnungen zu Strukturbildung, Wechselwirkung und den elektronischen Eigenschaften reaktiver Metall-Halbleiter-Grenzflächen. Teilaufgabe 2.3.4 erweitert diese Thematik auf eindimensional ausgedehnte binäre Nanostrukturen wie Röhren und Stäbchen.

### 2.3.1 Teilaufgabe “Untersuchung langreichweitiger Relaxationen an der Ti(0001)|Si(111)-Grenzfläche mit größeren Strukturmodellen”

Der Mitarbeiter der Ergänzungsaustattung sollte ausgehend von den in der dritten Förderperiode untersuchten Grenzflächen Si(111)|Ti(0001) zwischen den Elementkristallen größere Superzellen konstruieren und optimieren. 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 - abgesehen von den in der dritten Förderphase mit kleineren Strukturmodellen berechneten Ergebnissen - bislang wenige Daten zur Stabilität, zur lokalen geometrischen

Struktur, oder zu den elektronischen Wechselwirkungen an dieser Grenzfläche. Da mit kleineren Strukturmodellen auch in der Mitte der Siliziumschicht noch strukturelle Relaxationen auftraten, sollten zusätzliche Daten aus molekularstatischen Modellrechnungen größerer Superzellen vor der Amorphisierung gewonnen werden. Bisher wurden folgende Faktoren für die Reaktivität der Grenzfläche identifiziert: der Elektronegativitätsunterschied von Ti und Si, der eine Negativierung der Silizium-Ionen und damit eine Silizid-Bildung bevorzugt, sowie die Fehlpassung der Gitterkonstanten von Silizium und Titan, welche ungünstige elastische Wechselwirkungen an der Grenzfläche induziert. Es war zu prüfen, ob auch größere, realistische Strukturmodelle diese Trends bestätigen.

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

Der Beginn der Bildung von  $\text{TiSi}_2$  an der Ti(0001)|Si(111)-Grenzfläche wurde bereits in der letzten Förderphase mit Hilfe der Dichtefunktional-Molekulardynamik-Methode studiert. Dabei folgen die Kerne den klassischen Newton’schen Bewegungsgleichungen auf der Born-Oppenheimer-Oberfläche, die durch die quantenmechanische Wechselwirkung des Elektronensystems bestimmt ist. So konnte mit Hilfe geeigneter Strukturmodelle gezeigt werden, wie sich die relevanten Wechselwirkungsparameter, die Elektronegativität und die elastische Verspannung mit zunehmender Temperatur verändern und wie sich bei Ausbildung der neuen Modifikation die elastische Verspannung der Grenzfläche reduziert. Im Berichtszeitraum sollten längere Simulationszeiten bei einer Temperatur von 900 K durchgeführt werden, auf deren Basis gemittelte Strukturparameter wie Koordination und Bindungslänge an der Grenzfläche quantifiziert werden können.

### 2.3.3 Teilaufgabe “Stabilität und Struktur der reagierten Grenzfläche”

Durch die Ausbildung der Silizid-Modifikation entstehen an der Ti(0001)|Si(111)-Grenzfläche zwei neue Grenzflächen zwischen Silizid und Silizium bzw. zwischen Silizid und Titan. Die Stabilität dieser beiden Grenzflächen sollte mit Hilfe von Dichtefunktional-Untersuchungen berechnet werden. Ein Vergleich der Grenzflächenenergien mit derjenigen der unreaktierten Grenzfläche erlaubt es, den thermodynamischen Beitrag abzuschätzen, der zu einer Stabilisierung der reagierten Grenzfläche führt. Dazu sollte zunächst eine niederenergetische, stabile Kristallebene des  $\text{TiSi}_2$  gefunden und dann in Kontakt mit den beiden Grenzflächenebenen der Reinkristalle, also mit Ti(0001) und Si(111) gebracht werden. Dabei war zu beachten, dass die Gitterfehlanpassung nicht höher als die der Ausgangsverbindungen ist, da die Reaktion unter der Randbedingung erfolgt, dass die elastische Energie des Systems durch die Reaktion verringert wird.

### 2.3.4 Teilaufgabe “Stabilität, Struktur und elektronische Eigenschaften von nanostrukturiertem $\text{TiSi}_2$ ”

In Ergänzung zu den dünnen, zweidimensionalen Grenzflächenfilmen aus Titandisilizid, welche an ausgedehnten Titan-Silizium-Kontakten gebildet werden, sollte gezielt auch der Einfluss einer nanoskaligen Kontaktgeometrie auf die strukturellen, elektronischen und Transport-Eigenschaften untersucht werden. Neben nanotubularen Systemen, welche vor allem von weniger stark ionischen Materialien bevorzugt werden, sollten auch stäbchenförmige Strukturen untersucht werden, in denen die lokale Koordinationsgeometrie mehr der im ungestörten, unendlich ausgedehnten Volumenkristall entspricht. Um die Periodizität der Strukturen in Röhren- bzw. Stäbchen-Richtung zu nutzen, sollte auch diese Untersuchung mit dem Bandstruktur-Verfahren erfolgen, mit dem bereits die Grenzfläche optimiert wurde. Um eine Wechselwirkung der Nanoröhren oder Nanostäbchen mit ihren periodischen Replika auszuschließen, sollte die Superzellgröße so optimiert werden, dass sie hinreichend viel Vakuum enthält.

## 2.4 Ergebnisse

Im Berichtszeitraum erfolgte die Anwendung des parallelisierten Pseudopotential-Bandstruktur-Programms zur Berechnung der strukturellen und elektronischen Eigenschaften der Metall-Halbleiter-Grenzflächen, ergänzt um Dichtefunktional-basierte “tight-binding”-Studien zu noch größeren Strukturmodellen mit bis zu 1000 Atomen. Die Gitterfehlpassung, die durch die unterschiedlichen Gitterkonstanten von Titan bzw. Vanadium und Silizium an der  $\text{M}(0001)|\text{Si}(111)$ -Grenzfläche auftritt, konnte dadurch adäquat mit großen Superzellen mit vertretbarem numerischem Aufwand modelliert werden. Dazu wurde vor allem die in den numerischen Algorithmen des Programms vorliegende Parallelität über die Stützstellen bei der  $k$ -Raum-Integration sowie bei der Fouriertransformation zwischen Orts- und Impulsraum genutzt.

### 2.4.1 Teilaufgabe “Untersuchung langreichweitiger Relaxationen an der $\text{Ti}(0001)|\text{Si}(111)$ -Grenzfläche mit größeren Strukturmodellen”

Ausgehend von den in der dritten Förderperiode untersuchten Grenzflächen zwischen den Elementkristallen  $\text{Si}(111)|\text{Ti}(0001)$  wurden größere Superzellen mit bis zu 1000 Atomen konstruiert und optimiert. Zum Erstellen der Startstrukturen für diese Rechnungen wurde auf ein Dichtefunktional-basiertes “tight-binding”-Verfahren zurückgegriffen, das ebenfalls unter Verwendung periodischer Randbedingungen eine Beschreibung des Grenzflächensystems mit Hilfe von Schichtmodellen ermöglicht. Dies war erforderlich, da bei den Untersuchungen, die in der dritten Förderperiode an kleineren Strukturmodellen mit bis zu 200 Atomen noch eine Veränderung der Strukturparameter im Inneren der Siliziumschicht gefunden wurde.

Die Grenzflächenenergie des Silizium-Titan-Kontaktes vor der Reaktion wurde mit Dichtefunktional-Untersuchungen zu  $0.28 \text{ J/m}^2$  berechnet [GS05a, G04, gs04]. Mit der “tight-

binding"-Methode wurde für die selbe Superzellgröße ein Wert von  $0.32 \text{ J/m}^2$  erhalten, der im Rahmen der Methodengenauigkeit sehr gut mit dem Ergebnis der Dichtefunktional-Studie übereinstimmt. Auch für größere Superzellen von bis zu 1000 Atomen steigt die berechnete Grenzflächenenergie nur noch marginal auf  $0.35 \text{ J/m}^2$  an. Die strukturelle Relaxation umfasst die ersten beiden Si(111)-Doppellagen an der Grenzfläche und klingt dann ab, so dass bereits die dritte Si-Doppellage den Si-Si-Abstand des relaxierten Volumenkristalls aufweist. Auch der Translationszustand, der mit Rechnungen auf der Basis der vollen Dichtefunktionaltheorie erhalten worden war, wurde in diesen Berechnungen bestätigt. Damit sind die bereits diskutierten Faktoren für die Reaktivität der Grenzfläche bestätigt: der Elektronegativitätsunterschied von Ti und Si führt zu einer Negativierung der Silizium-Ionen und damit zur Silizid-Bildung, während die Fehlpassung der Gitterkonstanten von Silizium und Titan ungünstige elastische Wechselwirkungen an der Grenzfläche induziert und die Mobilität der Atome erhöht [gcs04a, g05, ges05].

### 2.4.2 Teilaufgabe "Silizid-Bildung an der Ti(0001)|Si(111)-Grenzfläche"

Darauf aufbauend wurden Molekulardynamik-Simulationen mit Hilfe von Superzellmodellen durchgeführt, welche die Grenzfläche Ti(0001)|Si(111) vor, während und nach der Silizidbildung repräsentieren. Vor der Silizidbildung beträgt die Energie der reinen Grenzfläche nur  $0.28 \text{ J/m}^2$  [GS05a, G04, gs04, gcs04a]. Dies deutet darauf hin, dass die Wechselwirkung vor der Grenzflächenreaktion nur schwach attraktiv ist und von den wenigen direkten Ti-Si-Bindungen vermittelt wird. 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  $0.52 \text{ J/m}^2$  [GS06a, GS06b]. Im Einklang mit experimentellen Befunden wurde beobachtet, dass Silizium die mobilere Spezies an der Grenzfläche ist. Vorläufige Ergebnisse für die Grenzflächen Ti|TiSi<sub>2</sub>|Si lassen darauf schließen, dass die für Kobalt berechnete Stabilisierung durch Silizidbildung auch bei Titan erfolgt (siehe auch Abschnitt 2.4.3) [GS05a, ges05].

Für ein kleineres Superzell-Modell, bei dem starke expansive Kräfte auf Silizium und kontraktive Kräfte auf Titan wirken, war das System sogar nichtbindend [gs04, g04a]. Diese Befunde stehen im Einklang mit weiteren Dichtefunktional-Untersuchungen zu Fremdatom-dotierten Oxid-Grenzflächen, an denen abhängig von der Größe und der elektronischen Struktur des Dotierstoffs ein Versagen der Grenzfläche prognostiziert wird, welches - neben elektronischen Faktoren - wie an der Titan-Silizium-Grenzfläche auf ungünstige elastische Wechselwirkungen zurückzuführen ist [GS06c, GS05b, gjss04, g04a, g04b, g04c].

Aufgrund der Gitterfehlanpassung zwischen Titan ( $a_0 = 2.95 \text{ \AA}$ ) und Silizium ( $a_0 = 3.85 \text{ \AA}$ ) beinhalten gleiche Bereiche der Ti(0001)- und Si(111)-Oberflächen eine unterschiedliche Anzahl an Atomen mit einem Verhältnis von Ti : Si von etwa 16 : 18, so dass die Bildung eines durchgehenden TiSi<sub>2</sub>-Films mit größeren Atomumordnungen verbunden ist und innerhalb der begrenzten Simulationsdauer nicht erwartet werden kann. Es können jedoch die lokalen Strukturparameter, z. B. der Ti-Si-Abstand, an der Grenzfläche im Simulationsmittel verfolgt werden. Vor der Reaktion ergab die Geometrieoptimierung

der Grenzfläche eine Verbiegung der Titan-Ebene an der Grenzfläche um  $0.09 \text{ \AA}$ . 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  $2.7 \text{ \AA}$  liegen. Die Siliziumlage an der Grenzfläche zeigte hingegen keine signifikante Aufräuhung, aber der Abstand zur darunterliegenden Siliziumlage war um  $0.21 \text{ \AA}$  vermindert. Dadurch bilden die beiden Siliziumlagen eine leicht abgeflachte gewellte Sechseckstruktur, die auch in Schichtsiliziden wie  $\text{CaSi}_2$  vorliegt. Dadurch kommen bereits am nicht reagierten Kontakt die Si-Atome der zweiten Lage in näheren Kontakt mit der Titanschicht und können sich an der Wechselwirkung mit dem Titan beteiligen [GS05a, G04].

Abbildung 2.1 zeigt die radiale Verteilungsfunktion (*Radial Distribution Function*) für den Si-Ti-Abstand, der im Bereich der Grenzfläche auftritt. Die obere Kurve stellt die Abstände vor der Grenzflächenreaktion dar, die untere Kurve gibt die Mittelwerte wieder, die im Verlauf einer Born-Oppenheimer-Molekulardynamik-Simulation bei einer Temperatur von  $600 \text{ K}$  über einen Zeitraum von  $5 \text{ ps}$  erhalten wurden. Da vor der Reaktion nur einige wenige Si-Ti-Abstände die lokale Koordination an der Grenzfläche bestimmen, weist die obere Kurve sehr klar gegeneinander abgegrenzte Maxima auf, während die Verteilungsfunktion durch die Mittelung über die Molekulardynamik-Simulation verbreitert wird. Wie Abbildung 2.1 zeigt, verstärkt sich der Trend zur Angleichung der Ti-Si-Abstände nach der Reaktion der beiden Komponenten. Durch die Grenzflächenreaktion kommt es damit zu einer Ausbildung weiterer attraktiver Ti-Si-Wechselwirkungen, welche die Erhöhung der Grenzflächenenergie nach sich ziehen [GS06a, GS06b]. Neben den Molekulardynamik-Simulationen wurde auch ein modifiziertes Monte-Carlo-Ising-Verfahren entwickelt, das es erlaubt, die Strukturbildung in einer Filmgeometrie auf einem größeren Ausschnitt einer realistischen, defektbehafteten Oberfläche zu simulieren [O04, gmcs04, sgmc04, omg+05]. Dieses Verfahren, ursprünglich für die Bedeckung mit Molekülen konzipiert, erlaubt es nach einer Anpassung der Wechselwirkungsparameter auch, die Bildung von Silizid-Inseln bzw. -Körnern an der Grenzfläche zu modellieren.

### 2.4.3 Teilaufgabe “Stabilität und Struktur der reagierten Grenzfläche”

An der  $\text{Ti}(0001)|\text{Si}(111)$ -Grenzfläche entstehen durch die Reaktion und Ausbildung einer Silizid-Modifikation zwei neue Grenzflächen zwischen Silizid und Silizium bzw. zwischen Silizid und Titan. Die Stabilität dieser beiden Grenzflächen wurde mit Hilfe von Dichtefunktional-Studien untersucht. Für die Grenzfläche zwischen einer  $\text{Si}(111)$ - und einer  $\text{TiSi}_2(001)$ -Oberfläche konnte ein Strukturmodell erstellt werden, welches eine geringere Gitterfehlpassung von  $5\%$  aufweist. Dabei stehen je zwei Einheitszellen des Si einer Einheitszelle des  $\text{TiSi}_2$  ( $a_0 = 8.10 \text{ \AA}$ ) gegenüber. Hochsymmetrische Adhäsionsplätze gibt es für Silizium-Atome der  $\text{Si}(111)$ -Fläche auf den Si-Atomen, auf den Ti-Atomen, bzw. auf den Dreifachloch-Plätzen über je zwei Si-Atomen und einem Ti-Atom des  $\text{TiSi}_2$ . Alle drei Plätze sind mit Grenzflächenenergien zwischen  $0.9$  und  $1.2 \text{ J/m}^2$  stabiler als die  $\text{Ti}(0001)|\text{Si}(111)$ -Grenzfläche vor der Reaktion. Die Ti-Si-Bindungslängen betragen  $2.64 \text{ \AA}$  und sind damit ebenfalls in dem Bereich, der sich während der Molekulardynamik-Simulation als stabile Koordinationsgeometrie einstell-



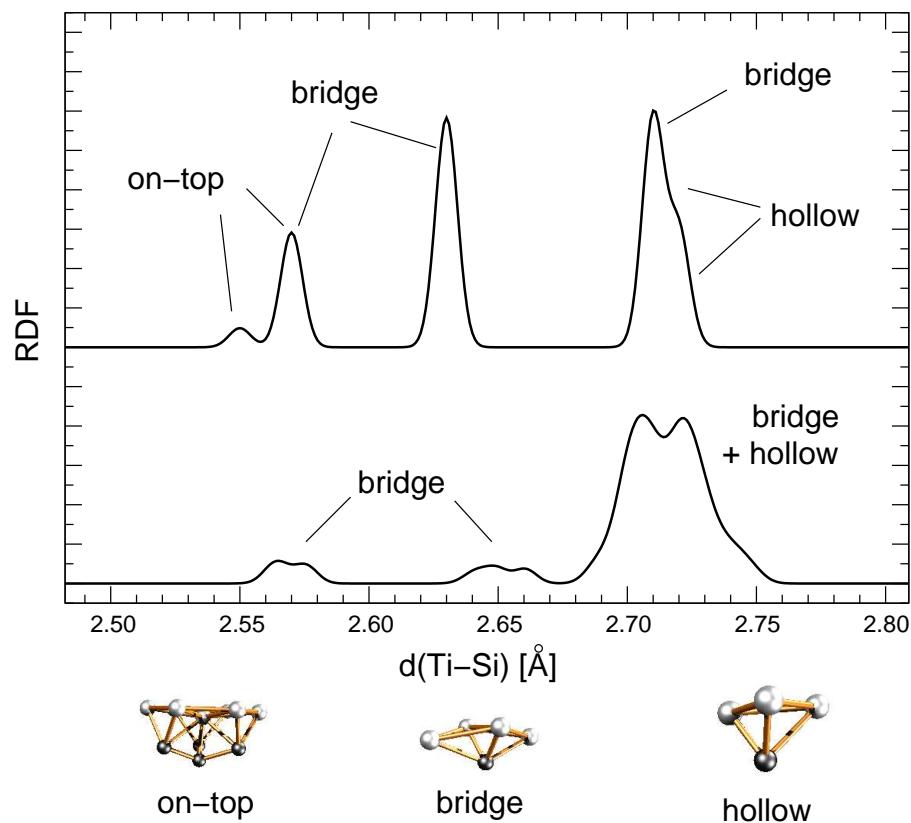


Abbildung 2.1: Lokale Koordination im Grenzflächensystem Ti(0001)|Si(111)

te. Für die analoge Untersuchung der Ti(0001)|TiSi<sub>2</sub>-Grenzfläche konnte bislang keine kleine Einheitszelle gefunden werden, welche eine Berechnung mit voller Dichtefunktionaltheorie erlaubt. Eine Abschätzung mit Hilfe der “tight-binding”-Methode ergab aber auch für diese Grenzfläche Energien von mehr als 1.2 J/m<sup>2</sup>.

#### 2.4.4 Teilaufgabe “Stabilität, Struktur und elektronische Eigenschaften von nanostrukturiertem TiSi<sub>2</sub>”

In Ergänzung zu den dünnen, zweidimensionalen Grenzflächenfilmen aus Titandisilizid, welche an ausgedehnten Titan-Silizium-Kontakten gebildet werden, sollte gezielt auch der Einfluss einer nanoskaligen Kontaktgeometrie auf die strukturellen, elektronischen und Transport-Eigenschaften untersucht werden, da in verwandten, metallischen wie halbleitenden binären und ternären Nanostrukturen deutliche Abweichungen zwischen den Materialeigenschaften von Nanokontakten und von makroskopisch ausgedehnten Systemen auftreten [GSS04a, GSS04b, IHGS06, gss04a, gss04b, gss04c, gss04d, gs05]. Neben nanotubularen Systemen, welche besonders von weniger stark ionischen Materialien bevorzugt werden, wurden vor allem für kleinere Durchmesser auch stäbchenförmige Strukturen untersucht, in denen die lokale Koordinationsgeometrie mehr der im ungestörten, unendlich ausgedehnten Volumenkristall entspricht [g04a, g04b, g04c]. Um die Periodizität der Strukturen in Röhren- bzw. Stäbchen-Richtung zu nutzen, erfolgte auch

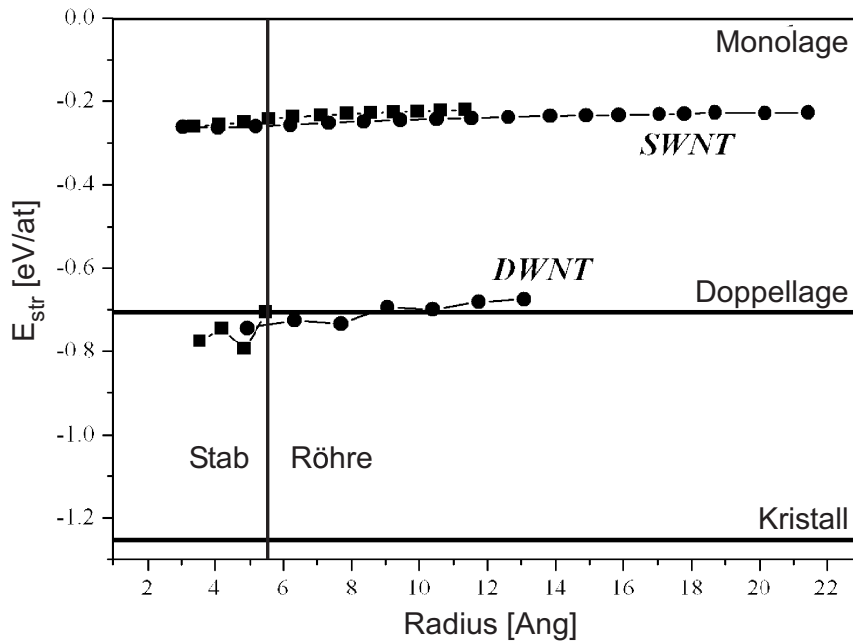


Abbildung 2.2: Energetik nanoskaliger  $\text{TiSi}_2$ -Strukturen im Vergleich zur Energie des Volumenkristalls bzw. der dünnen ein- und zweilagigen Filme.

diese Untersuchung mit dem Bandstruktur-Verfahren, mit dem bereits die Grenzfläche optimiert wurde [EGS06].

Abbildung 2.2 zeigt die Energetik der berechneten Nanostrukturen im Vergleich zur Energie des Volumenkristalls, der Monolage und der Doppellage. Im Gegensatz zur Situation bei Nanoröhren sind die Nanostrukturen jeweils stabiler als die entsprechende Mono- bzw. Doppellage. Dies zeigt, dass neben der elastischen Verspannung, die zur Krümmung der Lage erforderlich ist, attraktive, kovalente und Coulomb-Wechselwirkungen auftreten, welche die kompakteren Strukturen begünstigen. Im Gegensatz zu anderen binären Verbindungen unterscheidet sich aber bei binären Titan-Silizium-Phasen das Mischungsverhalten auf der Nanometerskala nicht grundlegend von den Verhältnissen im ausgedehnten Volumenkristall [GSS04a, gss04a, gss04b, gss04c, gss04d]. In einem Hauptgruppen-Silizid der gleichen Stöchiometrie wie die hier relevanten Verbindungen, dem  $\text{CaSi}_2$ , wurde ferner nachgewiesen, dass sich das Zintl-Konzept der Strukturbildung auch auf Nanostrukturen übertragen lässt.

Im Gegensatz dazu weichen die elektronischen Eigenschaften des nanostrukturierten  $\text{TiSi}_2$  von denen des Volumenkristalls ab. Abbildung 2.3 gibt eine Gegenüberstellung der berechneten elektronischen Zustandsdichten für den Volumenkristall in der C54-Struktur (a), für eine (001)-Monolage (b), sowie für eine tubuläre Nanostruktur mit einem Innendurchmesser von 6.21 Å. Neben der gesamten Zustandsdichte sind auch projizierte Zustandsdichten links für Titan, rechts für Silizium, abgebildet. Deutlich erkennbar ist der starke Anstieg elektronischer Zustände im Bereich der Fermienergie (0 eV) beim Übergang vom Volumenkristall zur Nanostruktur, der ein Indiz für eine bessere elektronische Leitfähigkeit der Nanostrukturen ist. Der Anstieg der Zu-

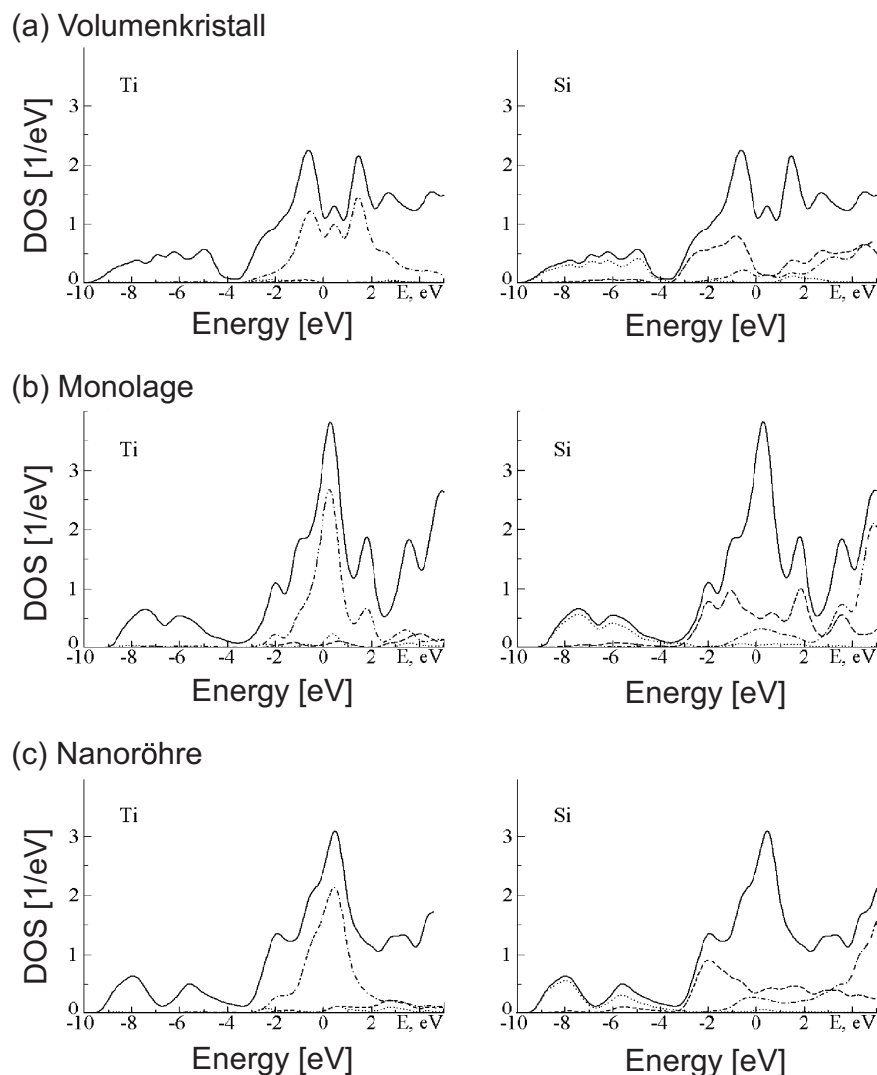


Abbildung 2.3: Platz- und Drehimpuls-projizierte Dichte elektronischer Zustände von  $\text{TiSi}_2$  als Volumenkristall (a), als (001)-Monolage (b) und als (6,6)-Nanoröhre (c). Die durchgezogenen Linien zeigen die gesamte Zustandsdichte, die s-, p- und d-Zustände sind jeweils durch gepunktete, gebrochene und gestrichpunktete Linien gekennzeichnet. Die linken Graphen zeigen Projektionen auf die Ti-Zustände, die rechten Graphen sind Projektionen auf die Si-Zustände.

standsdichte tritt bereits bei der einzelnen Monolage auf und ist bei der Nanoröhre verstärkt, ist also als "finite-size"-Effekt zu klassifizieren. Deshalb sollten  $\text{TiSi}_2$ -Schichten am  $\text{Ti}(0001)|\text{Si}(111)$ -Kontakt, welche die Adhäsion zwar verbessern, aus elektronischen Gründen im tatsächlich herzustellenden Bauelement möglichst dünn gehalten werden. Mit Hilfe der Platz- und Drehimpuls-projizierten Zustandsdichten konnte gezeigt werden, dass die leeren d-Zustände des Titan für diesen Anstieg maßgeblich sind, so dass das Silizid auch eine ideale Basis für eine Kontaktierung mit einem anderen Übergangsmetall, z. B. mit Gold darstellt.

**Literaturverzeichnis**

- [EGS06] A. N. Enyashin, S. Gemming, G. Seifert, TiSi<sub>2</sub> nanostructures - enhanced conductivity at the nanoscale? *phys. stat. sol. (b)*, zur Veröffentlichung eingereicht.
- [G04] S. Gemming. Structure and reactivity at interfaces - density-functional investigations, Habilitation, TU Chemnitz, Dezember 2004.
- [GS05a] S. Gemming, M. Schreiber. Density-functional investigation of alloyed nanowires. *Comp. Phys. Commun.* 169:57-59, 2005.
- [GS05b] S. Gemming, M. Schreiber. Impurity and vacancy clustering at the  $\Sigma 3$  (111) [1-10] grain boundary in strontium titanate *Chem. Phys.* 309:3-13, 2005.
- [GS06a] S. Gemming, M. Schreiber. Theoretical investigation of interfaces. in *New materials in experiments and simulations*, Hrsg.: J.B. Suck, M. Schreiber und S. Gemming, Springer Series in Material Science (Springer, Berlin, Heidelberg 2006), zur Veröffentlichung eingereicht.
- [GS06b] S. Gemming, A. Enyashin, M. Schreiber. Amorphisation at heterophase interfaces. in *Parallel Algorithms and Cluster Computing - Implementations, Algorithms, and Applications* -, Hrsg.: K.H. Hoffmann und A. Meyer, Springer Lecture Notes in Computational Science and Engineering (Springer, Berlin, Heidelberg 2006), zur Veröffentlichung eingereicht.
- [GS06c] S. Gemming, M. Schreiber. Structural and electronic properties of the near  $\Sigma 5(111)$  grain boundary in anatase. *J. Chem. Phys.*, zur Veröffentlichung eingereicht.
- [GSS04a] S. Gemming, G. Seifert, M. Schreiber. DFT investigation of nanostructured binary compounds. in *Electronic properties of synthetic nanostructures*, Hrsg. H. Kuzmany, J. Fink, M. Mehring und S. Roth, AIP Conf. Proc. 723, 368-371 (2004).
- [GSS04b] S. Gemming, G. Seifert, M. Schreiber. Density functional investigation of gold-coated nanowires. *Phys. Rev. B* 69, 245410:1-6, 2004.
- [IHGS06] V. V. Ivanovskaya, T. Heine, S. Gemming, G. Seifert, Structure, stability and electronic properties of the composite Mo<sub>1-x</sub>Nb<sub>x</sub>S<sub>2</sub> nanotubes. *phys. stat. sol. (b)*, im Druck.
- [O04] C. Olbrich. Ising-Modell zur Simulation von Molekülaggregaten auf gestuften Oberflächen, Bachelor-Arbeit, TU Chemnitz, August 2004.

**Beiträge zu wissenschaftlichen Veranstaltungen:**

- [g04a] S. Gemming. DFT for systems with reduced dimensionality. Seminar des SFB 648, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, 07/04.
- [g04b] S. Gemming. DFT für Systeme mit reduzierter Dimensionalität. Heraeus-Ferienkurs für Physik, TU Chemnitz, 09/04.
- [g04c] S. Gemming. DFT for systems with reduced dimensionality. Seminar des IFF, IFW Dresden, Dresden, 11/04.
- [g05] S. Gemming. Density-functional band-structure calculations. COST-Workshop “Density-Functional Methods”, Dresden, 04/05.
- [gcs04a] S. Gemming, I. Chaplygin, M. Schreiber. A reactive interface: silicon - titanium. EPS-Meeting, Prag, Tschechien, 07/04.
- [ges05] S. Gemming, A. Enyashin, M. Schreiber. Structure and reactivity at metal-semiconductor interfaces. Psi-K Meeting (EU), Schwäbisch Gmünd, 09/05.
- [gjs04] S. Gemming, R. Janisch, M. Schreiber, N. Spaldin. DFT Investigation of a low-energy interface in anatase. 103. Hauptversammlung der Deutschen Bunsen-Gesellschaft, Dresden, 05/04.
- [gmcs04] S. Gemming, K. Morawetz, C. Olbrich, M. Schreiber. A multi-parameter Ising model for the adsorption at structured surfaces. Seminar des SFB 609, Institut für Gesteinshüttenkunde, RWTH Aachen, 11/04.
- [gs04] S. Gemming, M. Schreiber. Density-functional study of the titanium-silicon interface. Europhysics Conference on Computational Physics (CCP 2004), Genua, Italien, 09/04.
- [gs05] M. Schreiber, S. Gemming. DFT investigation of systems with reduced dimensionality. Summer School NANOMA 2005, Physics and Chemistry of Nanomaterials, Cluj-Napoca, Rumänien, 09/05.
- [gss04a] S. Gemming, M. Schreiber, G. Seifert. DFT investigation of alloyed nanowires. EPS-Meeting, Prag, Tschechien, 07/04.
- [gss04b] S. Gemming, M. Schreiber, G. Seifert. Density functional investigation of gold-coated metallic nanowires. Workshop Cooperative Phenomena in Optics and Transport in Nanostructures, MPI Dresden, 06/04.
- [gss04c] S. Gemming, G. Seifert, M. Schreiber. Density-functional investigation of alloyed metallic nanowires. Europhysics Conference on Computational Physics (CCP 2004), Genua, Italien, 09/04.
- [gss04d] S. Gemming, G. Seifert, M. Schreiber. DFT investigation of alloyed metallic nanowires. 40th Symposium for Theoretical Chemistry, Suhl, 09/04.
- [omg+05] C. Olbrich, K. Morawetz, S. Gemming, R. Scholz, M. Schreiber, R. Ermrich, G. Seifert. A multi-parameter Ising model for the adsorption of molecules at structured surfaces. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Berlin, 03/05.

[sgmc04] M. Schreiber, S. Gemming, K. Morawetz, C. Olbrich. A multi-parameter Ising model for the adsorption of molecules at structured surfaces. CompPhys04 (5<sup>th</sup> NTZ-Workshop on Computational Physics, Leipzig, 11/04.

## 2.5 Offene Fragen / Ausblick

In der laufenden Förderperiode wurden die mikroskopischen Mechanismen aufgeklärt, welche die Strukturbildung an reaktiven Metall-Halbleiter-Grenzflächen steuern und in nanostrukturierten binären Modifikationen zur Ausbildung neuartiger elektronischer Eigenschaften führen. Dazu wurde neben dem parallelen Bandstrukturverfahren auch ein “tight-binding”-Ansatz verwendet, mit dem sich im Sinne eines Skalen-übergreifenden Modellierens von Materialeigenschaften geeignete Startgeometrien für die Strukturoptimierung effizient generieren lassen. Diese Ergebnisse zu Strukturbildung und zu den Eigenschaften des elektronischen Grundzustands sollen als Ausgangspunkt für die weitergehende Untersuchung des elektronischen Transports über Metall-Halbleiter-Grenzflächen dienen.

Konkret sollen damit für das System Ti(0001)|Si(111) drei komplementäre theoretische Ansätze verfolgt werden:

1. Dichtefunktional-Störungstheorie, bei der die Reaktion des Systems auf ein externes elektrisches Feld sowie auf Auslenkungen der Atome um ihre optimalen Positionen berechnet wird und die als zeitabhängige Formulierung einen Zugang zu angeregten Einteilchenzuständen liefert,
2. Wellenpaket-Dynamik auf den ebenfalls in der laufenden Förderperiode berechneten Potentialhyperflächen für den Grundzustand und für den ersten elektronisch angeregten Zustand,
3. Lösung der Bethe-Salpeter-Gleichung für die Zweiteilchen-Streuung am bereits berechneten Grenzflächenpotential.

Damit sollen folgende experimentelle Beobachtungen erklärt werden:

1. Elektronische Eigenschaften der Grenzfläche, z.B. die Leitfähigkeit, korrelieren mit der konkret vorliegenden atomistischen Struktur. Dies ist insbesondere für das Endprodukt der Grenzflächenreaktion, das TiSi<sub>2</sub>, interessant, da von den beiden niederenergetischen Modifikationen nur die C54-Struktur (TiSi<sub>2</sub>-Strukturtyp) einen geringen elektrischen Widerstand aufweist, während die C49-Struktur (ZrSi<sub>2</sub>-Typ) einen für die Anwendung unerwünscht hohen Kontaktwiderstand hat.
2. Da experimentelle Hinweise vorliegen, dass die Abscheidung einer Monolage Niob an der Grenzfläche den elektronischen Transport über die Grenzfläche deutlich verstärkt, sind ebenfalls Modellrechnungen zum Einfluss der Dotieratome geplant.
3. Darüber hinaus sollen die Erkenntnisse zur Strukturbildung an der Titan-Silizium-Grenzfläche auf die Wechselwirkungen an der Grenzfläche zwischen Vanadium und

Silizium angewandt werden. Für prototypische Strukturen sollen so die Potentialdaten erzeugt werden, welche in eine vergleichende Studie zum elektrischen Transport über die Grenzfläche hinweg einfließen.





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

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

PD. Dr. W. Just  
19.06.1962  
ehemals  
Theoretische Physik I  
(Komplexe Systeme und  
Nichtlineare Dynamik)  
Fak. für Naturwiss.  
TU Chemnitz  
09107 Chemnitz  
(0371) 531-3040  
(0371) 531-3233  
just@physik.  
tu-chemnitz.de

PD. Dr. A. Latz  
06.02.1962  
ehemals  
Theoretische Physik I  
(Komplexe Systeme und  
Nichtlineare Dynamik)  
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 wer-

den. 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: Lyapunov 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].

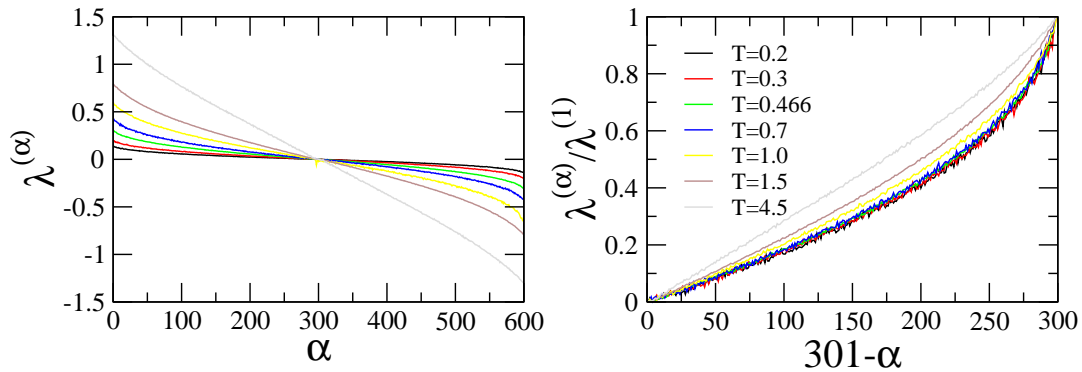


Abbildung 2.1: Das Lyapunov-Spektrum  $\lambda^{(\alpha)}$  (links) und das normierte Lyapunov-Spektrum  $\lambda^{(\alpha)}/\lambda^{(1)}$  (rechts) für ein binäres 3d Lennard-Jones-System bei verschiedenen Temperaturen. Die Teilchenzahl ist  $N = 100$  und Systemgröße ist  $L = 4.36$ .

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 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.

Unsere Ergebnisse für binäre LJ-Systeme deuteten an, dass das Lyapunov-Spektrum allein 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 oh-

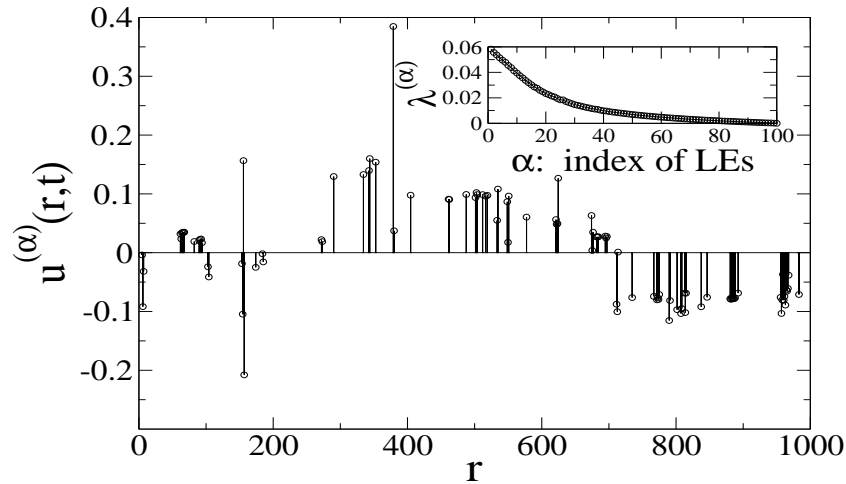


Abbildung 2.2: Momentaufnahme LV-Dichte  $u^{(\alpha)}(r,t)$  für eine 1-d Lennard-Jones-Flüssigkeit ( $N = 100$ ), wobei der Lyapunov-Exponent  $\lambda^{(96)}$  nahe Null liegt. Die Auslenkungen  $u_i^{(\alpha)}$  sind vertikal über der Teilchenposition  $R_i$  aufgetragen und zeigen eine wellenartige Struktur. Außerdem ist der positive Zweig des Lyapunov-Spektrums dargestellt.

ne 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.

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 und  $u_i^{(\alpha)}(t)$  der räumliche Anteil des  $\alpha$ -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.

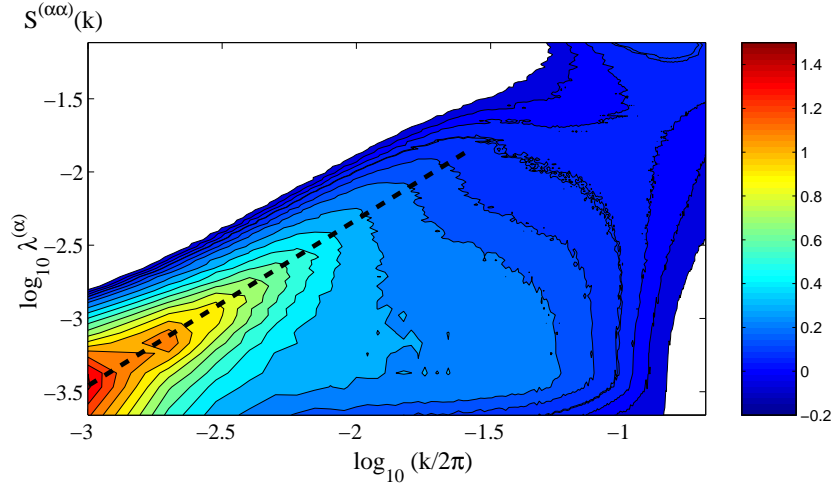


Abbildung 2.3: Höhenlinien der statischen Korrelationsfunktion  $S^{(\alpha\alpha)}(k)$  für eine 1-d Lennard-Jones- Flüssigkeit ( $N = 100$ ,  $L = 1000$ ). Der Kamm bei kleinen  $k$ - und  $\lambda$ -Werten (angedeutet durch die gestrichelte Linie) zeigt die Existenz hydrodynamischer Lyapunov-Moden.

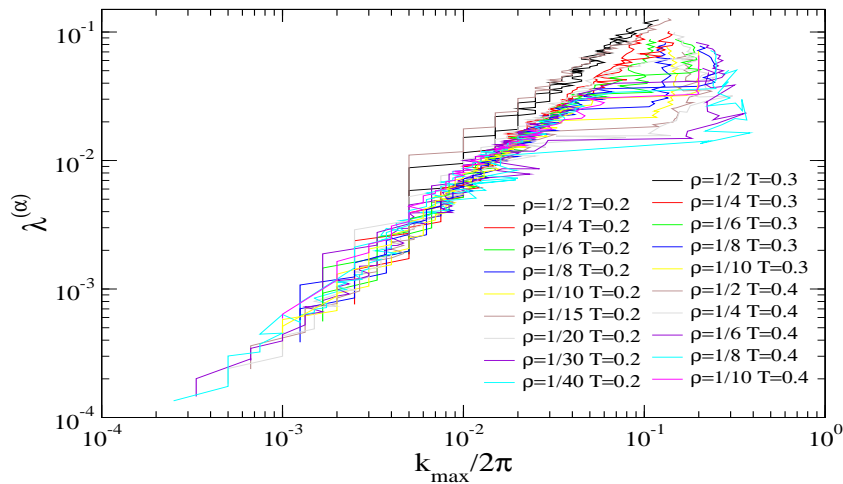


Abbildung 2.4: Dispersionsrelation  $\lambda(k)$  der hydrodynamischen Lyapunov-Moden, dargestellt für verschiedene Teilchendichten und Temperaturen. Die Dispersionsrelation ist über einen weiten Parameterbereich unabhängig von der Temperatur.

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  $\lambda$  und  $k$ . Dementsprechend bedeutet die entsprechende Dispersionsrelation  $\lambda(k)$ , dass die Lyapunov-Mode räumlich oszillatorisches Verhalten zeigt. In Abbildung 2.4 ist  $\lambda$  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.

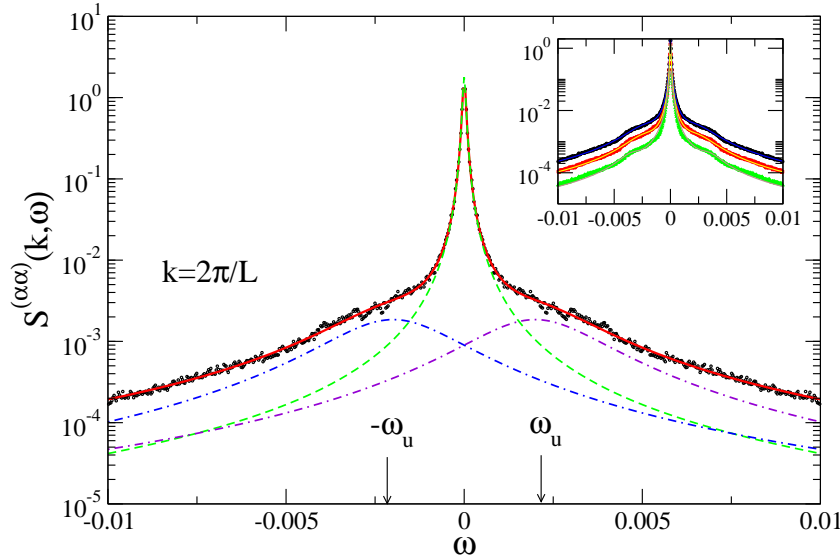


Abbildung 2.5: Dynamische Korrelationsfunktion  $S^{(\alpha\alpha)}(k, \omega)$  für  $\alpha = 96$  und  $k = 2\pi/L$ . Die durchgezogene Linie folgt aus einem Fit für die 3-Pol-Approximation. Außerdem ist die Zerlegung in drei Lorentz-Kurven dargestellt. Die kleine Abbildung vergleicht die Fits für  $k = 2\pi/L, 4\pi/L,$  und  $8\pi/L$  (von oben).

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  $\omega = \pm\omega(k)$  entspricht. 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  $\alpha$  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.

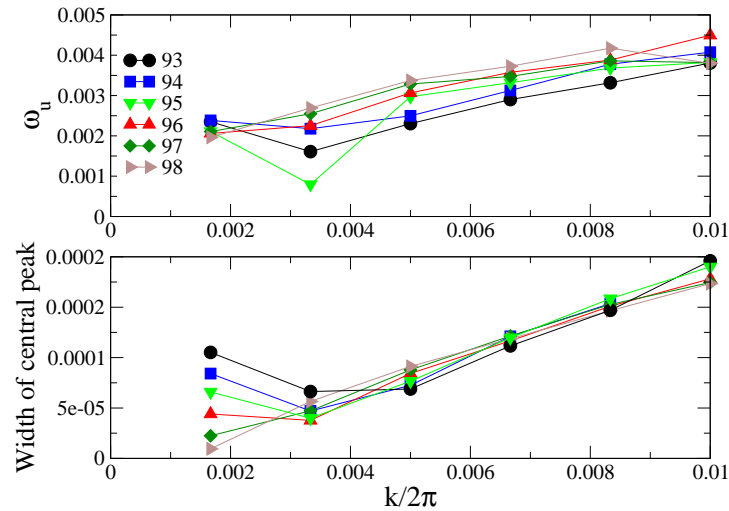


Abbildung 2.6: Dispersionsrelationen  $\omega^{(\alpha)}(k)$  (oben) und die  $k$ -Abhängigkeit der Breite des zentralen Peaks (unten) für verschiedene Lyapunov-Vektoren in der 3-Pol-Approximation. Die verschiedenen Zeitskalen sind klar voneinander getrennt.

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 wesentlich für unsere Suche nach Verbindungen zwischen mikroskopischen und makroskopischen Beschreibungen von Vielteilchensystemen.

Durch die Verwendung der Methode der Korrelationsfunktionen der LV ist es uns gelungen die Existenz der HLM in folgenden räumlich ausgedehnten Systemen erfolgreich nachzuweisen:

**Gekoppelte chaotische Abbildungen (CMLs, Coupled map lattices)** mit Hamiltonscher oder dissipativer lokaler Dynamik

$$v_{t+1}^l = (1 - \gamma)v_t^l + \epsilon[f(u_t^{l+1} - u_t^l) - f(u_t^l - u_t^{l-1})] \quad (2.1)$$

$$u_{t+1}^l = u_t^l + v_{t+1}^l \quad (2.2)$$

und

$$u_{t+1}^l = u_t^l + \epsilon[f(u_t^{l+1} - u_t^l) - f(u_t^l - u_t^{l-1})] \quad (2.3)$$

Wobei  $f(z)$  eine nichtlineare Abbildung,  $t$  der diskrete Zeitindex und  $l = \{1, 2, \dots, L\}$  der Index der Gitterpunkte sind. Sofern nicht anders angegeben, wird folgend von periodischen Randbedingungen und einer Dämpfungskonstante  $\gamma = 0$  ausgegangen.

**Dynamisches XY-Modell** mit dem Hamilton-Operator

$$H = \sum_i \dot{\theta}_i + \epsilon \sum_{ij} [1 - \cos(\theta_j - \theta_i)]. \quad (2.4)$$

**Kuramoto-Sivashinsky Gleichung**

$$h_t = -h_{xx} - h_{xxxx} - h_x^2. \quad (2.5)$$

Eine gemeinsame Eigenschaft dieser Systeme ist, dass sie kontinuierliche Symmetrien und Erhaltungsgrößen aufweisen. Dies wurde als notwendige Bedingung für das Auftreten von Lyapunov-Moden nachgewiesen [YR06b]. Unsere numerischen Simulationen und analytischen Resultate zeigen, dass diese Systeme in zwei Gruppen einteilbar sind. Die Einteilung erfolgt nach den Eigenschaften der hydrodynamischen Lyapunov-Moden in diesen Systemen. Genauer gesagt die Dispersionsrelation zwischen  $\lambda$  und  $k$ , die entweder  $\lambda \sim k$  für Hamiltonsche oder  $\lambda \sim k^2$  für dissipative Systeme ist (Abbildung 2.7). Zusätzlich zeigen die HLMs in Hamiltonschen Systemen ausbreitendes Verhalten, wohingegen in dissipativen Systemen die HLMs nur diffusives Verhalten zeigen. Zwei Beispiele für die dynamischen Strukturfaktoren der LV in CLMs sind in der Abbildung 2.8 zu sehen. Der obere Teil zeigt, dass jedes Spektrum zwei scharfe Peaks aufweist, die symmetrisch bei  $\pm\omega_u$  liegen. Zusätzlich ist  $\omega_u \simeq \pm c_u k$  für alle  $k \geq 2\pi/L$ . Diese Ergebnisse legen die Schlussfolgerung nahe, dass die HLMs in der gekoppelte standard Abbildungen ausbreitendes Verhalten zeigen. Das Spektrum der gekoppelte Kreisabbildungen weist nur einen einzigen zentralen Peak auf, der seinerseits gut durch eine Lorentz-Funktion angenähert werden kann. Dies impliziert, dass die HLMs in diesen Systemen diffusiv fluktuieren. Im Gegensatz zu Hartkugelsystemen wurden keinerlei stufenartige Strukturen im Lyapunov Spektrum festgestellt. In diesen Systemen zeichnen sich die die dynamische Entwicklung der LVs beschreibenden Größen durch intermittierendes Verhalten aus.

In Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Professor Rürger (TP B8) konvertierten wir das zuvor erstellte sequentielle Programm zur Berechnung von Lyapunov-Spektren

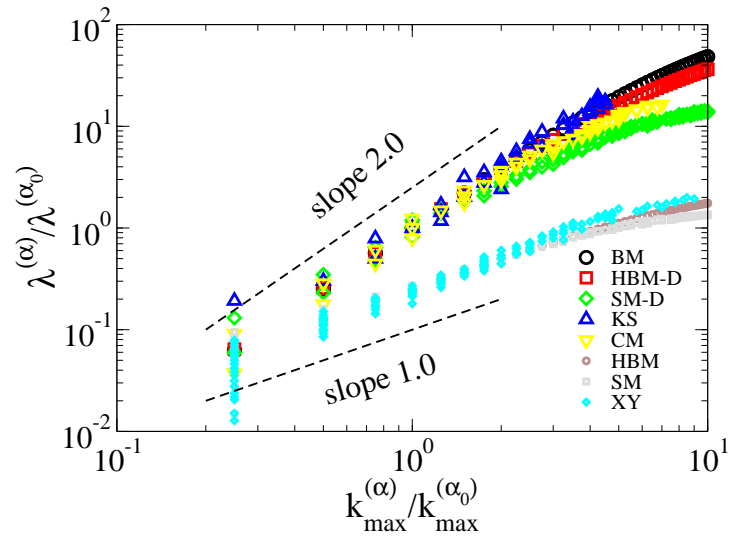


Abbildung 2.7: Die  $\lambda - k$  Dispersionsrelationen für verschiedene ausgedehnte Systeme mit kontinuierlichen Symmetrien. Die normalisierten Daten weisen einen Datenkollaps auf zwei Kurven auf. Dies unterstützt unsere Schlussfolgerung, dass es zwei Klassen von Systemen gibt, mit entweder  $\lambda \sim k$  oder  $\lambda \sim k^2$ . Systeme der Klasse  $\lambda \sim k$  sind: Eq.(2.1) mit  $f(z) = \frac{1}{2\pi} \sin(2\pi z)$  (SM), Eq.(2.1) mit  $f(z) = 2z(\text{mod}1)$  (HBM) und das 1d XY - Modell (XY). Systeme der Klasse  $\lambda \sim k^2$  sind: Eq.(2.3) mit  $f(z) = \frac{1}{2\pi} \sin(2\pi z)$  (CM), Eq.(2.3) mit  $f(z) = 2z(\text{mod}1)$  (BM), Eq.(2.1) mit  $f(z) = \frac{1}{2\pi} \sin(2\pi z)$  und  $\gamma = 0.7$  (SM-D), Eq.(2.1) mit  $f(z) = 2z(\text{mod}1)$  und  $\gamma = 0.7$  (HBM-D), 1d Kuramoto-Shivashinsky Gleichung (KS).

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 mit dem Integrationsalgorithmus effizient nutzen zu können, kann eine automatische Datenumverteilung 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

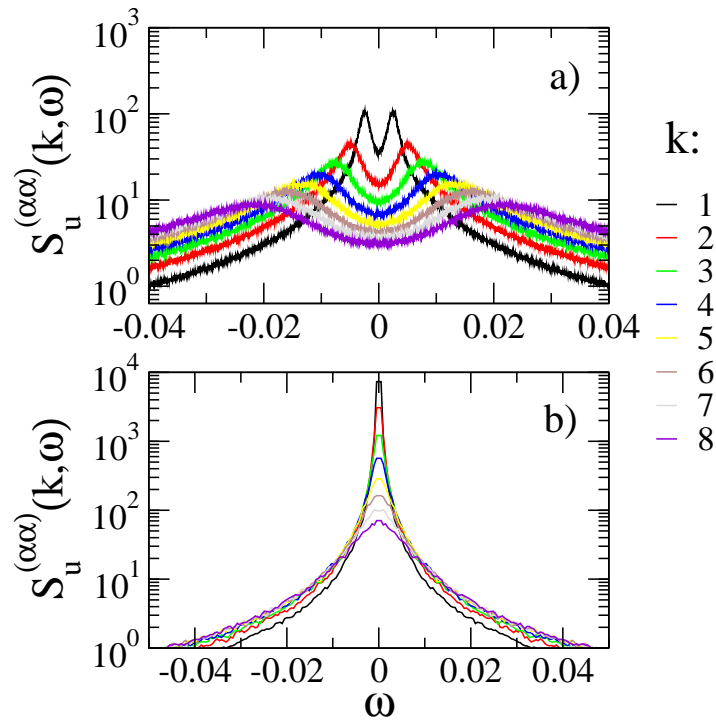


Abbildung 2.8: Dynamischer LV Strukturfaktor  $S_u^{(\alpha\alpha)}(k, \omega)$  für a) Eq.(2.1) mit  $\epsilon = 1.3$ ; und b) Eq.(2.3) mit  $\epsilon = 1.3$ .

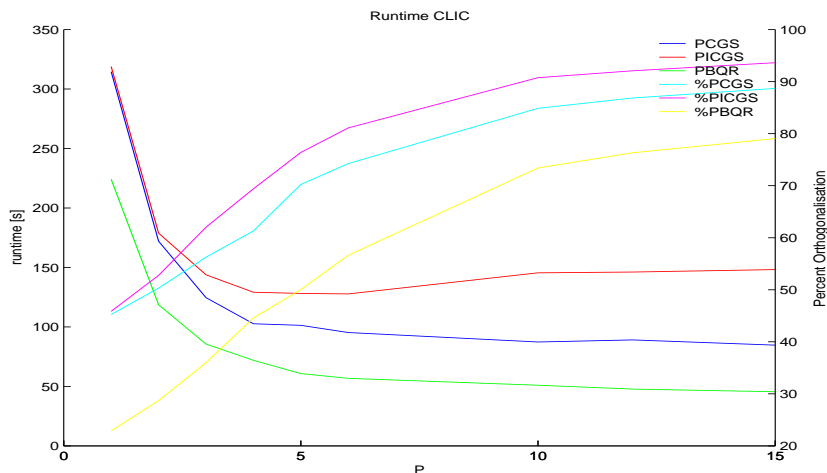


Abbildung 2.9: Rechendauer (abfallende Kurven) und Orthogonalisierungsgrad (ansteigende Kurven) als Funktion der Prozessorenzahl für das parallelisierte Programm im Cluster CLIC der TU Chemnitz für eine Simulation einer 3d binären Lennard-Jones-Flüssigkeit mit 80  $A$ -Teilchen und 20  $B$ -Teilchen.

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.



## 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 [HJR05] als Beitrag zu diesem Themenkreis gerechnet werden.

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 Diplomarbeit von Frau Hallerberg zur Periodic-Orbit-Theorie der Zeta-Funktion an Phasenübergängen [HJR05]. 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 wurde der Ansatz der Periodic-Orbit-Theorie in der kommenden Periode nicht weiter verfolgt.

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 2.10 zeigt das Spektrum  $\{\lambda^{(\alpha)}\}$  dieses Operators für ein einfaches ungeordnetes dynamisches System mit Markov-Partition. Die entsprechende Übergangsmatrix des

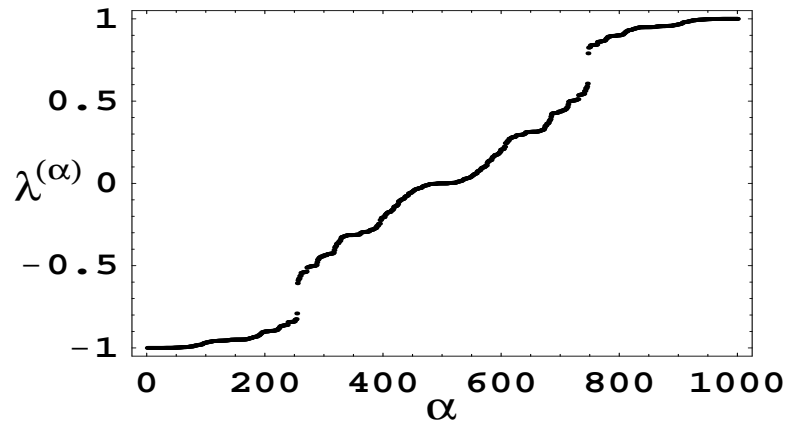


Abbildung 2.10: Das Spektrum eines dynamischen System vom Sinai-Typ. Die Eigenwerte clustern bei  $\lambda = 1$  (und aus Symmetriegründen auch bei  $\lambda = -1$ ). Sie wurden durch Diagonalisierung der Übergangsmatrix gewonnen.

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.

## 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).
- [FR05] A. Fichtner, G. Radons, Disordered iterated maps: Spectral properties, escape rates and anomalous transport. *New J. Phys.* **7**, 30 (2005).

- [HJR05] S. Hallerberg, W. Just, and G. Radons, Analytic Properties of the Ruelle Zeta Function for Mean-Field Models of Phase Transitions. *J. Phys. A: Math. Gen.* **38**, 5097-5109 (2005).
- [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, 2005).
- [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, Lecture Notes of Computer Science, vol. 3272, 1131-1140, Springer, Berlin (2005).
- [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**, 016609 (2004).
- [RU05] B. Rumpf, L. Biven, Weak turbulence and collapses in the Majda-McLaughlin-Tabak equation: Fluxes in wavenumber and in amplitude space. *Physica D* **204**, 188-203 (2005).
- [RY04a] G. Radons and H.L. Yang, Static and Dynamic Correlations in Many-Particle Lyapunov Vectors, nlin.CD/0404028, eingereicht bei *Phys. Rev. Lett.*
- [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.
- [YR05] H.L. Yang and G. Radons, Lyapunov instability of Lennard Jones fluids, *Phys. Rev. E* **71**, 036211 (2005); nlin.CD/0404027.
- [YR06a] H.L. Yang and G. Radons, Universal features of hydrodynamic Lyapunov modes in extended systems with continuous symmetries, *Phys. Rev. Lett.* im Druck.
- [YR06b] H.L. Yang and G. Radons, Hydrodynamic Lyapunov modes in coupled map lattices. *Phys. Rev. E*, **73**, 016202 (2006).
- [YR06c] H.L. Yang and G. Radons, Dynamical behavior of hydrodynamic Lyapunov modes in coupled map lattices. *Phys. Rev. E*, **73**, 016208 (2006).

## 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?



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 im-

plementiert 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], [KKG98], [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

Zur numerischen Simulation von Risswachstum hat sich neben anderen Verfahren (Boundary-Element-Method, Meshless Galerkin-Method) die Finite-Elemente-Methode (FEM) als geeignetes Werkzeug etabliert. Die Modellierung von Rissausbreitung mittels FEM erfordert die Bearbeitung des algorithmischen und implementierungstechnischen Problems der Bildung neuer belastungsfreier Oberflächen. Der Stand der Forschung wird überwiegend durch ingenieurmäßige, pragmatische Algorithmen charakterisiert [TW03, FR2003], die eine Verschiebung der Risspitze und eine angepasste Neuvernetzung in ihrer Umgebung realisieren und damit lediglich die Aufgabe auf eine informationstechnisch-topologische FEM-Frage zurückführen. Die Extended-Finite-Elemente-Methode (X-FEM)[BB99] realisiert für ein vorgegebenes Netz, das auch relativ grob sein kann, unter Verwendung von singulären Ansatzfunktionen eine relativ gute Anpassung des Netzes an fortschreitende Risse. Dabei werden nicht die Verschiebungen der Rissflanken, sondern die entsprechenden Verschiebungssprünge durch die Finite-Elemente-Formfunktionen des umliegenden Netzes approximiert.

Die Modellierung von Risswachstum stellt jedoch nach wie vor ein anspruchsvolles und schwieriges Problem dar. Zur Verbesserung der Lösungsgenauigkeit ist faktisch immer eine Abschätzung des lokalen Fehlers, insbesondere in Rissspitzenumgebungen, erfor-



derlich. Um dies zu tun, müssen adaptive Lösungs- und Vernetzungsstrategien verwandt werden, die in Verbindung mit iterativen Lösern optimale Algorithmen bezüglich Genauigkeit und Aufwand erzeugen. In diesem Zusammenhang ergibt sich für Risswachstumsimulationen mittels moderner Löser mit Multi-Level-Struktur, die die Informationen aller iterativ erzeugten Netze ausbeuten, das Problem, dass bei der Elementteilung und Kantenverdopplung die Hierarchie des Kantenbaums nicht verloren gehen darf, damit die Leistungsfähigkeit des iterativen PGCM-Lösers erhalten bleibt [MRS04]. Durch Anwendung einer speziellen Projektionstechnik wurde im Rahmen der Projektbearbeitung im Bearbeitungszeitraum 2002 bis 2004 ein neuer Löser mit Multi-Level-Struktur entwickelt, der bei Risswachstum effektiv einsetzbar ist. Dieser Löser ist in der Auslaufphase des SFB 393 entscheidend verbessert worden. Dabei wurden, in Analogie zur X-FEM, FE-Ansatzfunktionen für die Verschiebungssprünge über die Rissflanken eingesetzt. Im Vergleich mit dem Vorkonditionierer des schon erwähnten Lösers konnte ein weitaus effizienterer Vorkonditionierer erarbeitet werden.

### 2.3.2 Simulation der Rissausbreitung mittels adaptiv-iterativer Algorithmen

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 und Rissausbreitung 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.

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 Gleichungssolvern angewendet werden. Das entwickelte Programmschema ist in Abbildung 2.1 zu sehen.

Folgende Teilaufgaben wurden dazu im Bearbeitungszeitraum 2002 bis 2004 zur Entwicklung der Basissoftware erfüllt:

- Weiterentwicklung der vorhandenen adaptiven Vernetzungs- und Lösungsalgorithmen, die eine effektive Simulation von Rissausbreitung ermöglichen

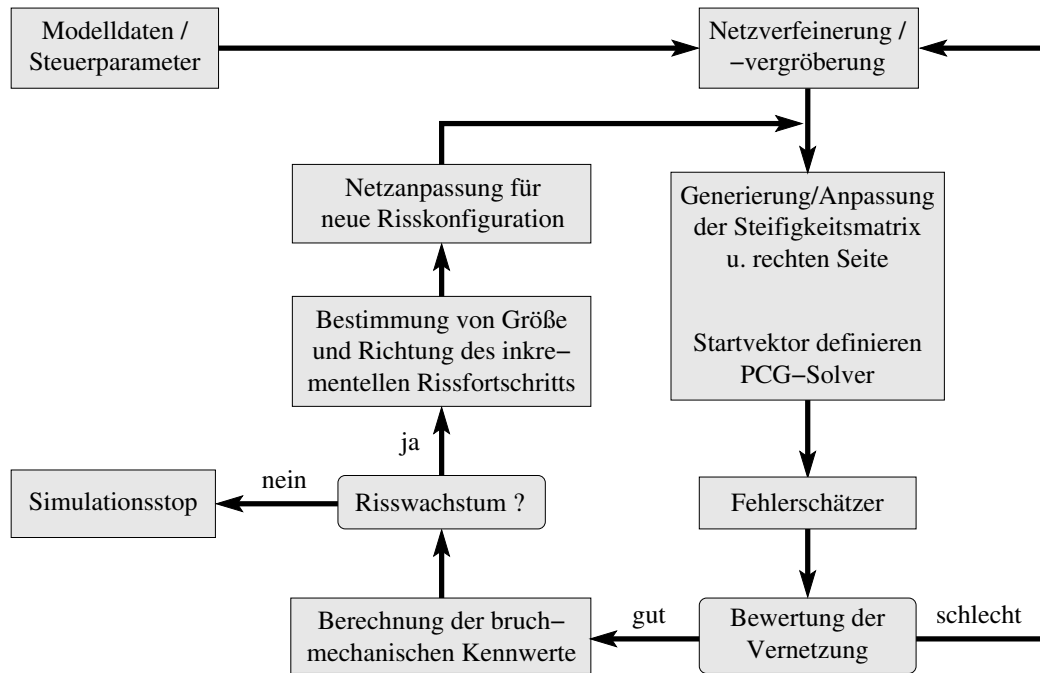


Abbildung 2.1: Programmschema

- Erarbeitung von geeigneten FEM-Techniken zur Bestimmung der bruchmechanischen Beanspruchungsparameter
- Festlegung/Findung geeigneter Kriterien zur Rissausbreitung und deren numerische Umsetzung für einfachste linear-elastische Aufgaben
- Erarbeitung einer bruchmechanisch gesteuerten Vernetzungsstrategie
- Einbau und Erprobung der erarbeiteten Techniken in adaptiv-hierarchische Löser

In der Auslaufphase 2004/2005 wurden

1. der iterative Löser für lineare Aufgaben entscheidend verbessert und
2. erste Schritte zur Einbeziehung des nichtlinearen Materialverhaltens (einschließlich Schädigungsmechanik) in die Risswachstumsformulierungen unternommen.

### 2.3.3 Vergleich unterschiedlicher Algorithmen zur Übertragung von Zustandsgrößen bei adaptiver Netzverfeinerung

Bei geometrisch und physikalisch nichtlinearen Problemen wird die äußere Belastung inkrementell in einzelnen Lastschritten aufgebracht. Wegen der Abhängigkeit der Lösung von der Belastungsgeschichte ist es bei einer Netzverfeinerung bzw. -vergrößerung im Rahmen der nichtlinearen FEM erforderlich, die Feldgrößen (Verzerrungen, Spannungen, innere Variablen) vom alten auf das neue Netz zu übertragen. Die Netzanpassung

und damit im Zusammenhang die Übertragung der Feldvariablen sind bei einer hierarchischen adaptiven Strategie örtlich begrenzt. Im Gegensatz dazu erfordert eine globale Neuvernetzung den Datentransfer für das gesamte Gitter.

Jedes einzelne Lastinkrement kann im Sinne einer adaptiven Strategie als separates Teilproblem angesehen werden, das folgende Schritte beinhaltet:

- Lösung des Anfangs-Randwert-Problems
- Fehlerschätzung
- Netzanpassung
- Übertragung der Feldgrößen auf Knoten und Gaußpunkte des neuen Netzes

Nachfolgend werden unterschiedliche Übertragungsalgorithmen miteinander verglichen: Ein elementorientiertes Extrapolationsverfahren, eine patchorientierte Strategie und das im Rahmen dieses Teilprojektes entwickelte Verfahren, welches auf der zusätzlichen Lösung des Anfangswertproblems in den Elementknoten basiert.

### Elementorientierte Extrapolation

Für den Vergleich unterschiedlicher Transferalgorithmen wurde entsprechend den Grundlagen der in [OQ91] vorgestellten elementorientierten Übertragungsmethode ein adäquater Extrapolationsalgorithmus ins Programm SPC-PM2AdNI implementiert. Dieser basiert auf der Definition von Interpolationsfunktionen  $M_i(\xi, \eta)$ , die der Bedingung

$$y(\xi, \eta) = \sum_{i=1}^n M_i(\xi, \eta) \bar{y}_i \quad (2.1)$$

genügen. Hierbei charakterisiert  $y(\xi, \eta)$  beliebige Feldvariablen bzw. deren Tensorkomponenten in Abhängigkeit von ihren Werten  $\bar{y}_i$  in den  $n$  Gaußpunkten des Elements.

Im betrachteten Fall wird für 8-Knoten-Elemente bei vollständiger Integration der folgende Ansatz für die konkreten Interpolationsfunktionen verwendet:

$$M_i(\xi, \eta) = c_{i1} + c_{i2}\xi + c_{i3}\eta + c_{i4}\xi\eta + c_{i5}\xi^2 + c_{i6}\eta^2 + c_{i7}\xi^2\eta + c_{i8}\xi\eta^2 + c_{i9}\xi^2\eta^2 \quad (2.2)$$

Ebenso wie die gewöhnlichen Formfunktionen mit den Elementknoten verbunden sind, werden auch die speziellen Interpolationsfunktionen  $M_i$  zu den Gaußpunkten mit den lokalen Koordinaten  $(\xi_j, \eta_j)$  in Beziehung gesetzt:

$$M_i(\xi_j, \eta_j) = 1 \quad \text{für} \quad i = j \quad (2.3)$$

$$M_i(\xi_j, \eta_j) = 0 \quad \text{für} \quad i \neq j. \quad (2.4)$$

Werden die Interpolationsfunktionen  $M_i$  in (2.3) und (2.4) ersetzt durch ihre Polynomdarstellung (2.2) in den Gaußpunkten mit den Koordinaten  $(\xi_j, \eta_j)$ , entsteht ein lineares

Gleichungssystem für die Bestimmung der unbekanntenen Koeffizienten  $c_{ij}$ . Es werden 81 Koeffizienten für die neun unterschiedlichen Interpolationsfunktionen  $M_i$  bezüglich der Gaußpunkte erhalten. Diese Interpolationsfunktionen werden für alle Feldvariablen bzw. deren Komponenten im Fall mehrstufiger Tensoren als identisch angenommen.

Unter Verwendung der Funktionen  $M_i$  wird die Extrapolation der Gaußpunktwerte eines Elementes auf seine Elementknoten durchgeführt. Gehört ein Knoten zu mehreren Elementen, werden an diesem unterschiedliche Werte für ein und dieselbe Feldgröße erhalten, je nachdem in welchem Element die Berechnung am Knoten erfolgte. Im Gegensatz zu der sonst in der Literatur üblichen Vorgehensweise werden diese unterschiedlichen Knotenwerte nicht gemittelt. Die unterschiedlichen Werte in den Seitenmittenknoten werden zur Berechnung des Kantensprungfehlers (siehe (2.15)) für die adaptive Steuerung herangezogen. Es wird davon ausgegangen, dass die mit Hilfe der Extrapolationsmethode ermittelten Knotenwerte der Feldgrößen von geringerer Genauigkeit sind als die mittels einer zusätzlichen Lösung des Anfangswertproblems berechneten.

Einige aktuelle Ergebnisse von Untersuchungen elementorientierter Extrapolation im Fall von nichtlinearen Problemen sind in [CRSW99, ERBM98, FC95] veröffentlicht.

### Patchorientiertes Verfahren

Um die Genauigkeit der Übertragungsmethode zu verbessern, müssen zusätzliche Informationen in die elementorientierte Extrapolationsmethode eingearbeitet werden. Eine logische Erweiterung und gleichzeitig eine Verbindung zwischen lokalen und globalen Algorithmen ist die Betrachtung einer Gruppe benachbarter Elemente (Patch) zur realistischeren Berechnung von Feldgrößen. Als Basis dient dabei die sogenannte superkonvergente Patch-recovery (SPR) Methode von Zienkiewicz und Zhu [ZZ92a, ZZ92c, ZZW93]. In diesem Rahmen werden polynomiale Funktionen eingeführt, welche die Feldgrößen innerhalb eines Teilgebietes des Gitters beschreiben. Diese Funktionen werden mit der Methode der kleinsten Quadrate an diskrete Werte in ausgewählten Punkten optimal angepasst.

Im Folgenden sollen kurz die grundlegenden Beziehungen der SPR-Methode für lineare Elastizität dargestellt werden (vergleiche [ZZ92b]). Die mittels der FEM berechneten Cauchy-Spannungen  $\boldsymbol{\sigma}_h$  lauten

$$\boldsymbol{\sigma}_h = \mathbf{D} \mathbf{B} \mathbf{u}_h \quad (2.5)$$

mit

$$\mathbf{u}_h = \mathbf{G} \bar{\mathbf{u}} \quad (2.6)$$

wobei  $\mathbf{D}$  die Elastizitätsmatrix,  $\mathbf{u}_h$  die FE Approximation der Verschiebungen und  $\bar{\mathbf{u}}$  die Knotenwerte der Verschiebungen sind. Die Matrix  $\mathbf{G}$  besteht aus dem Vektor  $\mathbf{N}^T = (N^1, N^2, \dots, N^n)$  mit den gewöhnlichen Formfunktionen und lautet im zweidimensionalen Fall:

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \mathbf{N}^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{N}^T \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

Weiterhin repräsentiert die Matrix  $\mathbf{B}$  den bekannten Differentialoperator, der die Verzerrungen mit den Verschiebungen  $\mathbf{u}_h$  verbindet. Das Ziel der SPR-Methode besteht in der Bestimmung von Knotenwerten  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^*$ , so dass die geglättete, kontinuierliche Feldgröße  $\boldsymbol{\sigma}^*$ , die über die Formfunktionen und diese Knotenparameter  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^*$  mit

$$\boldsymbol{\sigma}^* = \tilde{\mathbf{G}} \bar{\boldsymbol{\sigma}}^* \quad (2.8)$$

definiert ist, genauer sein soll als die FE-Approximation  $\boldsymbol{\sigma}_h$  von  $\boldsymbol{\sigma}$ . Die Matrix  $\tilde{\mathbf{G}}$  besteht aus der entsprechenden Anzahl von Vektoren  $\mathbf{N}$  analog zu (2.7). Die Berechnung der Spannungen  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^*$  erfolgt innerhalb eines Teilgebietes, bestehend aus benachbarten Elementen (Patch) mit einem gemeinsamen Scheitelknoten (siehe Abbildung 2.2). Es wird angenommen, dass die Knotenwerte der  $j$ -ten Spannungskomponente jeweils einer polynomialen Darstellung

$$\sigma_{p_j}^* = \mathbf{P}^T \mathbf{a}_j \quad (2.9)$$

des aktuellen Spannungsfeldes genügen. Hierbei definiert  $\mathbf{P}$  den Vektor der entsprechenden Polynomterme  $\mathbf{P}^T = [1, x, y, x^2, xy, y^2, x^2y, xy^2, x^2y^2, \dots]$ , die maximal die gleiche Ordnung  $p$  wie die Formfunktionen besitzen sollen. Mit  $\mathbf{a}_j$  wird der Vektor der zur betrachteten Spannungskomponente gehörenden Polynomkoeffizienten  $\mathbf{a}_j^T = [a_1, a_2, \dots, a_p]$  bezeichnet. Die polynomiale Näherung gilt für jeden Patch und wird für die Berechnung einer jeden Spannungskomponente genutzt.

Der Koeffizientenvektor  $\mathbf{a}_j$  wird mittels der Methode der kleinsten Quadrate bezüglich einer bestimmten Anzahl  $n$  von Bezugspunkten innerhalb des betrachteten Patches bestimmt.

$$\begin{aligned} F(\mathbf{a}_j) &= \sum_{i=1}^n (\sigma_{hj}(x_i, y_i) - \sigma_{p_j}^*(x_i, y_i))^2 \\ &= \sum_{i=1}^n (\sigma_{hj}(x_i, y_i) - \mathbf{P}^T(x_i, y_i) \mathbf{a}_j)^2 \rightarrow \text{Min} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Hierbei sind  $(x_i, y_i)$  die globalen Koordinaten des  $i$ -ten Knotens des Patches. Ausgehend von den notwendigen Bedingungen für die Existenz eines Minimums von (2.10) folgt das lineare algebraische Gleichungssystem

$$\mathbf{A} \mathbf{a}_j = \mathbf{b} \quad (2.11)$$

für den unbekanntem Koeffizientenvektor  $\mathbf{a}_j$  mit

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^n \mathbf{P}(x_i, y_i) \mathbf{P}^T(x_i, y_i) \quad \text{und} \quad \mathbf{b} = \sum_{i=1}^n \mathbf{P}(x_i, y_i) \sigma_{hj}(x_i, y_i) \quad (2.12)$$

Wiberg und Ziukas definierten den Begriff der Superkonvergenz in einem weiter gefassten Sinn: *One can recover the finite element solution and/or its derivatives by means of various post-processing techniques* [WZ98]. Entsprechend dieser Idee wurde für den Vergleich unterschiedlicher Transferalgorithmen eine patchorientierte Übertragungsmethode entwickelt, die auf der grundlegenden Konzeption des SPR aufsetzt und sie dahingehend weiterführt, dass nicht nur Spannungen, sondern alle vorhandenen Feldvariablen

$\mathbf{y}$  in dieser Art und Weise auf die Elementknoten übertragen werden. Dabei enthält der Vektor  $\mathbf{y}$  sowohl die Spannungen als auch die Verzerrungen, innere Variablen und den plastischen Multiplikator.

Das Ergebnis des Übertragungsalgorithmus kann durch viele Faktoren beeinflusst werden, so z.B. Form und Grad der verwendeten Polynome, Auswahl der Bezugspunkte usw. Vor allen Dingen muss gewährleistet sein, dass eine eindeutige Lösung im Rahmen der Methode der kleinsten Quadrate existiert. Das bedeutet, dass die Anzahl der Bezugspunkte nicht kleiner sein darf als der Grad des Polynoms. Aus diesem Grund werden in [GZH04] Gaußpunkte der vollständigen Integration empfohlen. In diesem Zusammenhang wurde der in das FE-Programm SPC-PM2AdNl implementierte Transferalgorithmus auf vollständig integrierte 8-Knoten-Elemente der Serendipity-Klasse angepasst. Dementsprechend wurden Patches der folgenden Form betrachtet:

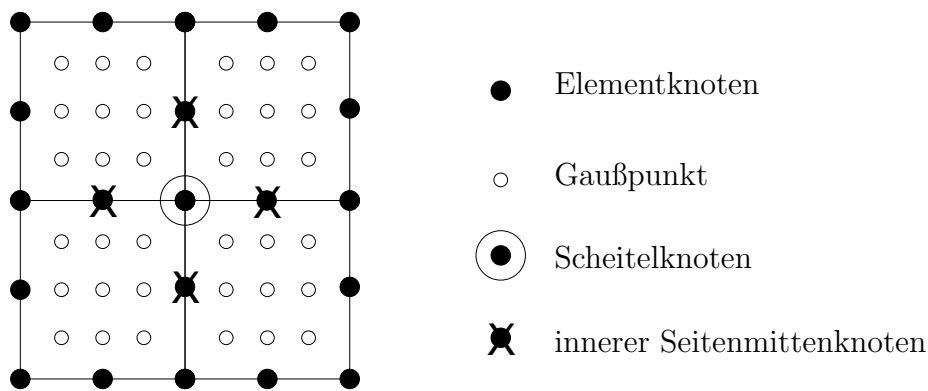


Abbildung 2.2: Patch für vollständig integrierte 8-Knoten-Elemente der Serendipity-Klasse in der inneren Netzregion. Anwendung eines eindeutigen Berechnungsschemas für den Scheitelknoten des Patches, Mittelwertbildung an den inneren Seitenmittenknoten, die auch zu den benachbarten (überlappenden) Patches gehören.

Ebenso wie bei der SPR-Methode wird angenommen, dass die Knotenwerte  $\bar{\mathbf{y}}^*$  einer beliebigen Feldvariable mit einem Polynom approximiert werden können, das die gleiche Ordnung wie die Formfunktionen besitzt. Dieses Polynom ist für das betrachtete Teilgebiet definiert. Es gilt analog

$$y_{pj}^* = \mathbf{P}^T \mathbf{a}_j. \quad (2.13)$$

Für jede einzelne Variable bzw. Komponente wird in analoger Weise ein individueller Koeffizientenvektor mittels der Methode der kleinsten Quadrate berechnet:

$$\begin{aligned} F(\mathbf{a}_j) &= \sum_{i=1}^n (y_{hj}(x_i, y_i) - y_{pj}^*(x_i, y_i))^2 \\ &= \sum_{i=1}^n (y_{hj}(x_i, y_i) - \mathbf{P}^T(x_i, y_i) \mathbf{a}_j)^2 \rightarrow \text{Min} \end{aligned} \quad (2.14)$$

Der Koeffizientenvektor  $\mathbf{a}_j$  wird wiederum durch Lösung eines linearen Gleichungssystems äquivalent zu (2.11) ermittelt. Damit können die Knotenwerte beliebiger Feldgrößen durch Einfügen der entsprechenden Knotenkoordinaten in Gleichung (2.13) ermittelt werden. Es ist offensichtlich, dass für innerhalb des Teilgebietes liegende Seitenmittenknoten die Berechnung der Feldgrößen mehrfach (im vorliegenden Fall zweimal) erfolgt. In diesen Knoten wird der Mittelwert aus den einzelnen Berechnungen gebildet.

Schließlich soll erwähnt werden, dass die patchorientierte Übertragungsmethode zu geglätteten Verläufen der Feldvariablen führt (einheitliche, elementunabhängige Werte in den Knoten). Damit ist das Berechnen von Kantensprüngen als Anteil des residualen Fehlerschätzers (vgl. Gleichung (2.15)) mit dieser Methode nicht möglich (siehe [BGK05]). Folglich wird bei der Fehlerschätzung im patchorientierten Transfer dieser Anteil vernachlässigt.

### Zusätzliche Lösung des Anfangswertproblems in den Elementknoten

In [OQ91, PHDO96] werden einige Anforderungen an zweckmäßige Transferalgorithmen formuliert:

1. Die Übertragung der Zustandsvariablen soll mit dem Verschiebungsfeld des neuen Netzes kompatibel sein.
2. Die Übertragung soll konsistent zum konstitutiven Algorithmus durchgeführt werden.
3. Der Transfer soll in die Gleichgewichtssiterationen eingebunden sein.
4. Sich entwickelnde Randbedingungen sollen vom Übertragungsalgorithmus nicht beeinflusst werden.
5. Der numerische Approximationsfehler soll minimiert werden.

Lokale und globale Übertragungsalgorithmen, die auf den Werten der Feldvariablen in den Gaußpunkten basieren, sind durch den gewählten Polynomgrad der Approximationsfunktion beschränkt. Selbst wenn diese Beziehungen konsistent zu der benutzten FE-Approximation sind, bleiben die in den vorangegangenen Abschnitten präsentierten Übertragungsmethoden Interpolationen mit den bekannten numerischen Einschränkungen.

Um insbesondere den ersten beiden der genannten Forderungen besser zu entsprechen, wird die zusätzliche Lösung des Anfangswertproblems in den Elementknoten als eine alternative Vorgehensweise für die Übertragung der Feldgrößen vorgeschlagen. Im Gegensatz zu den meisten aus der Literatur bekannten FE Anwendungen wird in dem hier entwickelten Programm SPC-PM2AdNI das Anfangswertproblem nicht nur in den Gaußpunkten, sondern auch in den Elementknoten gelöst. Damit sind alle Feldgrößen sowohl in den Gaußpunkten als auch in den Knoten vorhanden. Das bedeutet außerdem, dass die Feldgrößen in den Knoten mit der gleichen Genauigkeit berechnet werden wie in den Gaußpunkten – unabhängig von der Ordnung der FE Approximation (siehe auch [BGK05]).

Bei finiter Elastoplastizität existiert keine explizite Spannungs-Dehnungsbeziehung. Vielmehr liegt das Materialgesetz in Form eines Algebro-Differenzialgleichungssystems (DAE) vor. Für seine numerische Lösung muss es nach der Zeit diskretisiert werden. Nach Anwenden eines Einzschrittdiskretisierungsschemas (z.B. Euler, Crank-Nicolson) zur Lösung von Differenzialgleichungen wird ein nichtlineares algebraisches Gleichungssystem erhalten, welches mit dem Newton-Verfahren gelöst wird. Für weitere Details wird auf [Buch01b, BGK04] verwiesen.

Nach der Übertragung der Feldvariablen auf das neue Netz sind in der Regel die Gleichgewichtsbedingungen verletzt. Das gilt auch für die hier vorgestellte Übertragungsmethode, da der Transfer von den Knoten hin zu den Gaußpunkten des neuen Netzes allein über die Formfunktionen erfolgt. Darüber hinaus muss die Erfüllung der Fließbedingung für plastische Belastungszustände an allen Integrationspunkten durch geeignete und konsistente numerische Algorithmen sichergestellt werden. Bei element- bzw. patchbezogenen Übertragungsmethoden erfolgt der Transfer der Feldgrößen unabhängig voneinander. Im Gegensatz zur Methode der zusätzlichen Lösung des Anfangswertproblems in den Knoten ist hier die physikalische Konsistenz der neu berechneten Knotenwerte, z.B. die Erfüllung der Fließbedingung, nicht gewährleistet. Deswegen ist es erforderlich, Nachiterationen anzufügen, damit das Gleichgewicht wieder hergestellt werden kann.

Da bei FE-Approximationen, abgesehen von einigen speziellen Formulierungen, nur das Verschiebungsfeld kontinuierlich über die Elementgrenzen ist, führt die hier vorgestellte Übertragungsmethode zu unterschiedlichen Werten ein und derselben Feldvariable an einem Knoten, der zu unterschiedlichen Elementen gehört. Der in [BGK05] vorgestellte adaptive Algorithmus basiert aber genau auf diesen ungeglätteten Daten. Die unterschiedlichen Werte stellen eine konsistente Grundlage für anschließende Iterationen zur Lösung des Anfangs-Randwertproblems dar. Außerdem werden die unterschiedlichen Werte an den Seitenmittenknoten für die Berechnung des Kantensprungs bei der Fehlerschätzung verwendet (2.15).



## Fehlerschätzung bei nichtlinearen Problemen

Im Teilprojekt A3 wurden unterschiedliche Fehlerschätzer entwickelt und getestet. Im Rahmen der linearen Elastizität wurde dabei insbesondere der residuale a posteriori Energienorm-Fehlerschätzer untersucht:

$$\eta_T^2 \approx \frac{h_T^2}{\lambda_D} \int_{\Omega_T} |\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h) + \mathbf{f}_h|^2 d\Omega_T + \sum_{E \in \partial\Omega_T} \frac{h_T}{\lambda_D} \int_E |[\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h) \mathbf{n}_E]|^2 ds_E \quad (2.15)$$

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 linearen Elementen. Bei Elementansätzen höherer Ordnung und großen elastisch-plastischen Verzerrungen ergibt sich die Notwendigkeit, beide Anteile des Fehlerschätzers zu berücksichtigen.

In der linearen Elastizität wird die materialabhängige Konstante  $\lambda_D$  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  $\lambda_D$  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  $\lambda_D$  der Fehler für plastifizierte Elemente unterschätzt. Ausgleichend dazu wurde deshalb zusätzlich ein Fehlerindikator  $\eta_{KT}$  bezüglich der Erfüllung der Fließbedingung implementiert.

### 2.3.4 Adaptive Algorithmen zur Steuerung und Simulation der Ausbreitung von Schädigungszonen

Die Geschichte der Schädigungsmechanik beginnt mit den Arbeiten von Kachanov [Kacha58] und Rabotnov [Rabo59] in den 50-iger Jahren. Die darauf folgende Zeit war vor allen Dingen von der Entwicklung dieser Modelle auf der Ebene der Materialgleichungen gekennzeichnet, ohne die dazu notwendigen Randwertaufgaben, die die zu bewertenden konkreten inhomogenen Spannungszustände erzeugen können, zu lösen. So entstanden eine ganze Reihe von Modellen, die das konstitutive Verhalten bis hin zum duktilen Bruch erfassen. Zur Beschreibung der dabei auftretenden komplizierten Phänomene (Bildung, Wachstums und Vereinigung mikroskopischer Hohlräume) war es notwendig, auf unterschiedlichen Niveauebenen zu arbeiten. Das sind nach Thomason [Thoma90] und Needleman [Needl00]:

1. das mikroskopische metallphysikalische Niveau der Theorie der Versetzungen,
2. das mesoskopische Niveau, auf dem der konkrete Schädigungsmechanismus in der Mikrostruktur bis zum Bruchversagen modelliert wird,

### 3. das makroskopische Niveau der Kontinuumstheorie.

Erst in den 70-iger und 80-iger Jahren konnten infolge der rasanten Entwicklung der Computertechnik auch die dazugehörigen Randwertaufgaben des Makroniveaus gelöst werden. So resultierten aus der Forschung der vergangenen Jahre verschiedene schädigungsmechanische Modelle für die Beschreibung des duktilen Versagens metallischer Werkstoffe, die numerisch durchgerechnet wurden. Dies geschah auch mit dem Ziel, um in inverser Aufgabenstellung auf die zu verwendenden Materialparameter zu schließen. Das vorangige Anwendungsgebiet der applikativen Schädigungsmechanik war auf die Verbesserung der klassischen zähbruchmechanischen Konzepte zur stabilen Rissausbreitung gerichtet, womit auch erste Erfahrungen zur Bestimmung von Schädigungsparametern gesammelt wurden. Allerdings wies z.B. der Vergleich unterschiedlicher FEM-Codes und Strategien zur Parameteridentifikation auf eine noch nicht zufriedenstellende Situation [BeBo99] hin.

Am bekanntesten sind die Modelle von Gurson-Tvergaard-Needleman [Gurs77] und Rousselier [Rouss01], die die Entstehung, das Wachstum und die Koaleszenz von Mikroporen bis zur makroskopischen Anrissbildung als Folge der plastischen Verformung und Spannungsmehrachsigkeit beschreiben. Eine Verwendung der iterativ-adaptiven Lösungstechnik für schädigungsmechanische Problemstellungen ist hierbei bisher nur in wenigen Publikationen (siehe z. B. [Gel98]) zu finden. In der verfügbaren Literatur handelt es sich dabei um das übliche Remeshing nach großen Netzverzerrungen ( z.B. bei Massivumformung). Deshalb ist es sehr notwendig, die modernen iterativ-adaptiven Löser für diese wichtigen Problemstellungen weiter zu entwickeln.

Da die beiden oben genannten Schädigungsmodelle im vorigen Antragszeitraum in SPC-PMHP implementiert wurden und die Struktur der Materialgleichungen mit derjenigen der Elasto-Plasto-Mechanik analog ist, konnten die dafür im Teilprojekt entwickelten adaptiven Techniken 2.3.3 - 2.3.5 sinngemäß übernommen und effektiv angewandt werden. Mit dieser Implementierung ist es nun 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. 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]. Vom Standpunkt der Kontinuumsmechanik und Numerik ist es somit notwendig, beim Erreichen des lokalen Versagens in einem Materialpunkt vor der Rissspitze, das z. B. durch die Indefinitheit des akustischen Tensors angezeigt wird, den Bruchprozess durch Trennung des Kontinuums numerisch stabil zu gestalten. Dafür bieten sich die in 2.3.1 erarbeiteten Algorithmen zur Elementteilung und Kantenverdopplung an. Mit der Realisierung dieser Aufgaben wurde in der Auslaufphase 2004/2005 begonnen.

**Literaturverzeichnis zu 2.3**

- [AO00] M. Ainsworth, J. Oden. A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis. J. Wiley & Sons, New York, 2000.
- [Ak05] J.E. Akin Finite Element Analysis with Error Estimation. Pre-publication draft, <http://www.owl.net.rice.edu/~mech517/>, 2005.
- [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.
- [BSUGC94] I. Babuška, T. Strouboulis, C.S. Upadhyay, S. Gangaraj, K. Copps. Validation of a posteriori error estimators by numerical approach. *Int. J. Num. Meth. Engng.* 15:1073-1123, 1994.
- [BS01] I. Babuška, T. Strouboulis. The Finite Element Method and its Reliability. The Clarendon Press, Oxford University Press, 2001
- [BB99] T. Belytschko and T. Black. Modelling of damage in metal forming processes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 45:601–620, 1999.
- [BB94a] T. Belytschko, T.D. Blacker. Enhanced derivative recovery through least square residual penalty. *Appl. Num. Math.* 14:55-68, 1994.
- [BeBo99] G. Bernauer and W. Brocks. Numerical round robin on micro-mechanical models: Conclusions of part A. *Technical report, ESIS TC8 Meeting Trondheim, 1999.*
- [BB94b] T.D. Blacker, T. Belytschko. Superconvergent patch recovery with equilibrium and conjoint interpolant enhancements. *Int. J. Num. Meth. Engng.* 37:517-536, 1994.
- [BZ97b] B. Boroomand, O.C. Zienkiewicz. An improved REP recovery and the effectivity robustness test. *Int. J. Num. Meth. Engng.* 40:3247-3277, 1997.
- [BZ99] B. Boroomand, O.C. Zienkiewicz. Recovery procedures in error estimation and adaptivity, part II: adaptivity in nonlinear problems of elasto-plasticity behaviour. *Comput. Method. Appl. Mech. Engrg.* 176:127-146, 1999.
- [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.
- [BGK04] A. Bucher, U.-J. Görke and R. Kreißig. A material model for finite elasto-plastic deformations considering a substructure. *Int. J. Plast.* 20:619-642, 2004.
- [BGK05] A. Bucher, A. Meyer, U.-J. Görke, R. Kreißig. A contribution to error estimation and mapping algorithms for a hierarchical adaptive FE-strategy in finite elastoplasticity. *Comput Mech* 36:182-195, 2005.
- [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.
- [CF99] C. Carstensen, S. Funken. Averaging technique for FE-a posteriori error control in elasticity. Part I: Conforming FEM. Technical Report 99-14, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Berichtsreihe des Mathematischen Seminars Kiel, 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.
- [CA03] C. Carstensen, J. Albery. Averaging techniques for reliable a posteriori FE-error control in elastoplasticity with hardening. *Comput. Method. Appl. Mech. Engrg.* 192:1435-1450, 2003.
- [Car04] C. Carstensen. Some remarks on the history and future of averaging techniques in a posteriori finite element error analysis. *ZAMM - Z. Angew. Math. Mech.* 84:3-21, 2004.
- [Chris99] P.W. Christensen and A. Klarbring. *Newton's method for frictional contact problems*, ECCM, 1999.
- [CRSW99] H. Cramer, M. Rudolph, G. Steinl, W. Wunderlich. A hierarchical adaptive finite element strategy for elastic-plastic problems. *Comput. Struct.* 73:61-72, 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.
- [ERBM98] R.A. Einfeld, D. Roehl, T.N. Bittencourt, L.F. Martha. Mapping of Local Variables Due to Remeshing in Non-linear Plasticity Fracture Problems. In: *Computational Mechanics. New Trends and Applications*, Idelsohn, S., Oñate, Dvorkin, E. (eds), (CIMNE, Barcelona), 1998.
- [FC95] L. Fourment, J.L. Chenot. Error estimators for viscoplastic materials. Application to forming processes. *Int. J. Num. Meth. Engng.* 38:469-490, 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.
- [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.
- [Gel98] J.C. Gelin Modelling of damage in metal forming processes. *Journal of Materials Processing Technology*, 80/81:24–32, 1998.
- [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.

- [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.
- [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.
- [GZH04] H. Gu, Z. Zong, K:C: Hung. A modified superconvergent patch recovery method and its application to large deformation problems. *Finite. Elem. Anal. Des.* 40:665-687, 2004.
- [Gurs77] A.L. Gurson. Continuum theorie of ductile rupture by void nucleation and growth: Part I-Yield criteria and flow rule for porous ductile media *Journal of Materials and Technology, Processing Technology*, 80/81:24–32, 1998.
- [Gwin83] J. Gwinner. A penalty approximation for a unilateral contact problem in nonlinear elasticity. *Math. Meth. Appl. Sci.*, 11/83:447–458, 1983.
- [Hasl83] J. Haslinger. Approximation of the Signorini problem with friction obeying the Coulomb law. *Math. Meth. Appl. Sci.*, 5/83:422–437, 1983.
- [HC74] E. Hinton, J.S. Campbell. Local and global smoothing of discontinuous finite element functions using least squares. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 8:461-480, 1974
- [Hues94] A. Huesmann and G. Kuhn. Behandlung elastoplastischer Kontaktprobleme mit der Randelementmethode. *ZAMM*, 74/94:T254–T256, 1994.
- [JK03] J. Jackewicz and M. Kuna. Non-local regularisation for FE simulation of damage in ductile materials. *Computational Material Science*, 28/03:684–695, 2003.
- [Kacha58] L.M. Kachanov. About Fracture Time under Creep Conditions (in Russisch). *Isvestija AN SSSR, OTN*, 1958, 8, pp. 26–31.
- [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.
- [Kara89] G. Karami. *Boundary Element Methods for Two Dimensional Contact Problems*. Springer, New York/Berlin/Heidelberg, 1989.
- [Kiku88] N. Kikuchi and J.T. Oden. *Contact Problems in Elasticity: A Study of Variational Inequalities and Finite Element Methods*. SIAM, Philadelphia, 1988.
- [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.

- [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.
- [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.
- [KN87] M. Křížek, P. Neittaanmäki. On Superconvergence Techniques. *Acta Appl. Math.* 9:175-198, 1987.
- [LPL97] T. Lee, H.C. Park, S.W. Lee. A superconvergent stress recovery technique with equilibrium constraint. *Int. J. Num. Meth. Engng.* 40:1139-1160, 1997.
- [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: *Engineering Computational Technology*, B.H.V. Topping and Z. Bittnar (Eds.), Saxe-Coburg Publ., Stirling, Scotland, 147–165, 2002.
- [MRS04] A. Meyer, F. Rabold and M. Scherzer. Efficient Finite Element Simulation of Crack Propagation. Preprint SFB393/04–01, TU Chemnitz, 2004.
- [MM98] D. Michael and M. Meisel. Some remarks to large deformation elasto-plasticity (continuum formulation). TU Chemnitz-Zwickau, Preprint SFB393/98–28, 1998.
- [MS01] D. Michael and M. Springmann. Zur numerischen Simulation des Versagens duktiler metallischer Werkstoffe. Preprint SFB393/09–01, 2001.
- [Mich01] D. Michael. Kontinuumstheoretische Grundlagen und algorithmische Behandlung von ausgewählten Problemen der assoziierten Fließtheorie. TU Chemnitz, Preprint SFB393/01–06, 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.
- [Need100] A. Needleman. Computational mechanics at the mesoscale. *Acta Materialia*, 48(1):105–124, 2000.
- [OB71] J.T. Oden, H.J. Brauchli. On the calculation of consistent stress distributions in finite element approximations. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 3:317-325, 1971.
- [OQ91] M. Ortiz, J.J. Quigley. Adaptive mesh refinement in strain localization problems. *Comput. Method Appl. Mech. Engrg.* 90:781-804, 1991.
- [PHDO96] D. Perić, D. Hochard, M. Dutko, D.R.J. Owen. Transfer operators for evolving meshes in small strain elasto-plasticity. *Comput Method Appl Mech Engrg* 137:331-344, 1996.

- [Rabo59] I.N. Rabotnov. Mechanism of Longtime Fracture (in Russisch). *Questions of Strength of Materials and Structures (in Russisch)*, Isdatelstvo AN SSSR, Moskva, 1959A.
- [Reu03] F. Reusch. *Entwicklung und Anwendung eines nicht-lokalen Materialmodells zur Simulation duktiler Schädigung in metallischen Werkstoffen*. Dissertation, Universität Dortmund, 2003.
- [Rouss01] G. Rousselier. Dissipation in porous metal plasticity and ductile fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(8):1727–1746, 2001.
- [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.
- [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.
- [Thoma90] P. Thomason. *Ductile Fracture of Metals*. Pergamon, Oxford, 1990.
- [UR75] V. Ulbricht, H. Röhle. Berechnung von Rotationsschalen bei nichtlinearem Deformationsverhalten, PhD thesis, TU Dresden, 1975.
- [Ver95] R. Verfürth. A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh-refinement techniques. J. Wiley & Sons, Chichester, 1995.
- [Wah95] L. Wahlbin. Superconvergence in Galerkin Finite Element Methods. Lecture Notes in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin, 1995.
- [WA93] N.-E. Wiberg, F. Abdulwahab. Patch recovery based on superconvergent derivatives and equilibrium. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 36:2703-2724,1993.
- [WAZ94] N.-E. Wiberg, F. Abdulwahab, S. Ziukas. Enhanced superconvergent patch recovery incorporating equilibrium and boundary conditions. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 37:3417-3440, 1993.
- [WL94] N.-E. Wiberg, X.D. Li. Superconvergent patch recovery based on finite element solution and a posteriori  $l_2$  norm error estimate. *Comm. Appl. Num. Meth.* 10:312-320, 1994.
- [WZ98] N.-E. Wiberg, S. Ziukas. Zienkiewicz-Zhu Error Estimator – A Future Vision. In: Computational Mechanics. New Trends and Applications, Idelsohn, S., Oñate, Dvorkin, E. (eds), (CIMNE, Barcelona), 1998.
- [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.
- [ZZ87] O.C. Zienkiewicz, J.Z. Zhu. A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 24:337-357, 1987.
- [ZZ92a] O.C. Zienkiewicz, J.Z. Zhu. The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. Part 1: The recovery technique. *Int. J. Num. Meth. Engng.* 33:1331-1364, 1992.
- [ZZ92b] O.C. Zienkiewicz, J.Z. Zhu. The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. Part 2: Error estimates and adaptivity. *Int. J. Num. Meth. Engng.* 33:1365-1382, 1992.
- [ZZ92c] O.C. Zienkiewicz, J.Z. Zhu. The superconvergent patch recovery and adaptive finite element refinement. *Comput. Method. Appl. Mech. Engng.* 101:207-224, 1992.
- [ZZW93] O.C. Zienkiewicz, J.Z. Zhu, J. Wu. Superconvergent patch recovery techniques – some further tests. *Comm. App. Num. Meth.* 9:251-258, 1993.

## 2.4 Ergebnisse

### 2.4.1 Verbesserung des iterativen Löses für Rissausbreitungssimulationen

Im vergangenen Bearbeitungszeitraum wurde ein iterativer Löser entwickelt, der die hierarchische Datenstruktur bei Rissfortschritt nicht zerstört. Nach der bruchmechanisch bestimmten Information über ein notwendiges Risswachstum mit vorgegebenem Inkrement und vorgegebener Richtung wird das vorhandene Netz mit einem minimalen Aufwand geändert, so dass iterativ-hierarchische Lösungstechnik nur geringfügig “behindert” wird. Eine “klassische” Dopplung von Kanten und Knoten entlang der neuen Rissufer wird nicht vorgenommen, damit ein effizienter Vorkonditionierer die Kantenbaum-Informationen verwerten kann. Um dies zu realisieren, wurde mit Hilfe von Projektionstechniken ein einfacher Preconditioner erstellt, der auf einer Mittelung bezüglich zwei verschiedener Kantensysteme des Netzes basiert [MRS04, MRS05]. Der einzige Nachteil dieses Vorkonditionierers besteht in der fehlenden Spektraläquivalenz, womit noch relativ hohe Iterationszahlen erzeugt wurden. Deshalb wurde ein neuer effektiverer Vorkonditionierer entwickelt. Die entscheidenden Charakteristika des dabei entstandenen Löses werden im folgenden Abschnitt erläutert.

Die wesentliche Verbesserung resultiert aus folgender Beobachtung. Mit Einführung von  $d$  “Doppelknoten” entlang des gewachsenen Risses benutzt man also folgende  $(n + d + d)$  Finite-Elemente-Ansatzfunktionen

$$\Phi = (\varphi_1, \dots, \varphi_n, \varphi_{n+1}^-, \dots, \varphi_{n+d}^-, \varphi_{n+1}^+, \dots, \varphi_{n+d}^+),$$

die die aktuelle Steifigkeitsmatrix erzeugen, für die der effiziente Löser gesucht ist. Hierbei sind die ersten  $n$  Funktionen klassische FEM-Hütchenfunktionen. Die restlichen  $d$  “halbe” Hütchen mit Träger auf einer Seite des Risses und nochmal  $d$  solche Funktionen



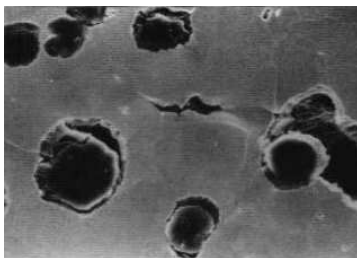


Abbildung 2.3: Einschlüsse in GGG40

mit Träger auf der anderen Seite. Eine einfache Basistransformation (nämlich Addition / Subtraktion dieser halben Hütchenfunktionen zu üblichen und zu Spungfunktionen über den Riss hinweg) führt zu:

$$\tilde{\Phi} = (\varphi_1, \dots, \varphi_n, \varphi_{n+1}, \dots, \varphi_{n+d}, \tilde{\varphi}_{n+1}, \dots, \tilde{\varphi}_{n+d}).$$

Die hierzu gehörige neue Steifigkeitsmatrix  $\tilde{K}$  hat eine Blockstruktur, die gut zur DD-Vorkonditionierung genutzt werden kann:

$$\tilde{K} = \begin{pmatrix} A & B \\ B^T & T \end{pmatrix}$$

Der Block  $A$  (aus den ersten  $n + d$  Ansatzfunktionen entstanden) ist die Steifigkeitsmatrix zum gewöhnlichen Deformationsproblem ohne jeden Riss, für die die existierenden Kanteninformationen den effizienten hierarchischen Vorkonditionierer bereitstellen. Der Restblock  $T$  ist bei 1-dimensionalen Anordnungen der Rissknoten gerade eine 5-diagonale Matrix, also effizient mit direkten Lösern zu behandeln. Die Zusammenhänge sind im einzelnen im Preprint [Mey05] geschildert, der in veränderter Form auch Eingang in einen Springer-Sammelband zu Ergebnissen des SFB393 finden wird.

## 2.4.2 Anwendung adaptiver Algorithmen zur Simulation der Rissausbreitung

Duktiler Materialversagen vor Risspitzen in Metallen ist oft verbunden mit Voidwachstums- und Voidvereinigungsprozessen, die schließlich zu einem makroskopischen Rissfortschritt führen können. Innerhalb der oben erwähnten Schädigungsmodelle werden diese Effekte auf dem Kontinuumsniveau mittels erweiterter Theorien der Plastizität beschrieben. Dabei können natürlich wirkliche geometrische Voids nicht modelliert werden, sondern sie finden im Mittel Berücksichtigung anhand kontinuierlicher Materialgleichungen. Der Einfluss von Voids und anderer Inhomogenitäten auf die Verhältnisse an Risspitzen ist deshalb anhand dieser Theorien auch nur als gemittelter Einfluss interpretierbar. Die wirkliche gegenseitige Beeinflussung von Risspitzen und Voids, die auf dem Meso-Niveau von Metallen (siehe Bild 2.3 für GGG40) mit Risspitzen wechselwirken, ist nur durch eine genaue geometrische Modellierung möglich. Eine Variante, dieses Verhalten zu charakterisieren, soll im folgenden Abschnitt anhand einfacher linear-elastischer Annahmen dargestellt werden. Die Berechnungen wurden im Rahmen einer Studienarbeit [Schwa05] durchgeführt.

### Modellprobe zur Abschätzung des Einflusses von Einschlüssen/Voids (Hohlräume) auf das Risswachstum

Zur Simulation des Risswachstums wurde ein Grundmodell erstellt, welches durch verschiedene Parameter beschrieben wird. Allen verwendeten Modellen gleich sind die Außenabmessungen, die horizontal zentral gelegene Störung konstanten Durchmessers sowie die äußere Belastung. Sie wird durch eine Verschiebung  $u$  der Außenkanten, wie in Abbildung 2.4 dargestellt, aufgebracht, wobei deren Größe keinen Einfluss auf den Verlauf der Rissfront hat. Des Weiteren sind die Materialdaten des ferritischen Matrixgefüges ( $E = 2,1 \cdot 10^5 \frac{N}{mm^2}$  und  $\nu = 0,3$ ) für jede Berechnung dieselben. Zur Anwendung kamen die üblichen quadratischen Dreieckselemente. Um die Auswirkungen auf den Rissfortschritt zu untersuchen, wurde der Materialeinschluss einerseits im Abstand zum Ligament, andererseits in seiner Art der Modellierung variiert. Zum Einsatz kamen dabei zwei Varianten:

- a) Der Einschluss wurde als Hohlraum modelliert, also als spannungsfreie Oberfläche und
- b) in Form eines anderen Materials (z.B. Graphitteilchen), welches fest mit der Matrix verbunden ist.

Während der Hohlraum im ersten Fall einen Einschluss wiedergibt, der keine Verbindung zum umliegenden Material hat, konnte durch Wahl eines extrem hohen Elastizitätsmoduls für den Einschluss im zweiten Fall eine fast starre Oberfläche simuliert werden.

Der Abstand  $b$  des Einschlusses zum Ligament wurde in Schritten von  $0,5 LE^4$  von anfangs  $5 LE$  solange verringert, bis der Riss den Einschluss berührte.

Zum Vergleich wurden einige Modelle zusätzlich mit einer Rissverlängerung von  $\Delta a = 2 LE$  gerechnet. Standardmäßig vorgesehen war ein Wert von  $\Delta a = 0,5 LE$ . Dieser ergab sich aus mehreren Versuchen mit unterschiedlichen Rissverlängerungslängen und stellt ein gutes Verhältnis zwischen Rechenzeit und Genauigkeit dar. Untersuchungen bei kleineren Rissfortschritten warfen dagegen bei gleichem Rissverlauf große Schwierigkeiten bei der Stabilität der Berechnungen auf<sup>5</sup>. Größere Schrittweiten hatten zur Folge, dass der Rissverlauf, insbesondere in der Nähe des Einschlusses, eine sehr „kantige“ Form mit verhältnismäßig starken Winkeländerungen annahm. Die Simulation ist hier zu träge, um die starken Spannungs- und Dehnungsgradienten korrekt zu erfassen. Im Folgenden sollen die berechneten Rissverläufe der verschiedenen Modelle miteinander verglichen werden. Die Ergebnisse geben Aufschluss über den Einfluss der Einschlüsse auf den Risspfad.

#### Ergebnisse der Berechnungen mit Hohlraum

Zuerst werden die Risstrajektorien der Modelle mit Hohlraum angeführt. Die resultierenden Kurven repräsentieren den Verlauf der Rissfront während des Wachstums. Die

<sup>4</sup>LE=1mm

<sup>5</sup> Bei  $\Delta a = 0,25 LE$  brach die Simulation nach einigen Schritten ab. Die sich ergebenden Risspitzenkoordinaten stimmten mit denen der Standardrechnung unter Berücksichtigung numerischer Ungenauigkeiten überein.

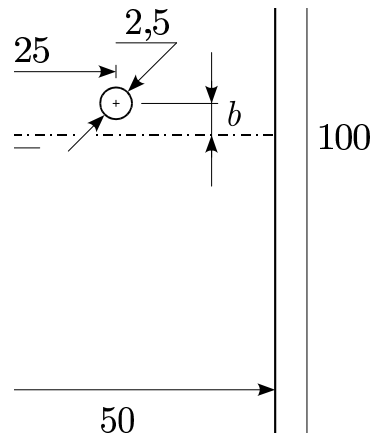


Abbildung 2.4: Grundmodell

Störungen sind maßstabsgetreu in den Diagrammen eingezeichnet. Ein Pfeil markiert die vertikale Lage des Einschlusses.

Wie in den Abbildungen 2.5 zu sehen ist, bewirkt ein Hohlraum in der Nähe der Risspitze, dass diese in Richtung der Störung wandert. Je kleiner der Abstand des Einschlusses zum Ligament des Ausgangsrisses (durch eine horizontale Linie gekennzeichnet) wird, desto stärker ist die Ablenkung des Risses. Interessant ist, dass sich der Riss hinter dem Lochmittelpunkt, d.h. ab einem Winkel von  $\varphi \approx 120^\circ$  nach unten krümmt. Wächst der Riss weiter, verliert die Störung an Einfluss auf dessen Richtung, wodurch ein zum Ligament paralleler Verlauf zustande kommt. Liegt der Hohlraum zu nahe am Riss, dringt er in diesen ein. Der kritische Abstand beträgt bei den vorliegenden Berechnungen  $4,0 \text{ LE} < b < 4,5 \text{ LE}$ . Wegen der maßstäblichen Darstellung der Rissverläufe sind kleinere Details nur schwer zu erkennen. Es lässt sich jedoch anhand der Rissspitzenkoordinaten nachweisen, dass anfangs eine Auslenkung der Rissfront in die vom Hohlraum abgewandte Richtung erfolgt. Für kleinere Abstände  $b$  verstärkt sich diese Erscheinung, so dass sie im Diagramm zu  $b = 2,5 \text{ LE}$  doch recht gut zu erkennen ist. Es wurden zusätzliche Berechnungen mit verschiedenen Randbedingungen durchgeführt. Dabei kam das Grundmodell ( $b = 4,5 \text{ LE}$ ) mit den folgenden Modifikationen zum Einsatz:

- unverändertes Referenzmodell
- nach rechts verbreitertes Modell
- festgehaltene rechte Kante
- festgehaltene rechte und linke Kante.

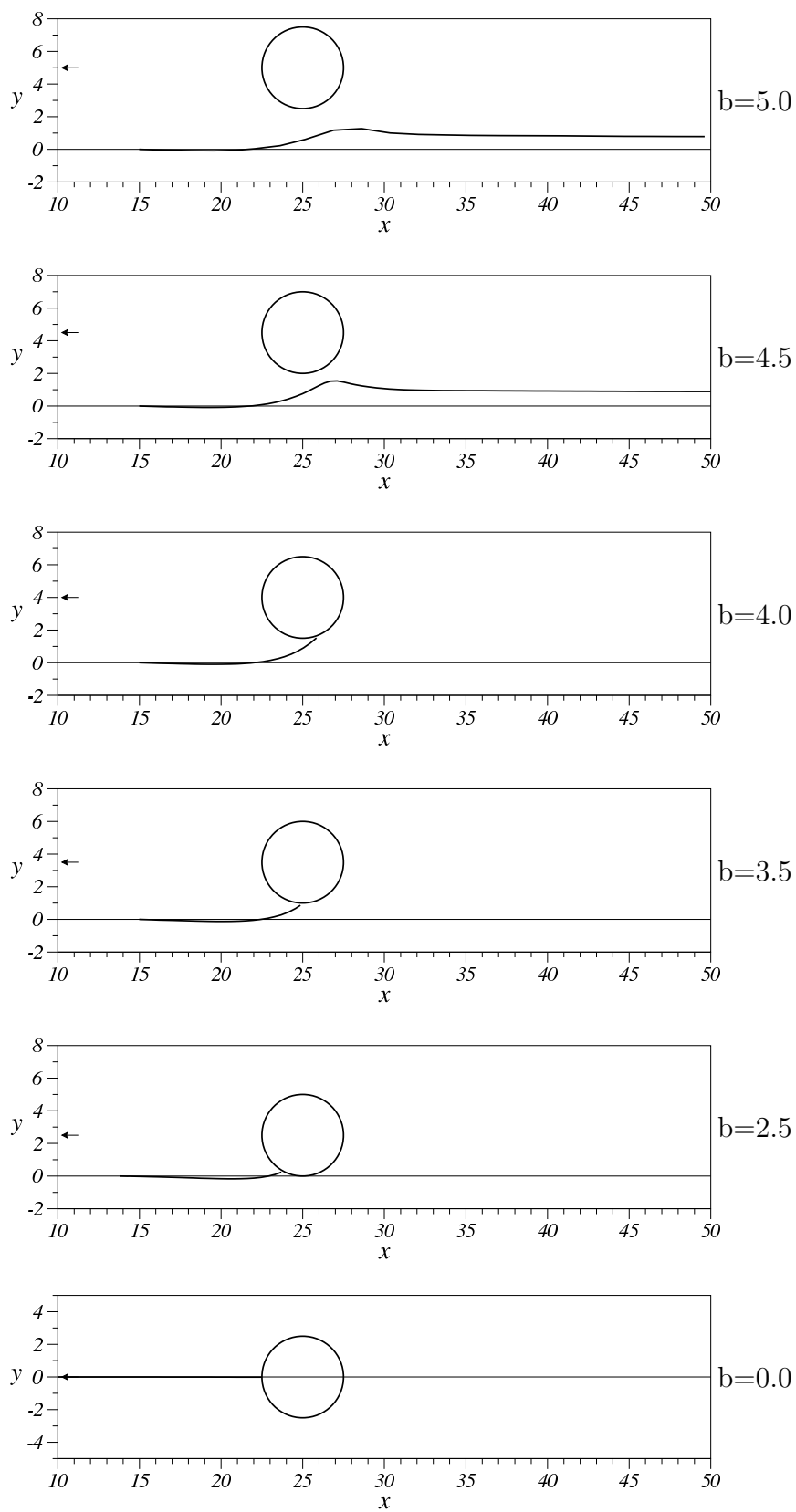


Abbildung 2.5: Risstrajektorien der Modelle mit Hohlraum

Die berechneten Rissverläufe unterscheiden sich bisweilen sehr stark. Die Abbildung 2.6 zeigt den Vergleich verschiedener Risstrajektorien, die auf die verschiedenen Randbedingungen zurückzuführen sind.

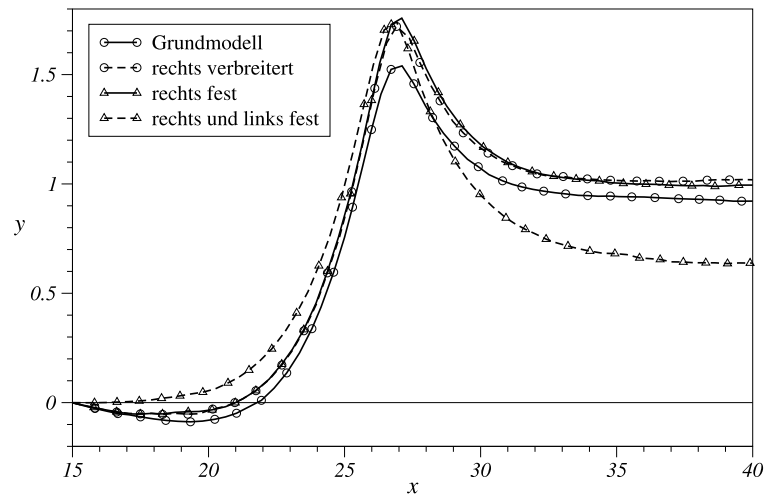


Abbildung 2.6: Vergleich der Risstrajektorien bei unterschiedlichen Randbedingungen

Es fällt besonders auf, dass kaum ein Unterschied zwischen dem Modell mit fester rechter Kante und der nach rechts verbreiterten (Gesamtbreite des Modells auf 100 LE verdoppelt) Variante besteht. Weitere Untersuchungen sind notwendig, um die Zusammenhänge zwischen Risswachstum und Hohlraumeinfluss aufzuklären.

### Ergebnisse der Berechnungen mit Materialeinschluss

Die durchgeführten Berechnungen bestätigen den intuitiv erwarteten Fakt, dass Risse von starren Einschlüssen eher abgestoßen werden als dass sie, wie z.B. beim Hohlraum, versuchen, die Oberfläche des Einschlusses zu durchdringen.

In den Simulationen wurde der Elastizitätsmodul des Einschlussmaterials auf den extrem hohen Wert von  $E = 1 \cdot 10^{10} \frac{N}{mm^2}$  gesetzt.  $\nu$  blieb unverändert bei 0,3. Mit einer festen Bindung zwischen den beiden Körpern war gewährleistet, dass sich der Einschluss wie ein starres Loch verhält. Die folgenden Diagramme (Abbildungen ??, 2.7) zeigen, wie stark sich der Riss um die Störung krümmt. Ein Eindringen des Risses in den Einschluss konnte nur für  $b < 1,5LE$  vorausgesagt werden. Die genaue Bestimmung des kritischen  $b$ -Wertes ist aus verständlichen Gründen mit der bisher entwickelten Software noch nicht realisierbar.

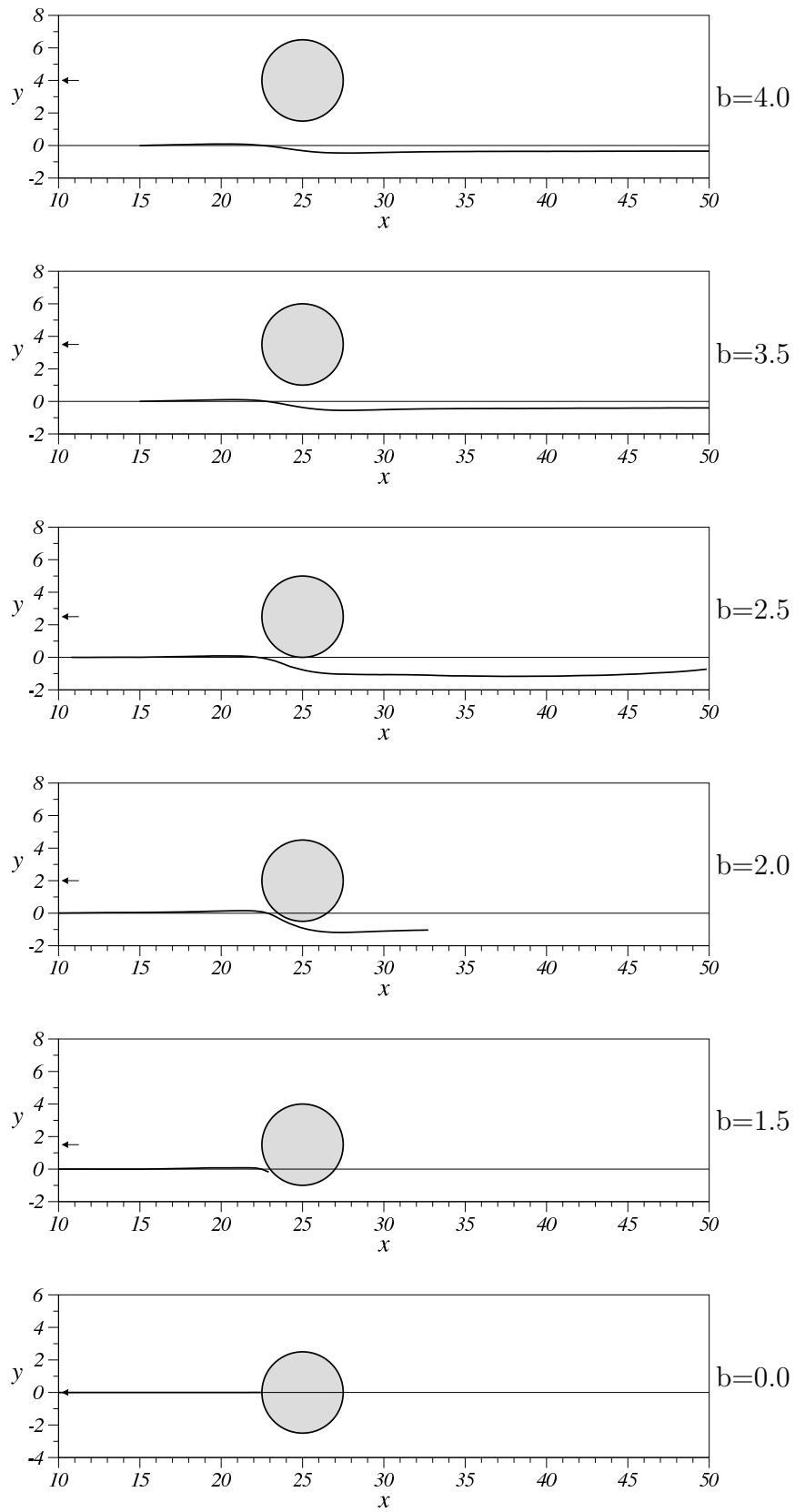


Abbildung 2.7: Risstrajektorien der Modelle mit hartem Materialeinschluss

### 2.4.3 Vergleich unterschiedlicher Algorithmen zur Übertragung von Zustandsgrößen bei adaptiver Netzverfeinerung

In diesem Abschnitt werden am Beispiel einer Scheibe mit Loch einige numerische Ergebnisse aus dem Vergleich der unterschiedlichen Übertragungsstrategien vorgestellt. Hierbei wird ein ebener Verzerrungszustand angenommen. Ausgehend von zwei unterschiedlichen Grobnetzen werden Berechnungen mit vollständig integrierten 8-Knoten-Elementen der Serendipity-Klasse durchgeführt. Die verwendeten Netze wie auch die aufgetragenen Randbedingungen sind in Bild 2.8 dargestellt.

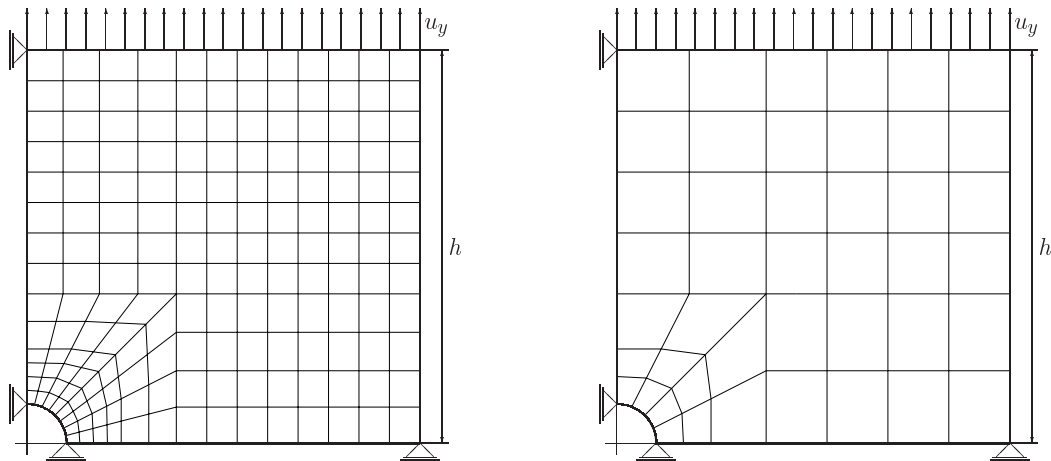


Abbildung 2.8: Scheibe mit Loch (ein Viertel der Scheibe). Randbedingungen. Grobnetze mit 44 und 176 Elementen. Kantenlänge  $h = 100$  mm, Radius der Bohrung 10 mm.

Bei Untersuchungen mit dem Fehlerschätzer  $\eta_T$  (vgl. (2.15)) wurde als äußere Belastung eine gleichmäßige Verschiebung des oberen Randes der Scheibe um  $0,5h$  aufgebracht, welche auf 1000 Lastschritte aufgeteilt wurde. Das entspricht Inkrementen von jeweils 0.05 Prozent je Lastschritt. Für Studien mit dem Fehlerindikator  $\eta_{KT}$  wurde die Scheibe nur um 20 Prozent ihrer Länge gedehnt, was jeweils einzelnen Lastschritten von 0.02 Prozent entspricht. Hier sei noch darauf hingewiesen, dass die automatische Lastschrittwertensteuerung zu kleineren Schrittweiten führen kann.

Das elastische Materialverhalten wird durch einen hyperelastischen Neo-Hooke-Ansatz beschrieben, welcher Kompressibilität berücksichtigt [Buch01b]. Hierbei lautet der Ansatz für den elastischen Anteil  $\psi_e$  der freien Helmholtz-Energiedichte  $\psi$ :

$$\psi_e = c_{10}(I - \ln III - 3) + D_2 (\ln III)^2 \quad (2.16)$$

Die Größen  $I$  und  $III$  bezeichnen die Invarianten des elastischen Verzerrungstensors. Unter Verwendung des Elastizitätsmoduls  $E = 2.1 \cdot 10^5$  MPa und der Querkontraktionszahl  $\nu = 0.3$  werden die Materialparameter  $c_{10}$  und  $D_2$  durch

$$c_{10} \approx \frac{E}{4(1 + \nu)}, \quad D_2 \approx \frac{c_{10}}{2} \frac{\nu}{1 - 2\nu} \quad (2.17)$$

angenähert.

Die Fließbedingung

$$F = (\dot{\mathbf{T}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}}) \mathbf{C} \cdot (\dot{\mathbf{T}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}}) \mathbf{C} - \frac{2}{3} T_F^2 = 0 \quad (2.18)$$

mit

$$\dot{\mathbf{T}} = \mathbf{T} - \frac{1}{3} (\mathbf{T} \cdot \mathbf{C}) \mathbf{C}^{-1}, \quad \dot{\boldsymbol{\alpha}} \text{ analog.} \quad (2.19)$$

entspricht bei kleinen Verzerrungen und  $\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \mathbf{0}$  dem von-Mises Ansatz. Für den Rückspannungstensor  $\boldsymbol{\alpha}$  wurde eine Evolutionsgleichung vom Prager-Typ angesetzt

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = c_1 \lambda \mathbf{C} (\dot{\mathbf{T}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}}) \mathbf{C} \quad (2.20)$$

während die Entwicklungsgleichung der Fließspannung auf einem Ansatz von Ulbricht und Röhle [UR75] basiert:

$$T_F = T_{F0} + a [(E_v^p + \beta)^n + \beta^n] \quad (2.21)$$

In den vorangegangenen Beziehungen bezeichnen  $\mathbf{C}$  den rechten Cauchy-Green Tensor,  $\mathbf{T}$  den zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor und  $E_v^p$  die plastische Bogenlänge.

Die in den Gleichungen (2.20) und (2.21) enthaltenen Materialparameter werden mit  $T_{F0} = 200$  MPa (Anfangsfließspannung),  $a = 1000$  MPa,  $n = 0.3$ ,  $\beta = 10^{-8}$  und  $c_1 = 500$  MPa angenommen. Mehr Details zum verwendeten Materialgesetz können in [Buch01b, BGK04, BGK05] nachgelesen werden.

Die folgenden Berechnungen wurden mit den im Abschnitt 2.3.3 vorgestellten Übertragungsalgorithmen durchgeführt. Dabei wurden die Untersuchungen bezüglich der erforderlichen Elementanzahl als auch der notwendigen Iterationen ausgewertet, welche als Indikatoren für den numerischen Aufwand sowie das Konvergenzverhalten der entsprechenden adaptiven Näherungslösung angesehen werden können.

Im ersten Lastschritt wird ein Vergleichsfehler bestimmt und nachfolgend das Netz so angepasst, dass der aktuelle Fehler höchstens 0.1 Prozent des Ausgangsfehlers beträgt. Für die Berechnungen mit den unterschiedlichen Übertragungsalgorithmen wurde aus Vergleichsgründen jeweils derselbe Referenzfehler verwendet.

Wie bereits erwähnt, besteht der Fehlerschätzer aus zwei Anteilen – der erste stellt das Elementresiduum dar, der zweite den Kantensprung. Das Elementresiduum wird bei allen betrachteten Übertragungsstrategien in der gleichen Art und Weise berechnet. Für den Kantensprung werden allerdings infolge der leicht unterschiedlichen Art der Berechnung der Variablen an den Seitenmittenknoten voneinander abweichende Werte erhalten. Beim patchorientierten Variablentransfer entfällt der Kantensprunganteil sogar vollständig, da hier geglättete Knotenwerte vorliegen.

In Abbildung 2.9 wird die Entwicklung der Elementanzahl in Abhängigkeit vom Übertragungsalgorithmus dargestellt. Es kann beobachtet werden, dass die Methode der zusätzlichen Lösung des Anfangswertproblems in den Elementknoten die kleinste Elementanzahl



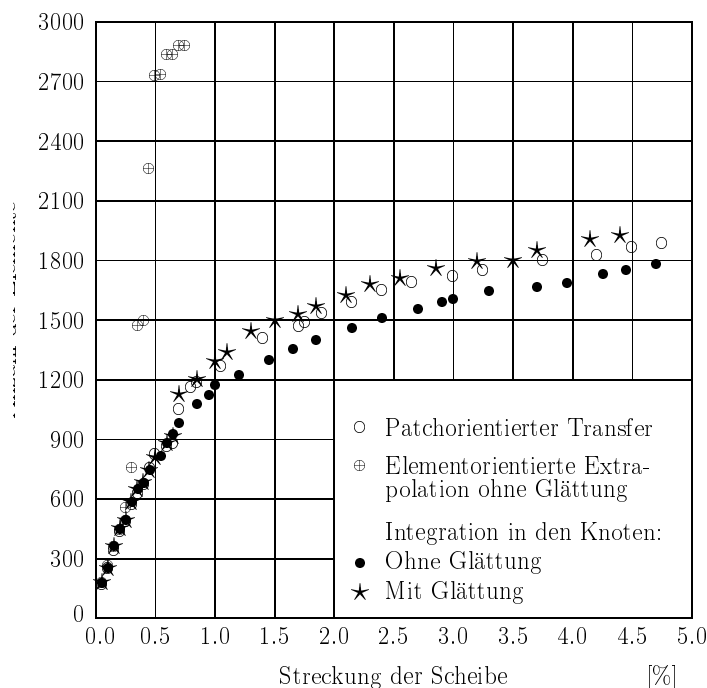


Abbildung 2.9: Scheibe mit Loch. Entwicklung der Elementanzahl in Abhängigkeit vom gewählten Übertragungsalgorithmus bei Verwendung des Fehlerschätzers  $\eta_T$ . Grobgitter mit 44 Elementen. Der elementorientierte Übertragungsalgorithmus wurde bei 1.2 % Dehnung abgebrochen.

erzeugt. Das bedeutet, dass mit dieser Vorgehensweise, verglichen mit anderen Strategien, geringere Fehlerwerte schon bei kleinerer Elementanzahl vorliegen.

Die patchorientierte Methode führt auf größere Elementzahlen, die jedoch noch kleiner sind, als wenn geglättete Knotenwerte im Zusammenhang mit der zusätzlichen Lösung des Anfangswertproblems verwendet werden. Hieraus kann geschlussfolgert werden, dass ein anschließendes Glätten der Knotenwerte, die durch die zusätzliche Lösung des Anfangswertproblems in den Elementknoten erzeugt wurden, die numerische Effizienz beeinträchtigt.

Es kann angemerkt werden, dass die elementorientierte Übertragungsmethode nicht für das diskutierte Beispiel geeignet erscheint, da hier größere Konvergenzprobleme auftreten. Bei einer Dehnung von 1.2 % wurde die Berechnung abgebrochen, weil eine erhebliche Zunahme der Elementanzahl vorlag und damit der numerische Aufwand beträchtlich anstieg. Offensichtlich sind die mit der Extrapolationsmethode eingebrachten Fehler so bedeutend, dass die Übertragung solch fehlerbehafteter Größen das Konvergenzverhalten in sehr ungünstiger Weise beeinflusst.

Die reale Lastschrittanzahl in Abhängigkeit vom verwendeten Übertragungsalgorithmus ist in der Abbildung 2.10 dargestellt. Sie unterscheidet sich von der vom Nutzer vorgegebenen durch die automatische Lastschrittkontrolle des FE-Programms SPC-PM2AdN1. In diesem Zusammenhang können ähnliche Schlussfolgerungen für das Konvergenzverhalten wie für die numerische Effizienz gezogen werden: Die zusätzliche Lösung des Anfangswertproblems in den Knoten ohne anschließende Glättung der Knotenwerte führt

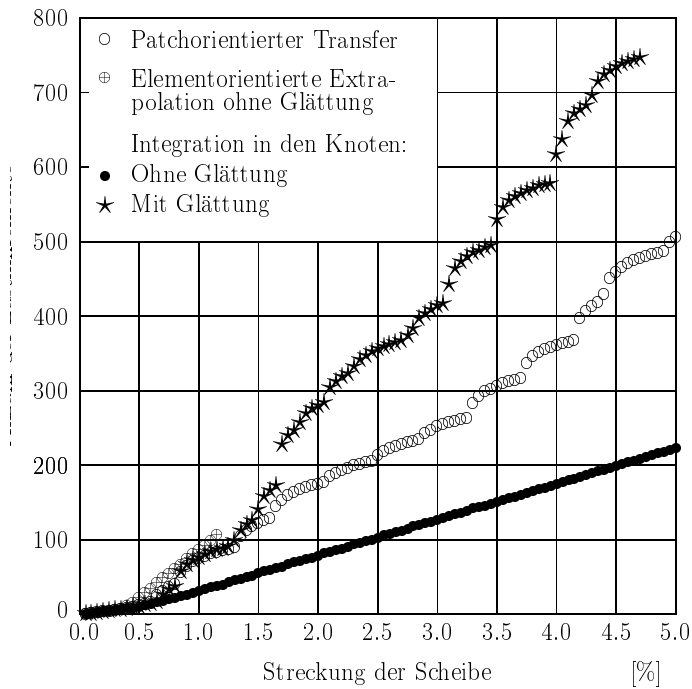


Abbildung 2.10: Scheibe mit Loch. Entwicklung der realen Lastschrittanzahl infolge automatischer Lastschrittweitensteuerung bezüglich des verwendeten Übertragungsalgorithmus bei Verwendung des Fehlerschätzers  $\eta_T$ . Vordefinierte Lastschrittanzahl: 100. Die Elementorientierte Übertragungsmethode der Extrapolation wurde bei 1.2 % Dehnung abgebrochen.

auf die kleinste Lastschrittanzahl. Alle anderen Methoden erfordern mehr Inkremente und weisen damit ein schlechteres Konvergenzverhalten auf.

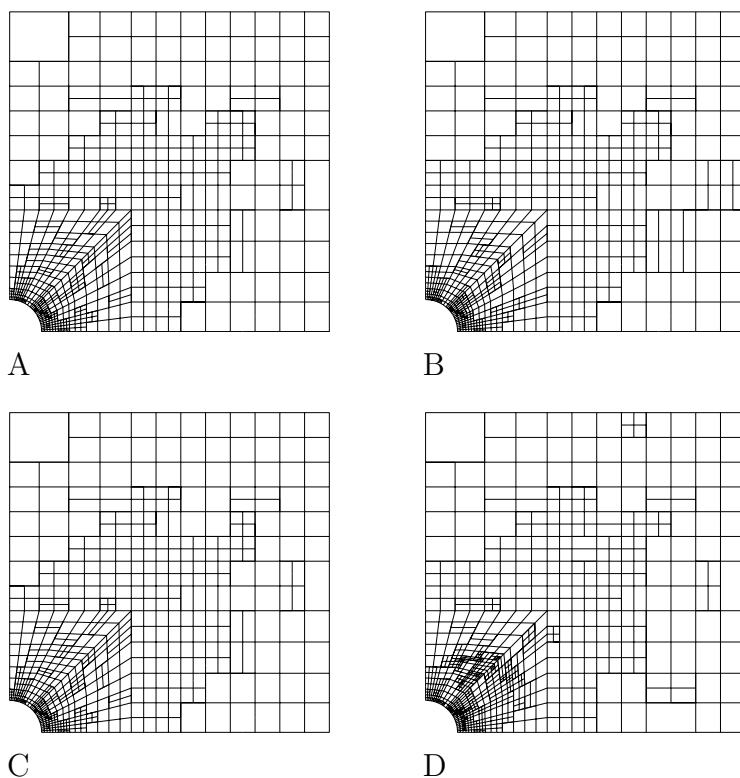


Abbildung 2.11: Scheibe mit Loch. Entwicklung des Netzes bei Nutzung unterschiedlicher Übertragungsstrategien:

- A) Zusätzliche Lösung des Anfangswertproblems in den Knoten.
- B) Wie A mit anschließender Glättung.
- C) Patchorientierter Übertragungsalgorithmus.
- D) Elementorientierte Extrapolation.

Werden für einen ausgewählten Lastschritt die angepassten Netze verglichen, welche unter Verwendung unterschiedlicher Übertragungsstrategien entstanden, kann festgestellt werden, dass diese eine ähnliche Topologie aufweisen. Eine Ausnahme bildet hierbei nur die Vernetzung, die bei Verwendung des elementorientierten Extrapolationsverfahrens erhalten wurde. Hier treten auch ausgeprägte Verfeinerungen in vom Loch weiter entfernten Zonen der Scheibe auf, welche mit anderen Übertragungstrategien nicht beobachtet werden konnten.

Alle Netze weisen im Allgemeinen hohe Verfeinerungsdichten in Nähe des Loches auf, genau an den Orten, wo sich auch große Spannungsgradienten befinden. Da sich der Fehlerschätzer bezüglich der Erfüllung des Gleichgewichts besonders sensibel gegenüber großen Spannungsgradienten erweist, wurden Netzverfeinerungen in diesen Zonen erwartet.

Ein weiterer numerischer Test wurde mit dem Fehlerindikator  $\eta_{KT}$  bezüglich der Erfüllung der Fließbedingung durchgeführt. Die Ergebnisse bestätigen die Einflüsse der unterschiedlichen Übertragungsalgorithmen auf das numerische Konvergenzverhalten und die Effektivität adaptiver FE-Algorithmien, die bereits diskutiert wurden. Wie aus Abbildung 2.12 ersichtlich, erweist sich auch in diesem Fall die Methode der zusätzlichen

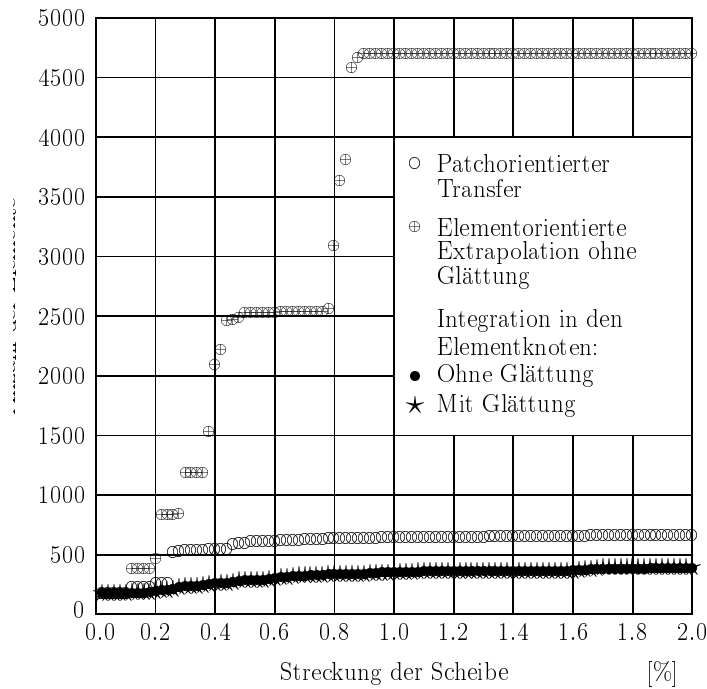


Abbildung 2.12: Scheibe mit Loch. Entwicklung der Elementanzahl in Abhängigkeit vom verwendeten Übertragungsalgorithmus bei Verwendung des Fehlerschätzers  $\eta_{KT}$ . Grobnetz mit 176 Elementen

Lösung des Anfangswertproblems in den Knoten als effektivster Algorithmus, führt er doch auf die kleinste Anzahl von Elementverfeinerungen. Auch hier erscheint die elementorientierte Extrapolationsmethode aufgrund einer großen Anzahl von Verfeinerungen für eine effektive Bearbeitung als weniger geeignet.

#### 2.4.4 Adaptive Algorithmen zur Steuerung und Simulation der Ausbreitung von Schädigungszonen

Die meisten Metalle versagen bei Raumtemperatur duktil. Der Bruchprozess wird begleitet von extensiven plastischen Deformationen gekoppelt mit Energiedissipation. Dieses duktile Verhalten findet man in vielen Ingenieur Anwendungen.

Mikroskopisch bedeutet duktiler Versagen Entstehen, Wachstum und Vereinigung von Voids. Das dabei auftretende Risswachstum erfolgt durch ein kontinuierliches Einfließen der Voids in einen makroskopischen Hauptriss.

Makroskopisch hat man drei wesentliche Faktoren zu berücksichtigen: Plastische Deformationen, hydrostatische Spannungen und Lokalisierungsprozesse, die als direktes Vorstadium des Risswachstums gelten.

Die Voidwachstums- und Vereinigungsprozesse finden in der sogenannten Prozesszone vor der Risspitze statt. Sie müssen auf der Ebene des Kontinuums anhand erweiterter Materialannahmen, die den Damage-Prozess mit einschließen, modelliert und in die numerische Lösung der Randwertaufgabe mit einbezogen werden. Die stabile Lösung der Randwertaufgaben erfordert einerseits die Kenntnis der makroskopischen Materialpara-

meter, die in der Prozesszone für das Versagen bis zum Bruch verantwortlich sind. Andererseits muss die Formulierung der Randwertaufgabe so gestaltet sein, dass alle zu berechnenden Werte stetig abhängig sind von den Ausgangsparametern (“well-posedness”), damit die Modellierung bis zum Versagen stabil erfolgen kann. Letztlich müssen die einzusetzenden Materialparameter vorher in inversen Formulierungen ermittelt werden, ansonsten ist überhaupt keine Beschreibung des Bruchprozesses möglich. Voraussetzung für die Lösung der inversen Aufgaben ist die Bedingung der “well-posedness” für die dabei in der Optimierungsprozedur mehrfach zu lösenden Randwertaufgaben. Die inverse Materialparameterbestimmung im Hinblick auf diese strengen Erfordernisse für das Verhalten in der Bruchprozesszone wurde erstmals im Rahmen des DFG-Projektes [KuSche02] und der damit entstandenen Promotion [Spring05] realisiert. Innerhalb des vorliegenden Projektes lag und liegt der Schwerpunkt auf der Modellierung des Rissfortschrittes in Zusammenhang mit den adaptiv-iterativen Lösern. Die in [Spring05] gesammelten Erfahrungen in Zusammenhang mit den Gurson-Rousselier-Modellen und mit der Bestimmung der Lokalisierungsbedingungen wurden hierbei entsprechend angewandt. Die notwendigen Materialparameter mussten jedoch als gegeben vorausgesetzt werden oder wurden [Spring05] entnommen.

Zusammenfassend sei somit gesagt, dass die Modellierung von duktilem Bruchversagen die Realisierung und Lösung von drei entscheidenden Fragestellungen erfordert:

1. Die Effiziente Beschreibung des Materialverhaltens einschließlich der Material-Degradation. Die Eigenschaften auf der Mikroebene müssen durch Homogenisierung Berücksichtigung finden und dabei gleichzeitig stabile Materialmodelle, die zu gut gestellten Formulierungen (“well-posedness”) führen, erzeugt werden.
2. Die Modellierung des Überganges vom Kontinuum zum Diskontinuum mit neuen freien Oberflächen (Trennprozess).
3. Die Simulation von Rissen und Risswachstumsprozessen, die Verschiebungs-Diskontinuitäten im kontinuierlichen Medium darstellen.

Die eben formulierten Aufgaben wurden im Rahmen des Projektes wie folgt realisiert. Den Ausgangspunkt bildeten die adaptiv-iterativen Lösungsalgorithmen, die in der letzten Beantragungsphase für elastisch-plastisches Materialverhalten entwickelt wurden (inklusive Übertragung der Zustandsvariablen bei adaptiver Netzveränderung und Fehlerschätzer). Die dabei entstandene Software (Basis: Workada) konnte dann auf die schädigungsmechanischen Fragestellungen erweitert werden. Somit ist die Beschreibung des Materialverhaltens in der Prozesszone möglich. Die beiden anderen Punkte konnten in der Auslaufphase des SFB nur in der einfachsten Form als erste Erfahrungssammlung realisiert werden. Das bedeutet die Vorgabe eines Längenmaßes  $\Delta a$ , das im Versagensfall den Riss um  $\Delta a$  erweitert.

Bleibt noch die Definition des Versagensfalles in enger Verbindung mit der Festlegung der Risswachstumsrichtung. In diesem Zusammenhang scheint es angebracht, das Lokalisierungskriterium, das als verschwindende Determinante des akustischen Tensors [Spring05] definiert ist, zu verwenden. Da ohnehin nur bis zur Erfüllung dieses Kriteriums stabil gerechnet werden kann, ist diese Tatsache sehr einleuchtend. Eine immer bessere Modellierung bis zum Versagen hängt dann von den konkreten Modellen ab, die in erweiterter

Form auch nichtlokale Theorien mit einbeziehen müssen. Entscheidend dabei ist die Anbindung des Versagensfalles an die notwendigen Experimente.

Geht man jedoch beim Risswachstum von einer scharfen Risspitze aus, dann ergibt sich wegen des singulären asymptotischen Verhaltens (auch bei nichtlinearem Material) das Problem der immerwährenden Erzeugung des Versagensfalles (Rissfortschritt) mit immer besserer adaptiver Netzverfeinerung an der Risspitze, ohne einen Schwellwert größer 0 zu erreichen. Anders ausgedrückt heißt das, dass für eine beliebig kleine äußere Last Risswachstum an einer scharfen Risspitze erzeugbar ist, wenn die klassischen Schädigungsmodelle verwandt werden. Die Lösung dieses Problems ist eine eigenständige Aufgabe für zukünftige Untersuchungen. Dabei muss das asymptotische Verhalten in Verbindung mit den möglichen Lokalisierungsmoden in der Risspitze betrachtet werden.

Um diese Angelegenheit einfach zu umgehen, wurde der Riss mit einem vorgegebenen kleinen Radius modelliert. Auf diese Weise sollte die adaptive Netzabhängigkeit des Kriteriums behoben werden. Jedoch war die praktische Realisierung wegen unüberbrückbarer Schwierigkeiten beim Rissfortschritt eines abgerundeten Risses mit den vorhandenen adaptiv-iterativen Lösern zur Zeit noch nicht durchführbar.

Deshalb wird derzeit die Rissimulation anhand von zwei vergleichenden Betrachtungsweisen realisiert:

- Verwendung eines nichtlokalen Schädigungsmodells (Gurson, Rousselier) mit Ausmittlung der Schädigungsvariablen  $\beta$  ([Spring05]) über die Gausspunkte und nachfolgender Extrapolation auf die Knotenpunkte. Dabei wird Risswachstum definiert durch:
  - Risswachstum entsteht, wenn der Porenvolumenanteil  $f = f(\beta)$  einen vorgegebenen kritischen Wert  $f_c$  erreicht.
  - Der Rissfortschritt geht von der Risspitze aus in Richtung des maximalen Porenvolumenanteils
  - Das Rissinkrement  $\Delta a$  wird durch eine nach unten vorgegebene Elementverfeinerungsgrenze an der Risspitze definiert.
- Verwendung der Determinante des akustischen Tensors als Kriterium des Rissfortschrittes:
  - Bestimmung der Determinante  $q(x, y)$  des akustischen Tensors in einer entsprechenden Anzahl von Gausspunkten um die Risspitze. Das Materialverhalten wird dabei anhand der Schädigungsvariable  $\beta$  ebenfalls ausgemittelt.
  - Erzeugung einer interpolierten Funktion von diesen Determinanten über das Risspitzengebiet, um die Risswachstumsrichtung zu definieren
  - Beim Verschwinden der Determinante in einem Punkt der Rissumgebung erfolgt Rissfortschritt in Richtung des Minimums der ermittelten Funktion.
  - Das Rissinkrement  $\Delta a$  wird durch eine nach unten vorgegebene Elementverfeinerungsgrenze an der Risspitze definiert.

## Literaturverzeichnis

- [KuSche02] M. Kuna and M. Scherzer. Identifikation elastoplastischer und schädigungsmechanischer Materialparameter anhand gemessener Verformungsfelder. *DFG-Vorhaben KU 929/7-1, 929/7-2*, Institut für Mechanik und Fluidodynamik, TU Bergakademie Freiberg, 2002–2004.
- [Mey05] A. Meyer. A New Efficient Preconditioner for Crack Growth Problems. Prepr. SFB393 05-06, TU Chemnitz.
- [MRS05] A. Meyer, F. Rabold and M. Scherzer. Efficient finite element simulation of crack propagation using adaptive iterative solvers. *Communications in Numerical Methods in Engineering* 2006,22,93-108.
- [Spring05] M. Springmann. *Identifikation von Materialparametern schädigungsmechanischer Gesetze unter Einbeziehung der Dehnungslokalisierung*. Dissertation, TU Bergakademie Freiberg, Institut für Mechanik und Fluidodynamik, 2005.
- [Schwa05] M. Schwarz. Simulation der Rissausbreitung in der Nähe von Materialeinschlüssen. *Studienarbeit am IMFD*, TU Bergakademie Freiberg, 2005.

## 2.5 Offene Fragen / Ausblick

Die bisher entwickelte FEM-Software für geometrisch und physikalisch nichtlineare Aufgaben wurde im Berichtszeitraum für das Teilprojekt D1 des SFB 393 der TU Chemnitz um adaptive Strategien zur Netzanpassung 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.

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 dadurch gerechtfertigt, dass die Zustandsgrößen in den Elementknoten (als Basisvariablen für die Übertragungsstrategien) mit der gleichen Genauigkeit vorliegen wie in den Integrationsstützstellen. Vergleichende Untersuchungen mit einer elementorientierten Extrapolation und einem patchorientierten Verfahren erbrachten den Nachweis, dass die in diesem Teilprojekt favorisierte Übertragungsweise zu numerisch genaueren Ergebnissen und einem verbesserten Konvergenzverhalten führt.

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.

Mit SPC-PM2AdNl liegt ein FEM-Programm zur numerischen Simulation von ebenen geometrisch und physikalisch nichtlinearen Problemstellungen vor, das sich auf der Ba-

sis 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 unterschiedliche praktische Aufgaben aus der Struktur- und Rissbruchmechanik lösen. Eine Weiterentwicklung dieser effektiven und anpassungsfähigen Programmstrukturen ist durch die Genehmigung des DFG-Paketantrages "Numerische Simulation gekoppelter Aufgaben der Mechanik" gewährleistet. Hierbei stellen die Erweiterung der Materialbibliothek um gekoppelte Aufgabenstellungen der Piezo- wie auch der Biomechanik, die Berücksichtigung räumlicher Probleme als auch die Identifikation von Materialparametern unter Nutzung von speziellen Regularisierungstechniken die Kernpunkte des Forschungsvorhabens dar.



# 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 Übergangsregime 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 zu finden. 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 Phasenraum-dichte  $f_s$  so, dass gerade die klassischen Feldvariablen Dichte  $\rho$ , 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 Phasenraum-dichte  $f_s(t, \underline{x}, \underline{c})$ , 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  $\rho_s$ ,  $\underline{v}_s$  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 Phasenraum-dichte 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 Phasenraum-dichten 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 an 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 poiseulle flow.  
in volume 663 of *AIP Conference Proceedings*, pp. 149–156, Canada, 2003. Whistler.



## 2.4 Ergebnisse

Der folgende Bericht umfasst einen Überblick über die insgesamt erreichten Ergebnisse und die im letzten Jahr erzielten Fortschritte. Die 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

$$\partial_t \underline{C}_s + \underline{\underline{A}}_s(\underline{C}_s) \cdot \partial_{\underline{x}} \underline{C}_s = \underline{E}_s + \sum_r^{N_s} \underline{B}_{rs}(\underline{C}_r, \underline{C}_s) \quad (2.5)$$

mit dem Advektionstensor  $\underline{\underline{A}}_s(\underline{C}_s)$ , den externen Kräften  $\underline{E}_s$  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:

$$\left[ \underline{\underline{A}}_s \right]_x = \left( \begin{array}{c|cc|ccc|cccc|} \hline C^x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline C^{xx} & C^x & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline C^{xy} & 0 & C^x & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline C^{xxx} & 2C^{xx} & 0 & C^x & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline C^{xxy} & C^{xy} & C^{xx} & 0 & C^x & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline C^{xyy} & 0 & 2C^{xy} & 0 & 0 & C^x & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline C^{xxxx} & 3C^{xxx} & 0 & 3C^{xx} & 0 & 0 & C^x & 0 & 0 & 0 \\ \hline C^{xxxy} & 2C^{xxy} & C^{xxx} & C^{xy} & 2C^{xx} & 0 & 0 & C^x & 0 & 0 \\ \hline C^{xxyy} & C^{xyy} & 2C^{xxy} & 0 & 2C^{xy} & C^{xx} & 0 & 0 & C^x & 0 \\ \hline C^{xyyy} & 0 & 3C^{xyy} & 0 & 0 & 3C^{xy} & 0 & 0 & 0 & C^x \\ \hline \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ \hline \end{array} \right) \quad (2.6)$$

Die Berechnung der Gleichungen zu gegebener Ordnung erfolgt durch automatisierte Formelmanipulation mittels MATHEMATICA [See03a], [SH05c]. Durch Differentiation von (2.3) werden zunächst die Beziehungen zwischen Momenten und Kumulanten bis zur gewünschten Ordnung bestimmt. Anschließend werden die Produktionsterme für die

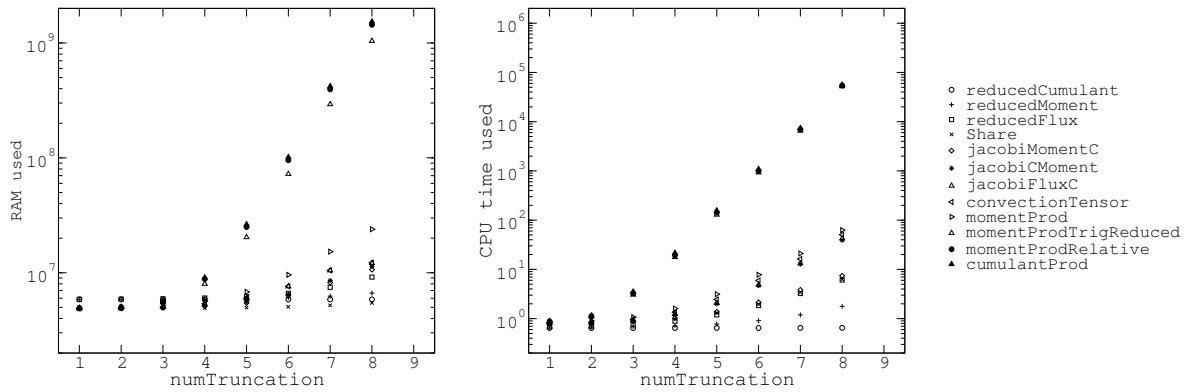


Abbildung 2.1: Benötigter Speicher- und CPU-Zeitbedarf zur Berechnung der Kumulantengleichungen zum Abschluss des entsprechenden Teilschrittes für eine inerte Mischung (Dual-Itanium2, 12GB RAM).

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 eindeutig 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. Abbildung 2.1 zeigt den Ressourcenbedarf für die einzelnen Schritte. Hauptaufwand ist dabei die symbolische Integration der Produktionsterme, welche im wesentlichen aus der Reduktion trigonometrischer Ausdrücke besteht. Für einkomponentige Gase vereinfachen sich die Terme, so dass sehr viel höhere  $N_\alpha$  möglich sind.

Für das Modell des Maxwell-Gases gibt die Betrachtung von in den Kumulanten linearisierten Produktionstermen Aufschluss über den Bezug der Kumulanten zur klassischen, kontinuumsmechanischen Fluid-Beschreibung. Für dieses Modell ist die Jacobi-Matrix der Produktionsterme bezüglich der Kumulanten im Gleichgewicht blockdiagonal. Dadurch können entsprechende Eigenwerte und -variablen unabhängig von der Ordnung der Kumulantengleichungen  $N_\alpha$  bestimmt werden [See03b]. Die Motivation für die Kumulantenmethode zeigt sich bestätigt, denn die Eigenwerte (und damit die Relaxationsraten Eigenvariablen) wachsen mit zunehmender Kumulantenordnung. Allerdings ist ein erheblicher Überlapp der Eigenwertspektren verschiedener Ordnungen zu beobachten. Die

Eigenvariablen  $e_{\alpha i}$  ergeben sich als Linearkombination der Kumulanten:

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} e_{00} \\ e_{11} \\ e_{12} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} C^0 \\ C^x \\ C^y \end{pmatrix} \\
 \begin{pmatrix} e_{20} \\ e_{211} \\ e_{212} \end{pmatrix} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C^{xx} + C^{yy} \\ C^{xx} - C^{yy} \\ 2C^{xy} \end{pmatrix} \\
 \begin{pmatrix} e_{311} \\ e_{312} \\ e_{321} \\ e_{322} \end{pmatrix} &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C^{xxx} + C^{xyy} \\ C^{yyy} + C^{xxy} \\ C^{xxx} - 3C^{xyy} \\ C^{yyy} - 3C^{xxy} \end{pmatrix} \\
 \begin{pmatrix} e_{40} \\ e_{411} \\ e_{412} \\ e_{421} \\ e_{422} \end{pmatrix} &= \frac{1}{8} \begin{pmatrix} C^{xxxx} + 2C^{xxyy} + C^{yyyy} \\ 4C^{xxxx} - 4C^{yyyy} \\ 4C^{xxyy} + 4C^{xyyy} \\ C^{xxxx} - 6C^{xxyy} + C^{yyyy} \\ 4C^{xxyy} - 4C^{xyyy} \end{pmatrix} \\
 &\vdots
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

Genauere Betrachtungen [See03b] zeigen drei verschiedene Arten von Eigenvariablen, die man entsprechend der Zuordnung zu klassischen Variablen unterscheiden kann: (I) einzelne, *energieartige* Eigenvariablen  $e_{\alpha 0}$ , welche immer zum niedrigsten Eigenwert für geradzahlige Ordnungen  $\alpha$  auftreten. Diese Eigenvariablen sind symmetrisch bezüglich einer Vertauschung der Koordinatenachsen; (II) paarweise *flussartige* Eigenwerte  $e_{\alpha n 1}$  und  $e_{\alpha n 2}$ , welche stets paarweise zu ungeradzahligem Ordnungen  $\alpha$  auftreten und für die die Eigenvariablen ebenfalls symmetrisch bezüglich einer Vertauschung der Koordinatenachsen sind; (III) paarweise *spannungsartige* Eigenwerte  $e_{\alpha n 1}$  und  $e_{\alpha n 2}$ , die zu geradzahligem  $\alpha$  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]. 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.

## 2.4.1 Thermische Randbedingungen

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 2.4.1).

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  $\underline{u}$  bzw. aus der Wandtemperatur  $T$  berechnete Werte ersetzt. Anschließend erfolgt ein Update wie für einen normalen Fluidknoten.

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 spezifischen Energie entsprechenden Eigenvariablen  $e_{1i}$  und  $e_{20}$  des Randknotens werden die Wandgeschwindigkeit  $\underline{w}$  und die aus der Wandtemperatur  $T$  berechnete spezifischen 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  $\underline{j}$  entsprechenden Eigenvariablen  $e_{21i}$  und  $e_{31i}$  bestimmt. Durch Rücktransformation erhält man die neuen Werte für die Kumulanten am Randknoten.

Anhand von Couette- und Poiseuille-Strömungen wurden diese thermischen Randbedingungen für verschiedene Gasmodelle untersucht [See03b] 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.

## 2.4.2 Testprobleme

### Analytische 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 [SH05a] 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. Bei Verwendung der nach den Kumulanten linearisierten Produktionsterme sind jedoch für Kumulanten höherer Ordnung Abweichungen zu beobachten.

### Couette-Strömung (adiabatische Ränder)

Zunächst wurden die aus der kinetischen Theorie bekannten adiabatischen slip- und 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.

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], [See03b].

Mit diesen adiabatischen noslip-Randbedingungen wurde das Problem der Couette-Strömung simuliert [See03b] 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 eine gute qualitative Übereinstimmung der Kumulantenmethode mit der Kinetischen Theorie und der direkten Simulation durch Molekulardynamik.

### 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. 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 [See03b], allerdings nur bei Verwendung der Navier-Stokes-Randbedingungen. Für die thermischen noslip-Randbedingungen wird ähnlich zu Navier-Stokes ein Maximum im Temperaturprofil beobachtet.

### 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 und ist auch für die Kumulantenmethode zu beobachten [See03b].

### 2.4.3 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 [See03b]. Dazu wurde das Eigenwertspektrum der Komponenten des Advektionstensors bei Variation der Eigenvariablen bezüglich der in den Kumulanten linearisierten Produktionsterme betrachtet.

Die Form der Spektren im Vergleich mit dem entsprechenden Profil aus der Strömungssimulation lässt darauf schließen, dass diese Instabilitäten durch zu hohe Wärmeflüsse hervorgerufen werden. Dies kann zum einen dadurch bedingt sein, 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.

### 2.4.4 Effiziente Diskretisierung

In Arbeiten zur Anwendbarkeit effizienter, d.h. adaptiver Diskretisierungsstrategien für die Kumulantengleichungen zeigte sich [See03b], dass sich eine wesentliche Voraussetzung für die Anwendbarkeit moderner Verfahren mit dem bisherigen, nichtlinearen Ansatz für die charakteristische Funktion nur schwierig erreichen lässt. Hauptproblem ist dabei die analytische Formulierung einer Entropiedichte, 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 Arbeiten konnte gezeigt werden [See03b],[Ba04] 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. Bei geeigneter Wahl der Ansatzfunktionen für die charakteristische Funktion könnten eine analytische Form für die Entropiedichte und damit nach der Kumulantenmethode symmetrische Gleichungen angegeben werden, die unter Beibehaltung der Stabilitätseigenschaften diskretisierbar sind.

## Literaturverzeichnis

- [SHMss] S. Seeger, K. H. Hoffmann, and A. Meyer. The cumulant method for gas dynamics. In K. H. Hoffmann and A. Meyer, editors, *Parallel algorithms and cluster computing*, page 337. Springer Verlag, Berlin, in press.
- [SH05c] S. Seeger and K.H. Hoffmann.  
On symbolic derivation of the cumulant equations.  
*Computer Physics Communications*, 168(3):165–176, 2005.

- [SH05b] S. Seeger and K.H. Hoffmann.  
On the Domain of Hyperbolicity of the Cumulant Equations.  
*J. Stat. Phys.*, 121(1–2):75–90.
- [SH05a] S. Seeger and K.H. Hoffmann.  
The cumulant method for the space-homogeneous Boltzmann equation.  
*Continuum Mech. Thermodyn.*, 17(1):51–60, 2005.
- [Ba04] J. Balg.  
Anwendung der Methode der gewichteten Residuen auf die eindimensionale Boltzmann-Gleichung.  
Bachelorarbeit TU-Chemnitz, 2004
- [SH04] S. Seeger and K.H. Hoffmann.  
Erratum: The cumulant method applied to a mixture of Maxwell gases.  
*Continuum Mech. Thermodyn.*, 16(5):515, 2004.
- [See03b] S. Seeger. *The Cumulant Method*.  
Phd thesis, Chemnitz University of Technology, Chemnitz, September 2003.  
<http://archiv.tu-chemnitz.de/pub/2003/0120>.
- [See03a] 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.

## 2.5 Offene Fragen / Ausblick

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.

Dazu gilt es eine Theorie zu entwickeln, wie aus der kinetischen Theorie bekannte Formulierungen für Randbedingungen an die Phasenraumdichte auf die für die Ableitung der Kumulantengleichungen benötigte charakteristische Funktion übertragen lassen. So können Randbedingungen aus der mikroskopischen Beschreibung heraus systematisch und theoretisch fundiert abgeleitet werden. 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.

Weiterhin ist die Anwendung moderner numerischer Methoden auf die Lösung der raum-inhomogenen Kumulanten-Gleichungen weiter voranzutreiben. 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. Zwar kennt man notwendige Kriterien für solche Funktionale, Untersuchungen zu konkreten, praktisch anwendbaren Formulierungen sind in der Literatur jedoch nicht zu finden. Ausgehend von bekannten Entropiefunktionalen für die Phasenraum-dichte kann durch einen geeigneten linearen Ansatz für die Phasenraum-dichte versucht werden, mögliche Entropiefunktionale für die charakteristische Funktion zu finden. So ließe sich zum einen eine symmetrische Form der Bewegungsgleichungen für die Ansatzparameter konstruieren, zum anderen könnten aber auch die Vorteile bei der Berechnung der Stoßintegrale bei einer Formulierung bezüglich der charakteristischen Funktion genutzt werden. Die zu gewinnenden Erkenntnisse sind über die hier untersuchten Methoden zur Modellierung von Fluiden hinaus für eine Vielzahl anderer Probleme der statistischen Physik von Bedeutung.

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 kann.



## KAPITEL 3

---

### Gesamtdokumentation der Aktivitäten

---



## 3.1 Aktivitätenliste

### 3.1.1 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. 21.–23.04.2004 Workshop MS4 (Modelling and Simulation in Molecular Systems, Mesoscopic Structures, and Material Science) Chemnitz
2. 20.–22.09.2004, Chemnitzer FEM-Symposium 2004, Ehrenfriedersdorf
3. 27.09.-08.10.2004 WE-Heraeus-Ferienkurs für Physik Neue Materialien für morgen und übermorgen in Experimenten und Simulationen, Chemnitz
4. 19.–21.09.2005, Chemnitzer FEM-Symposium 2005, Schöneck/Vogtl.

### 3.1.2 Qualifikationen

Die Förderung des Sonderforschungsbereichs „Parallele Numerische Simulation für Physik und Kontinuumsmechanik“ 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

Freitag, Anke, Numerische Untersuchungen zum Einfluss des Sparwinkels auf die Gratbildung, Masterarbeit, TU Chemnitz, Fakultät für Naturwiss., Februar 2005

Rosam, Jan, Berechnung der Rissgeometrie bei spröden elastischen Körpern, Diplomarbeit, TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik, Aug.2004

Otto, Thomas, Multigrid-DD-Löser für die Mindlin-Reissner-Plattengleichung, Diplomarbeit, TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik, Juli 2005

Schwinger, Stephan, Separierbare approximation der Coulomb-Wechselwirkung Diplomarbeit, TU Chemnitz und MPI Leipzig, Okt. 2005

S. Trebesius, Eine Singulärfunktionenmethode für elliptische Randwertaufgaben in dreidimensionalen Gebieten, Diplomarbeit, TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik, Juni 2004

Freitag, Melina, On the influence of Multiplication Operators on the Ill-Posedness of Inverse Problems Diplomarbeit, TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik, Sept. 2004

Nestler, Peter, Plattenberechnung nach der Mindlin-Reissner-Theorie, Diplomarbeit, TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik, Aug. 2004

Rückert, Jens, Stabile Berechnung des Jacobians in der FEM, Bericht z. Computerpraktikum, TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik, Juli 2005

Glänzel, Janine, Numerische Experimente zum Konvergenzverhalten bei Eckensingularitäten, Diplomarbeit, TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik, Aug. 2005

Olbrich, Carsten, Ising-Modell zur Simulation von Molekülaggregaten auf gestuften Oberflächen, Bachelor-Arbeit, TU Chemnitz, Fakultät für Naturwiss., Aug. 2004.

Olbrich, Carsten, Simulation von Transporteigenschaften von quasi-zweidimensionalen Elektronensystemen mit Störstellen, Master-Arbeit, TU Chemnitz, Fakultät für Naturwiss., Aug. 2006.

M. Hofmann, Verwendung von Task Pool Team Konzepten zur parallelen Implementierung von Diffusionsprozessen auf Fraktalen, Studienarbeit TU-Chemnitz, Fakultät für Informatik, Professur Praktische Informatik, 2005.

M. Schwind, Implementierung und Laufzeitevaluierung paralleler Algorithmen zur Gram-Schmidt Orthogonalisierung und zur QR-Zerlegung, Diplomarbeit TU Chemnitz, Fakultät für Informatik, Professur Praktische Informatik, 2005.

C. Schuster, Evaluierung von Task Pool Teams für eine Master Worker Anwendung, Studienarbeit TU-Chemnitz, Fakultät für Informatik, Professur Praktische Informatik, 2004.

Hallerberg, Sarah, Analytische Struktur der Dynamischen Zeta-Funktion eines Ising-Systems mit globaler Wechselwirkung, Diplomarbeit, TU Chemnitz, Fakultät für Naturwiss., September 2004.

### 3.1.4.2 Dissertationen, Habilitationen

#### Habilitationen:

Gemming, Sibylle, Structure and Reactivity at Interfaces - Density-Functional Investigations, Habilitation, TU Chemnitz, Dezember 2004.

#### Dissertationen:

Cain, Philipp, Real-space renormalization group approach to the integer quantum Hall effect. Dissertation, TU Chemnitz, Fakultät für Naturwiss., Juli 2004.

Eibner, Tino, Randkonzentrierte und adaptive hp-FEM. Dissertation, TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik, Januar 2006 eing.

Grosman, Sergej, Adaptivity in anisotropic finite element calculations. Dissertation, TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik, Februar 2006 eing.

Heilmann, Frank, The State Space of Complex Systems. Dissertation, TU Chemnitz, Fakultät für Naturwiss., Oktober 2005

Karman, Peter, Die Zustandsdichte des Bernoulli-Anderson-Modells. Dissertation, TU Chemnitz, Fakultät für Naturwiss. (in Vorbereitung)

Pönitz, Kornelia, Finite-Element-Mortaring nach einer Methode von J.A. Nitsche für elliptische Randwertaufgaben. Dissertation, TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik, November 2005 eing.

Pester, Cornelia, A-posteriori error estimation for non-linear eigenvalue problems for differential operators of second order with focus on 3D vertex singularities, Dissertation, TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik, Dezember 2005 eing.

Reilein, R., Eine komponentenbasierte Realisierung der TwoL Spracharchitektur, Dissertation, TU-Chemnitz, Fakultät für Informatik, 2005.

Sokolov, V., Contributions to the minimal realization problem for descriptor systems. Dissertation, TU-Chemnitz, Fakultät für Mathematik, Januar 2006 eing.

## 3.2 Übersicht über die Veröffentlichungen

### 3.2.1 Referierte Literatur

D. H. N. Anh, K. H. Hoffmann, S. Seeger, and S. Tarafdar. Diffusion in disordered fractals. *Europhys. Lett.*, 70(1):109–115, 2005.

P. Benner, J. Saak, Efficient numerical solution of the LQR-problem for the heat equation *Proc. Appl. Math. Mech.* 4(1):648–649, 2004

P. Benner, J. Saak, A Semi-Discretized Heat Transfer Model for Optimal Cooling of Steel Profiles, In *Dimension Reduction of Large-Scale Systems*, Editors: P. Benner and V. Mehrmann and D. Sorensen, Lecture Notes in Computational Science and Engineering 45: 353–356, 2005, Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, Germany

P. Blaudeck, S. Seeger, C. Schulzky, K. H. Hoffmann, T. Dutta, and S. Tarafdar. The coastline and lake shores of a fractal island. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 39:1609–1618, February 2006.

A. Bucher, A. Meyer, U.-J. Görke, R. Kreißig, A contribution to error estimation and mapping algorithms for a hierarchical adaptive FE-strategy in finite elastoplasticity, *Computational Mechanics* vol.36 no.3,182–195, 2005.

A. Bucher, A. Meyer, U.-J. Görke, R. Kreißig, A comparison of mapping algorithms for hierarchical adaptive FEM in finite elastoplasticity, *Computational Mechanics*, 2006 (accepted for publication).

P. Cain and R.A. Römer, *Fluctuating Hall resistance defeats the quantized Hall insulator*, *Europhys. Lett.*, 66:104–110, 2004.

P. Cain and R.A. Römer, *Real-space renormalization-group approach to the integer quantum Hall effect*, *Int. J. Mod. Phys. B*, 19:2085–2119, 2005.

V. Cerovski, R. K. Brojen Singh, and M. Schreiber, *Localization of non-interacting electrons in thin layered disordered systems*, *Phys. Rev. B.*, 2006 (submitted for publication).

V. Cerovski, M. Schreiber, and U. Grimm, *Spectral and diffusive properties of silver-mean quasicrystals in 1,2, and 3 dimensions*, *Phys. Rev. B*, 72:054203/1–9, 2005.

V. Cerovski, M. Schreiber, and U. Grimm, *Multiscaling, ergodicity and localization in quasiperiodic chains*, *Phys. Rev. B.*, 2006 (submitted for publication).

A. Croy and R.A. Römer, *Scaling at the energy-driven metal-insulator transition and the thermoelectric power*, *phys. stat. sol. (c)*, 2006. (accepted for publication).

- T. Eibner, J.M. Melenk. Fast algorithms for setting up the stiffness matrix in hp-FEM: a comparison. *Computer Mathematics and its Applications: Advances and Developments (1994-2005)*, Publisher: LEA Publishers, Athens, Greece ISBN: 960-87275-9-6
- T. Eibner and J.M. Melenk A local error analysis of the boundary concentrated FEM. in IMA J. Numerical Analy., to appear
- A. N. Enyashin, S. Gemming, G. Seifert, TiSi<sub>2</sub> nanostructures - enhanced conductivity at the nanoscale? *phys. stat. sol. (b)*, zur Veröffentlichung eingereicht.
- A. Fichtner, G. Radons, Disordered iterated maps: Spectral properties, escape rates and anomalous transport. *New J. Phys.* 7, 30 (2005).
- S.J. Gates Jr., A. Jellal, E.-H. Saidi, and M. Schreiber, *Supersymmetric embedding of the quantum Hall matrix model*, J. High Energy Phys. JHEP, 11:075/1–29, 2004.
- S. Gemming, M. Schreiber. Density-functional investigation of alloyed nanowires. *Comp. Phys. Commun.* 169:57-59, 2005.
- S. Gemming, M. Schreiber. Theoretical investigation of interfaces. in *New materials in experiments and simulations*, Hrsg.: J.B. Suck, M. Schreiber und S. Gemming, Springer Series in Material Science (Springer, Berlin, Heidelberg 2006), zur Veröffentlichung eingereicht.
- S. Gemming, M. Schreiber. Structural and electronic properties of the near  $\Sigma 5(111)$  grain boundary in anatase. *J. Chem. Phys.*, zur Veröffentlichung eingereicht.
- S. Gemming, M. Schreiber. Impurity and vacancy clustering at the  $\Sigma 3(111)$  [1-10] grain boundary in strontium titanate *Chem. Phys.* 309:3-13, 2005.
- S. Gemming, G. Seifert, M. Schreiber. DFT investigation of nanostructured binary compounds. in *Electronic properties of synthetic nanostructures*, Hrsg. H. Kuzmany, J. Fink, M. Mehring und S. Roth, AIP Conf. Proc. 723, 368-371 (2004).
- S. Gemming, M. Schreiber, J.-B. Suck (Hrsg.), *Neue Materialien für morgen und übermorgen in Experimenten und Simulationen. Lect. Notes Phys.*, Springer, Berlin, im Druck.
- U. Grimm and M. Schreiber, *Electronic structure of quasicrystals*, in *Encyclopedia of Condensed Matter Physics* eds. F. Bassani, J. Liedl and P. Wyder (Elsevier, Amsterdam) S. 95-100, 2005.
- S. Hallerberg, W. Just, G. Radons, Analytic Properties of the Ruelle Zeta Function for Mean-Field Models of Phase Transitions. *J. Phys. A: Math. Gen.* 38, 5097-5109 (2005).
- H. Harbrecht, U. Kähler, R. Schneider Wavelet Galerkin BEM on unstructured meshes. *Computing and Visualization in Science Springer-Verlag GmbH*, ISSN: 1432-9360 (Paper) 1433-0369 (Online), DOI: 10.1007/s00791-005-0009-2, Volume 8, Numbers 3-4, 189 - 199, December 2005.

F. Heilmann and K. H. Hoffmann. Parq – high-precision calculation of the density of states. *Europhys. Lett.*, 70(2):155–161, 2005.

F. Heilmann and K. H. Hoffmann. The parQ method: a parallelized algorithm for calculating the density of states. submitted to *Parallel Computing*, 2004.

B. Heinrich, K. Poenitz. Nitsche type mortaring for singularly perturbed reaction-diffusion problems. *Computing*, 75 (2005), no. 4, 257–279. ISSN: 0010-485X

K. Hering, G. Rünger, S. Trautmann, Modular Construction of Model Partitioning Processes for Parallel Logic Simulation. Special Issue: *Int. Journ. of Computational Science and Engineering* 1 (2005),1, 22-33.

J. Hippold, G. Rünger, Task Pool Teams: A Hybrid Programming Environment for Irregular Algorithms on SMP Clusters. erscheint in: *Concurrency and Computation: Practice and Experience* (2006).

K. H. Hoffmann and J. C. Schön. Kinetic features of preferential trapping on energy landscapes. *Foundations of Physics Letters*, 18(2):171–182, 2005.

K. H. Hoffmann, F. Heilmann, and P. Salamon. Fitness Threshold Accepting over extremal optimization ranks. *Phys. Rev. E*, 70(4):046704–1 – 046704–6, 2004.

V. V. Ivanovskaya, T. Heine, S. Gemming, G. Seifert, Structure, stability and electronic properties of the composite  $\text{Mo}_{1-x}\text{Nb}_x\text{S}_2$  nanotubes. *phys. stat. sol. (b)*, im Druck.

A. Jellal, R.A. Römer, and M. Schreiber, *Anisotropic quantum Hall matrix model*, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 2006 (submitted for publication).

A. Jellal and M. Schreiber, *A matrix model of bilayered quantum Hall systems*, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 37:3147–3157, 2004.

C. Koziar, R. Reilein-Ruß, G. Rünger, Load Imbalance Aspects in Atmosphere Simulations. erscheint in: Special Issue: *Int. Journ. of Computational Science and Engineering* (2006).

M.L. Ndawana, R. Römer, and M. Schreiber, *The Anderson metal-insulator transition in the presence of scale-free disorder*, *Europhys. Lett.*, 68:678–684, 2004.

S. Schubert and K.H. Hoffmann. The structure of enumerated spin glass state spaces. *Computer Physics Communications*, in press, 2006.

S. Seeger and K. H. Hoffmann. On symbolic derivation of the cumulant equations. *Comp. Phys. Comm.*, 168(3):165–176, 2005.

S. Seeger and K. H. Hoffmann. The cumulant method for the space-homogeneous Boltzmann equation. *Continuum Mech. Thermodyn.*, 17(1):51–60, 2005.

S. Seeger and K. H. Hoffmann. On the domain of hyperbolicity of the cumulant equations. *J. Stat. Phys.*, 121(1–2):75–90, 2005.



- A. Meyer, F. Rabold, M. Scherzer, Efficient finite element simulation of crack propagation using adaptive iterative solvers. *Commun. Numer. Meth. Engng.* 2006,22,93-108
- G. Radons, W. Just, P. Häussler (Hrsg.), Collective Dynamics of Nonlinear and Disordered Systems (Springer, Berlin, 2005).
- G. Radons, G. Rünger, M. Schwind, H.L. Yang, Parallel algorithms for the determination of Lyapunov characteristics of large nonlinear dynamical systems. In: Dongarra, J.; Madsen, K.; Wasniewski, J. (Hrsg.): Applied Parallel Computing - State of the Art in Scientific Computing. Proc. of PARA'04 Workshop on State-of-the-art in Scientific Computing (LNCS, Bd. 3732). Lyngby (Copenhagen), Denmark: Springer, 2006, S. 1131-1140.
- G. Radons H.L. Yang, Static and Dynamic Correlations in Many-Particle Lyapunov Vectors, nlin.CD/0404028, eingereicht bei Phys. Rev. Lett.
- T. Rauber, G. Rünger, A Data Re-Distribution Library for Multi-Processor Task Programming. erscheint in: *International Journal of Foundations of Computer Science* (2006).
- T. Rauber, G. Rünger, Tlib - A Library to Support Programming with Hierarchical Multi-processor Tasks. *J. of Parallel and Distrib. Comput.* 65 (2005), Nr. 3, S. 347-360.
- T. Rauber, G. Rünger, Tlib - A Library to Support Programming with Hierarchical Multi-processor Tasks. *J. of Parallel and Distrib. Comput.* 65 (2005), Nr. 3, S. 347-360.
- T. Rauber, G. Rünger, Improving Locality for ODE Solvers by Program Transformations. *Scientific Programming* 12 (2004), Nr. 3, S. 133-154.
- B. Rumpf, L. Biven, Weak turbulence and collapses in the Majda-McLaughlin-Tabak equation: Fluxes in wavenumber and in amplitude space. *Physica D* 204, 188-203 (2005).
- H.L. Yang, G. Radons, Lyapunov instability of Lennard Jones fluids, *Phys. Rev. E* 71, 036211 (2005); nlin.CD/0404027.
- H.L. Yang, G. Radons, Universal features of hydrodynamic Lyapunov modes in extended systems with continuous symmetries, *Phys. Rev. Lett.* 96, 074101 (2006).
- H.L. Yang, G. Radons, Hydrodynamic Lyapunov modes in coupled map lattices. *Phys. Rev. E*, 73, 016202 (2006).
- H.L. Yang, G. Radons, Dynamical behavior of hydrodynamic Lyapunov modes in coupled map lattices. *Phys. Rev. E*, 73, 016208 (2006).

### 3.2.2 „Lecture Notes in Computational Science and Engineering“ – Sonderband des SFB 393

Einige Ergebnisse, die in den letzten Jahren im SFB 393 entstanden sind, werden im Sonderband

*Parallel Algorithms and Cluster Computing -  
Implementations, Algorithms, and Applications*

eds. K.H. Hoffmann, and A. Meyer. *Springer Lecture Notes in Computational Science and Engineering (Springer, Berlin) 2006*

erscheinen.

Inhalt:

#### **Teil 1: Implementations**

Gudula Rünger,  
Parallel Programming Models for Irregular Algorithms

Arnd Meyer,  
Basic Approach to Parallel Finite Element Computations: the DD Data Splitting

Torsten Hoefler, Rebecca Janisch, Wolfgang Rehm,  
A Performance Analysis of ABINIT on a Cluster System

Matthias Pester,  
Some Aspects of Parallel Postprocessing for Numerical Simulation

#### **Teil 2: Algorithms**

Arnd Meyer,  
Efficient Preconditioners for Special Situations in Finite Element Computations

Bernd Heinrich, Kornelia Pönitz,  
Nitsche finite element method for elliptic problems with complicated data

Reiner Kreißig, Anke Bucher, Uwe-Jens Görke,  
Hierarchical adaptive FEM at finite elastoplastic deformations

Helmut Harbrecht, Ulf Kähler, Reinhold Schneider,  
Wavelet Matrix Compression for Boundary Integral Equations

Peter Benner, Sabine Görner, Jens Saak,  
Numerical Solution of Optimal Control Problems for Parabolic Systems

**Teil 3: Applications**

Thomas Vojta,  
Parallel simulations of phase transitions in disordered many-particle systems

Alexander Croy, Rudolf A. Römer, Michael Schreiber,  
Localization of electronic states in amorphous materials: recursive Green's function method and the metal-insulator transition at  $E = 0$

Peter Blaudeck, Karl Heinz Hoffmann,  
Optimizing Simulated Annealing Schedules for Amorphous Carbons

Sibylle Gemming, Andrey Enyashin, Michael Schreiber,  
Amorphisation at heterophase interfaces

B. Mehlig and M. Schreiber,  
Energy-level and wave-function statistics in the Anderson model of localization

P. Karmann, Rudolf A. Römer, Michael Schreiber, P. Stollmann,  
Fine structure of the integrated density of states for Bernoulli Anderson models

Karl Heinz Hoffmann, Andreas Fischer, Sven Schubert, Thomas Klotz,  
Modelling aging experiments in spin glasses

Astrid Franz, Sujata Tarafdar, Janett Balg, Karl Heinz Hoffmann, Christian Schulzky, Do Hoang Ngoc Ahn, Random Walks on Fractals

Hong-liu Yang, Günter Radons,  
Lyapunov instabilities of extended systems

Steffen Seeger, Karl Heinz Hoffmann,  
Review of the Cumulant Method

### 3.2.3 Preprintreihe des SFB 393

ISSN: 1619-7178 (Print), 1619-7186 (Internet)

#### Preprintreihe des SFB 393 für 2004

(Im Bericht für die Jahre 2002 – 2004 noch unvollständig enthalten)

- 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.
- 04-08 P. Benner, E. S. Quintana-Ortí, G. Quintana-Ortí. Solving Linear Matrix Equations via Rational Iterative Schemes. October 2004.
- 04-09 C. Pester. Hamiltonian eigenvalue symmetry for quadratic operator eigenvalue problems. October 2004.
- 04-10 T. Eibner, J. M. Melenk. An adaptive strategy for hp-FEM based on testing for analyticity. November 2004.
- 04-11 B. Heinrich, B. Jung. The Fourier-finite-element method with Nitsche-mortaring. November 2004.
- 04-12 A. Meyer, C. Pester. The Laplace and the linear elasticity problems near polyhedral corners and associated eigenvalue problems. December 2004.
- 04-13 M. Jung, T. D. Todorov. On the Convergence Factor in Multilevel Methods for Solving 3D Elasticity Problems. December 2004.

#### Preprintreihe des SFB 393 für 2005

- 05-01 C. Pester. A residual a posteriori error estimator for the eigenvalue problem for the Laplace-Beltrami operator. January 2005.

- 05-02 J. Badía, P. Benner, R. Mayo, E. Quintana-Ortí, G. Quintana-Ortí, J. Saak. Parallel Order Reduction via Balanced Truncation for Optimal Cooling of Steel Profiles. February 2005.
- 05-03 C. Pester. CoCoS – Computation of Corner Singularities. April 2005.
- 05-04 A. Meyer, P. Nestler. Mindlin-Reissner-Platte: Einige Elemente, Fehlerschätzer und Ergebnisse. April 2005.
- 05-05 P. Benner, J. Saak. Linear-Quadratic Regulator Design for Optimal Cooling of Steel Profiles. April 2005.
- 05-06 A. Meyer. A New Efficient Preconditioner for Crack Growth Problems. April 2005.
- 05-07 A. Meyer, P. Steinhorst. Überlegungen zur Parameterwahl im Bramble-Pasciak-CG für gemischte FEM. April 2005.
- 05-08 T. Eibner, J. M. Melenk. Fast algorithms for setting up the stiffness matrix in hp-FEM: a comparison. June 2005.
- 05-09 A. Meyer, P. Nestler. Mindlin-Reissner-Platte: Vergleich der Fehlerindikatoren in Bezug auf die Netzsteuerung Teil I. June 2005.
- 05-10 A. Meyer, P. Nestler. Mindlin-Reissner-Platte: Vergleich der Fehlerindikatoren in Bezug auf die Netzsteuerung Teil II. July 2005.
- 05-11 A. Meyer, R. Unger. Subspace-cg-techniques for clinch-problems. September 2005.
- 05-12 P. Ciarlet, Jr, B. Jung, S. Kaddouri, S. Labrunie, J. Zou. The Fourier Singular Complement Method for the Poisson Problem. Part III: Implementation Issues. October 2005.
- 05-13 T. Eibner, J. M. Melenk. Multilevel preconditioning for the boundary concentrated hp-FEM. December 2005.
- 05-14 M. Jung, A. M. Matsokin, S. V. Nepomnyaschikh, Yu. A. Tkachov. Multilevel preconditioning operators on locally modified grids. December 2005.
- 05-15 S. Barrachina, P. Benner, E. S. Quintana-Ortí. Solving Large-Scale Generalized Algebraic Bernoulli Equations via the Matrix Sign Function. December 2005.
- 05-16 B. Heinrich, B. Jung. Nitsche- and Fourier-finite-element method for the Poisson equation in axisymmetric domains with re-entrant edges. December 2005.
- 05-17 M. Randrianarivony, G. Brunnett. C-Null paving of closed meshes with quadrilateral patches. December 2005.
- 05-18 M. Randrianarivony, G. Brunnett. Quadrilateral removal and 2-ear theorems. December 2005.
- 05-19 P. Benner, E. S. Quintana-Ortí, G. Quintana-Ortí. Solving linear-quadratic optimal control problems on parallel computers. December 2005.

### 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/bericht05>



# Teilprojekte

<b>Projektbereich A</b> .....	11
<b>A7</b> - Wavelets für Randintegraloperatoren .....	13
<b>A11</b> - Gemischte FE-Methoden .....	27
<b>A12</b> - Besondere Finite Elemente Methoden .....	33
<b>A15</b> - Optimalsteuerungsprobleme .....	65
<b>Projektbereich B</b> .....	77
<b>B8</b> - Parallelisierung irregulärer numerischer Algorithmen .....	79
<b>Projektbereich C</b> .....	97
<b>C1</b> - Lokalisierung elektronischer Zustände in amorphen Materialien .....	99
<b>C3</b> - Relaxation komplexer Systeme .....	111
<b>C7</b> - Bandstrukturprogramm für Amorphisierungsphänomene an Grenzflächen ..	127
<b>C8</b> - Langzeitverhalten großer dynamischer Systeme .....	143
<b>Projektbereich D</b> .....	165
<b>D1</b> - Simulation elastisch-plastischer Deformationen .....	167
<b>D5</b> - Kumulantenmethode .....	207