ARBEITS– UND ERGEBNISBERICHT 1999–2000–2001 SFB 393

An die
Deutsche Forschungsgemeinschaft
— Sonderforschungsbereiche —

über
Magnifizenz der Technischen Universität Chemnitz

Bezeichnung des Sonderforschungsbereichs:

Numerische Simulation auf Massiv Parallelen Rechnern

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 1. April 2001

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

Chemnitz, den 1. April 2001

(Prof. Dr. phil. habil. Günther Grünthal)
– Rektor der TU Chemnitz –

Technische Universität Chemnitz

SFB 393

Inhaltsverzeichnis

1 Allgemeiner Teil/Zusammenfassung **7**

1.1 Wissenschaftliche Entwicklung des Sonderforschungsbereichs 9

1.2 Entwicklung der Kooperation im Sonderforschungsbereich 11

1.3 Stellung innerhalb der Hochschule 11

1.4 Förderung der Lehre und des wissenschaftlichen Nachwuchses . . . 12

2 Projektbereiche **15**

Projektbereich A 17

Teilprojekt A3 - Schnelle Löser, analytische Konstruktion 21

Teilprojekt A4 - Algebraische Zerlegungsmethoden 65

Teilprojekt A7 - Parallele 3D–BEM auf Waveletbasis 71

Teilprojekt A8 - Parallele Optimalsteuerung 91

Projektbereich B 95

Teilprojekt B6 - Anwendungsoptimierte Kommunikation auf Clusterarchitekturen 99

Teilprojekt B7 - Management von Cluster–Systemen 121

Projektbereich C 129

Teilprojekt C1 - Lokalisierung elektronischer Zustände in amorphen Materialien 133

Teilprojekt C2 - Simulation von Vielteilchensystemen 159

Teilprojekt C3 - Relaxation komplexer Systeme 181

Teilprojekt C4 - Stochastische Optimierungsverfahren 201

Teilprojekt C6 - Fluktuationen von Matrixelementen in ungeordneten Systemen 209

Projektbereich D 219

Teilprojekt D1 - Simulation elastisch–plastischer Deformationen 223

Teilprojekt D2 - Parallele Algorithmen für disperse Mehrphasenströmungen 261

Teilprojekt D3 - Parallele Strömungssimulation 285

3 Gesamtdokumentation der Aktivitäten **291**

3.1 Aktivitätenliste 293

3.1.1 Seminare, Vorträge und Präsentationen in Chemnitz 293

3.1.2 Übersicht über Workshops, Tagungen und Ausstellungen . . 308
3.1.3 Gästeprogramm, wissenschaftliche Kontakte 310
3.1.3.1 Gastwissenschaftler 310
3.1.3.2 Eigene Forschungsaufenthalte (mit Vorträgen) . . . 319
3.1.4 Qualifikationen 340
3.1.4.1 Studien-, Diplomarbeiten 340
3.1.4.2 Dissertationen, Habilitationen 342
3.2 Gesamtübersicht über die Veröffentlichungen 344
3.2.1 Referierte Literatur 344
3.2.2 Beiträge in Proceedings; Sonstige Veröffentlichungen (außer Preprintreihe des SFB 393) 356
3.2.3 Preprintreihe des SFB 393 359
3.2.4 Technical Reports 366
3.2.5 Beiträge im Internet 367

Kapitel 1

Allgemeiner Teil/ Zusammenfassung

1.1 Wissenschaftliche Entwicklung des Sonderforschungsbereichs

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

> für die numerischen Grundprobleme bei moderner FEM und BEM und ihre schnellen Löser (Projektbereich A);
>
> für die neuen Problemstellungen des Cluster–Computing bei Parallelrechnerkonzeption und –management (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 viele Forschungsleistungen im SFB 393 durch das interdisziplinäre Zusammenwirken aus mehreren Fakultäten hervorgegangen oder wurden durch die Diskussionen im SFB–Seminar besonders befruchtet. Dies bezieht sich vorrangig auf die gemeinsame Bearbeitung der Teilprojekte in D durch Ingenieurkollegen und Mathematiker. Daneben wurde insbesondere die Zusammenarbeit zwischen Kollegen aus der Physik (Projektbereich C) und der Mathematik intensiviert, was sich in weiteren gemeinsamen Projekten der geplanten Fortführung ausdrückt.

Im Projektbereich A wurden hauptsächlich

- adaptive Finite Elemente Techniken in ihrer Gesamtheit untersucht, einschließlich
  - neue Datenstrukturen,
  - anisotrope Fehlerschätzer/Netzsteuerungen,
  - 2D–Implementierung für große Anwendungsklasse,
  - parallele 3D–Implementierung mit Rebalancing.
- ILU- und algebraische Multigrid–Löser für allgemeinere Gleichungssysteme bearbeitet.

Im Projektbereich B wurden Problemstellungen auf dem Gebiet der Kommunikation in Clustersystemen behandelt. Dabei wurden Entwicklungen im gesamten Bereich von der Hardware über die Systemsoftware bis hin zu Kommunikationsbibliotheken gemacht:

- ein neuartiger, hochleistungsfähiger Netzwerkadapter, welcher die Vorteile eines *Distributed Shared Memory* auf Basis von SCI (*Scalable Coherent Interface*) mit *User–Level Block Transfers* der *Virtual Interface Architecture* (VIA) verbindet

- zugehörige Systemsoftware, d.h. Treiber für Linux, welches vorzugsweise als Betriebssystem eingesetzt wird

- eine MPI-Kommunikationsbibliothek, die die Vorzüge der speziellen VIA/SCI Hardware gezielt ausnutzt und gute Leistungen besonders im Bereich der kleinen (einige Bytes) und mittleren (einige Kilobytes) *Message*–Längen erzielen kann

- Management und Aufbau von Clustersystemen, d.h. es wurden Methoden zum Verwalten und Warten von Clustern entwickelt/getestet. Dies betrifft sowohl das Management aus Sicht des Systemadiministrators als auch den Umgang mit dem Cluster durch den Anwender.

Im Projektbereich C wurden

- Modelle von elektronischem Transport, unter anderem die Delokalisierung durch Vielteilchen-Wechselwirkung und die mikroskopische Behandlung bei endlicher Temperatur mit Präzisionsmethoden der numerischen Physik studiert,

- effiziente klassische und quantenmechanische Methoden zur Simulation von korrelierten ungeordneten elektronischen Systemen entwickelt und damit sowohl die Ergodizitäts– als auch die Transporteigenschaften detailiert untersucht,

- verschiedene Optimierungs- und Relaxationsalgorithmen entwickelt bzw. verbessert.

Im Projektbereich D

- ist die numerische Simulation von komplizierten Verformungsgesetzen wesentlich weiterentwickelt worden. Zusätzlich zum Stand zu Beginn dieser Phase sind die "großen Deformationen" behandelbar zusammen mit wesentlich allgemeineren Materialgesetzen und es ist die Grundlage einer adaptiven Arbeitsweise gelegt.

- ist die numerische Simulation von dispersen Mehrphasenströmungen (Fluid–Feststoff–Strömungen) mittels paralleler Euler–Lagrange–Verfahren wesentlich vorangetrieben worden. Durch die interdisziplinäre Zusammenarbeit mit den Teilprojekten aus dem Projektbereich A konnte die Stabilität und Konvergenzgeschwindigkeit der eingesetzten Gleichungslöser deutlich verbessert werden. Für das 3–dimensionale Lagrange–Verfahren wurde eine Parallelisierung mit dynamischer Lastbalancierung entwickelt. Des Weiteren wurden im Berichtszeitraum durch die enge Kopplung von Navier–Stokes– und Lagrange–Löser (einheitliche Implementierung in C, einheitliche Datenstrukturen, globaler Integrationszeitschritt, iterative Kopplung) die Grundlagen für die parallele Simulation transienter Mehrphasenströmungen gelegt.

1.2 Entwicklung der Kooperation im Sonderforschungsbereich

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

Insbesondere die Kooperation zwischen Mathematik und Mechanik in den Teilprojekten D1 und D2 hat zu den dort geschilderten Erfolgen bei der Simulation kontinuumsmechanischer Prozesse beigetragen. Andererseits ergaben sich Impulse für die mathematischen Teilprojekte, die in der Fortführung Beachtung finden werden. So ist etwa die Einbeziehung von Kontaktaufgaben als eine besonders interessante Anwendung der adaptiven Finite Elemente Techniken vorgesehen.

Durch den gewachsenen Bekanntheitsgrad innerhalb der TU Chemnitz, sind weitere Kooperations–Teilprojekte mit Ingenieurkollegen in Vorbereitung.

Im Jahre 2000 hat Frau Prof. G. Rünger ihre Tätigkeit an der Fakultät für Informatik der TU Chemnitz aufgenommen und begann mit einem Nachantrag für 2001 eine Mitarbeit im SFB 393. Neben der Stärkung der informatischen Komponente ist dies ein weiteres Teilprojekt, das in der Fortführung wesentlich durch interdisziplinäre Zusammenarbeit mit den Kollegen der Mathematik und eventuell Physik gekennzeichnet ist.

Eine intensive Zusammenarbeit aller Teilgruppen des SFB 393 und mit dem Universitätsrechenzentrum war zur strategischen Planung eines neuen Parallelrechners für die TU Chemnitz im Jahre 1999 und zur Beschaffung (2000) erforderlich. Genaueres wird hierzu im Kapitel 1.3 ausgesagt.

1.3 Stellung innerhalb der Hochschule

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

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

Der SFB 393 kann auf eine gute Unterstützung von Seiten der TU Chemnitz und des Sächsischen Staatsministeriums für seine bisherigen zwei Antragsphasen zurückblicken. So war der C4-Ruf von Prof. Schneider auf die Professur „Analysis und Numerik Partieller Differentialgleichungen“ mit seiner Bereitschaft zur Integration und Mitarbeit im SFB verknüpft. Gleiches gilt für die Wiederbesetzung einer Analysis–Professur an der Fakultät für Mathematik durch Prof.P.Stollmann, dessen Arbeitsgebiet eng mit den Themen der Physik–Teilprojekte verwandt ist, so dass eine Mitarbeit im SFB in der Fortsetzung geplant ist.

An der Fakultät für Naturwissenschaften ist ebenfalls ein C4–Ruf an Prof. Radons erfolgt, der ebenso zum weiteren Ausbau des SFB 393 dienen kann.

Der SFB 393 bedankt sich auch bei der Verwaltung der TU Chemnitz für die zunehmend konstruktive Zusammenarbeit bei Personalfragen und der Drittmittel–Verwaltungshilfe.

Eine besondere Rolle spielte der SFB 393 bei der Neuanschaffung eines TU–Parallelrechners. Naturgemäß sind die Wissenschaftler des SFB 393 die Hauptnutzer von Parallelrechentechnik, deshalb wurde zur intensiven Vorbereitung dieser Beschaffung eine Arbeitsgruppe aus Mitarbeitern des Universitätsrechenzentrums und des SFB 393 gegründet, die sich seit Beginn des Jahres 1999 regelmäßig traf, um eine Ersatzbeschaffung des bis dahin verwendeten Parsytec–GC 128 vorzunehmen. Die wissenschaftliche Leitung hatten Prof. U. Hübner (URZ) und Prof. A. Meyer (SFB 393), die Gesamtkoordinierung lag in den Händen von Dr. Riedel (URZ). Von Seiten des SFB arbeiteten aus jeder Teilgruppe ein Wissenschaftler mit (Dr. Pester, Prof. Rehm, Dr.Blaudeck, Dr. Frank).

Im Jahre 1999 wurde vorrangig eine strategische Entscheidung zum Prozessortyp, Typ der Kommunikationsverbindungen und Gesamtgrößenordnung herbeigeführt, die wesentlich auf Benchmark–Rechnungen von Dr. Pester beruhten. Mit der Entscheidung zum "Cluster-Computing" wird die Bezeichnung **CLIC** für Chemnitzer Linux Cluster gebraucht. Als im August 1999 der Parsytec–GC durch einen Brand unbrauchbar wurde, war diese Ersatzbeschaffung umso dringlicher erforderlich und konnte ab Januar 2000 in die Tat umgesetzt werden. Hauptanliegen der endgültigen Entscheidung zu einem 528–PentiumIII–Cluster mit Fast–Ethernet–Switches war die Tatsache, daß es einen recht großen Einzelnutzerkreis gibt (allein im SFB etwa 30 bis 40), der möglichst ungestört einen Subcluster mit nicht zuwenig Prozessoren für eigene Entwicklungen/Testrechnungen erhalten muß. Dies war der wesentliche Engpaß beim vorangegangenen Parallelrechner.

Deshalb wurde aus Preisgründen einer hohen Prozessorzahl der Vorrang vor alternativen Kommunikationsnetzen gegeben. Bei der Indienststellung von August bis Oktober 2000 war wieder der SFB 393 als wichtiger Erkenntnisträger für Parallel–Benchmarks beteiligt. Insbesondere Dr. Pester ist es zu verdanken, daß der nötige Dongarra–Benchmark auf 484 Prozessoren den Platz 126 der aktuellen Top–500–Liste erbrachte.

Der SFB 393 dankt ausdrücklich den beteiligten Mitarbeitern des URZ der TU Chemnitz für ihr Engagement, das letztlich zum erfolgreichen Abschluß dieser nicht alltäglichen Installation führte.

1.4 Förderung der Lehre und des wissenschaftlichen Nachwuchses

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

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

in der Mathematik:	9 Promotionen (7 verteidigt, 2 stehen vor Abschluß) und 3 Habilitationen,
in der Physik:	9 Promotionen (7 verteidigt, 2 stehen vor Abschluß) und 3 Habilitationen,
im Maschinenbau:	3 Promotionen (2 verteidigt, 1 eingereicht) und 1 Habilitation.

Der unmittelbare Einfluß auf die Lehre ist vor allem durch die Tätigkeiten der studentischen Hilfskräfte und durch Diplom- und Jahresarbeitsthemen 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

Teilprojekt A3

2.1 Teilprojekt A3

Parallele Auflösungsstrategien für 3D-Finite-Elemente-Gleichungssysteme durch effektive Vorkonditionierung.

2.1.1 Antragsteller

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

Doz. Dr. Michael Jung, TU Chemnitz, Professur Numerik und Analysis partieller Differentialgleichungen (bis 2/2000), Dozentur für Wissenschaftliches Rechnen, Institut für Wissenschaftliches Rechnen, TU Dresden (seit 3/2000)

2.1.2 Projektbearbeiter

PD Dr. Thomas Apel, Professur Numerische Analysis, Grundausstattung

Dr. Gerd Kunert, Professur Wissenschaftliches Rechnen, Grundausstattung

Dr. Michael Theß, Professur Numerische Analysis, Grundausstattung, bis 8/98

Dipl.-Math. Sven Beuchler, Professur Numerische Analysis, teils Grundausstattung, teils Projektstelle, seit 1/2000

Prof. Dr. Sergey V. Nepomnyaschikh, Gast und Gastprofessur (Gästeprogramm) von 2/1999 bis 9/1999

Dr. Gerhard Globisch, Projektstelle bis 8/1999

Dipl.-Math. Uwe Reichel, Projektstelle bis 12/1999

Dipl.-Math. Mario Goppold, Projektstelle von 9/1999 bis 12/1999

Dipl.-Math. Falk Bräuer, Projektstelle von 9/1999 bis 12/1999

Dr. Uwe Schrader, Projektstelle von 1/2000 bis 6/2000

Dr. Frank Milde, Projektstelle von 7/2000 bis 12/2000

Dipl.-Math. Torsten Steidten, Projektstelle seit 11/2000

Dipl.-Math. techn. Kornelia Pietsch, Projektstelle seit 1/2001

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Die Computersimulation physikalisch-technischer Prozesse erfordert den Übergang vom kontinuierlichen Modell (Randwertproblem) zu einem diskreten Ersatzmodell. Als Diskretisierungsverfahren kommt in vielen Fällen die Finite-Elemente-Methode zum Einsatz. Im Ergebnis des Diskretisierungsprozesses entstehen im Allgemeinen sehr groß dimensionierte (nicht)lineare Gleichungssysteme. Bei einer gleichmäßigen Verkleinerung der Diskretisierungsschrittweite wächst die Dimension dieser Gleichungssysteme stark an, im 3D-Fall zum Beispiel um das Achtfache bei Halbierung der Schrittweite. Folglich ist selbst bei den heute zur Verfügung stehenden leistungsfähigen Computern die Speicherkapazität schon bei relativ groben gleichmäßigen Diskretisierungen ausgeschöpft. Somit besteht die zwingende Notwendigkeit, adaptive, d. h. lösungsangepasste, Diskretisierungen einzusetzen.

Im Rahmen dieses Teilprojekts sollten effiziente parallele adaptive Lösungsstrategien für elliptische Randwertprobleme entwickelt werden. Im einzelnen sollten die folgenden Teilaufgaben bearbeitet werden:

Adaptive FEM – Software. Die bereits begonnenen Arbeiten zur Entwicklung paralleler Multilevel-Löser bei adaptiven isotropen Finite-Elemente-Diskretisierungen sollten fortgesetzt werden. Insbesondere waren Fragestellungen zur dynamischen Lastbalancierung und zur Steuerung der adaptiven Verfahren zu klären.

Vorkonditionierung bei isotropen FE-Diskretisierungen. Bereits begonnene Arbeiten zur Konstruktion von Vorkonditionierern auf der Basis des Fictitious-Space-Lemmas sollten fortgesetzt werden. Insbesondere sollten diese Techniken auf lokal verfeinerten Netzen eingesetzt werden. Weiterhin sollte das Konvergenzverhalten bekannter Multilevel-Techniken auf graduierten Netzen analysiert werden.

Anisotropie: Fehlerschätzer und schnelle Löser. Adäquate Diskretisierungen bei Problemen in Gebieten mit einspringenden Kanten und bei singulär gestörten Problemen basieren auf anisotropen FE-Netzen. Wie Voruntersuchungen gezeigt hatten, sind die üblichen Fehlerschätzer und Multilevel-Löser nicht robust bezüglich der Anisotropien. Deshalb sollten für die bei derartigen Diskretisierungen entstehenden linearen Gleichungssysteme robuste Mehrgitter- und BPX-artige Algorithmen entwickelt werden. Besonderes Augenmerk sollte ebenfalls auf die anisotrope Steuerung adaptiver Verfahren gelegt werden.

Löser für Platten- und Schalenprobleme. Die Arbeiten zu schnellen Auflösungsmethoden für die Gleichungssysteme, die bei der FE-Diskretisierung des Kirchhoffschen Plattenmodells und des Koiterschen Schalenmodells entstehen, sollten fortgesetzt werden.

p- und hp-Methoden. Eine Möglichkeit zur Überwindung von *Locking-Effekten* bei Schalenproblemen besteht in der Anwendung von p bzw. hp-Versionen der Finite-Elemente-Methode. Es sollten erste Untersuchungen bezüglich effizienter Multilevel-Löser für einfache Modellprobleme durchgeführt werden.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

2.3.1 Teilaufgabe Adaptive FEM – Experimentalsoftware

Ein wesentliches Ziel dieser Teilaufgabe bestand im Studium des Gesamtverhaltens von adaptiver Technologie. Dies beinhaltet für den 2D-Fall hauptsächlich die Gesamtgestaltung eines „cascade"-artigen Lösungsprozesses (neue Datenstrukturen, möglichst großer Anwendungsbereich, effizient eingebettete Löser). Im 3D-Fall spielte die Parallelisierung des Gesamtprozesses die Hauptrolle, die wichtigsten anderen Merkmale wurden aus dem 2D-Fall übernommen. Wesentliche Arbeiten waren das Auffinden und der Einbau von Partitionierungs-Techniken für Lastabgabe, Disbalance-Messungen und Rebalancing-Techniken.

Insgesamt sind im Berichtszeitraum drei Programmrealisierungen entstanden, die adaptive 2D- und 3D-Rechnungen ausführen. Die Unterscheidung resultiert aus der Tatsache, dass die 3D-Rechnungen auch im adaptiven Fall Parallelrechneranwendungen bleiben, während eine 2D-adaptive Rechnung (zumindest im derzeitigen Leistungsumfang) dies nicht erfordert, wie aus den Beispielergebnissen in 2.4. hervorgeht. Trotzdem basieren beide Realisierungen auf gleichen Grundbibliotheken, die teilweise für neue Datenstrukturen (anders als bei gleichmäßiger Vernetzung) erweitert wurden. Wesentliche Kennzeichen dieser neuen Programmpakete sind:

SPC-PM-2Ad (2D-Programm – Adaptive FEM)

(a) neue Datenstrukturen (Knoten / Kantenbaum / Elementstruktur);
(b) realisiert Reaktions-Diffusions-Gleichungen und lineare Elastizität;
(c) Rechnung in x, y- oder in r, z-(Zylinder-)Koordinaten;
(d) Dreiecks-/Vierecks-, lineare/quadratische Elemente;
(e) „cascade“-artige Lösergestaltung;
(f) Fehlerschätzer zur Netzsteuerung;
(g) Tests für anisotrope Netze möglich.

Da die Rechenzeiten für eine FE-Simulation bis zu einer Vernetzung von 50 000 ... 100 000 Freiheitsgraden (was höchste Genauigkeiten liefert und die höchstmögliche noch speicherbare Feinheit in Teilen des Gebietes erzeugt) auf modernen Pentium III-Prozessoren bei wenigen Sekunden (3 ... 5 s) liegen, wurde eine Parallelisierung nicht vorgesehen.

SPC-PM-3AdH (3D-Programm – Adaptive FEM – Hexaeder)

Eigenschaften wie oben, wobei (d) durch

(d') 8-, 20- und 27-Knoten-Hexaederelemente

ersetzt wird.

SPC-PM-3AdT (3D-Programm – Adaptive FEM – Tetraeder)

Zusätzlich zu den Eigenschaften (a), (b),

(d") 4- und 10-Knoten-Tetraederelemente,

sowie (e) bis (g) von oben ist hier insbesondere die parallele Implementierung vorrangig gewesen, d. h., zusätzliche Eigenschaften sind:

(h) Start auf *einem* Prozessor, Hinzunahme weiterer bei Bedarf;
(i) Abspalten von Arbeitslast eines Prozessors (in Vielfachen von „Hauptnetz-Elementen“) und Auslagern auf wenig oder unbelastete Prozessoren;
(j) Kontrolle der Disbalance, wenn alle verfügbaren Prozessoren mitarbeiten;
(k) Rebalancierung, wenn nötig.

2.3.2 Teilaufgabe Vorkonditionierung bei isotropen Finite-Elemente-Diskretisierungen

Für Randwertprobleme in Gebieten mit einer komplizierten Geometrie oder mit einer komplizierten Geometrie von inneren Materialgrenzen ist es unmöglich, eine Hierarchie von Vernetzungen mit einem hinreichend groben gröbsten Gitter zu erzeugen. Die Anwendung von klassischen Mehrgitter- und BPX-artigen Algorithmen führt dann nicht zu der von Multilevel-Verfahren erwarteten Effizienz. Um dieses Problem zu umgehen, sind aus der Literatur verschiedene Zugänge bekannt (siehe z. B. [BX94, CS93, KY94, Nep95, Xu96]).

Bereits im vorangangenen Berichtszeitraum wurden unter Nutzung des Fictitious Space Lemmas und Multilevel-Zerlegungen von Funktionen auf hierarchischen Gittern effiziente Löser für die oben erwähnten Problemklassen beschrieben und analysiert. Insbesondere konnten mittels dieser Vorgehensweise auch effiziente Multilevel-Vorkonditionierer für FE-Gleichungssysteme konstruiert werden, die aus FE-Diskretisierungen mit unstrukturierten Netzen ohne Netzhierarchie resultieren [GN98, Glo97]. Eine der Grundideen bei der Konstruktion dieser Vorkonditionierer besteht darin, dass das betrachtete Gebiet Ω in ein Rechteck eingebettet wird. Für dieses Rechteck wird eine Folge von regelmäßigen Rechtecksgittern generiert, wobei für die Schrittweite im feinsten dieser Gitter $h \leq \frac{1}{2}\sqrt{2}d$ gilt. Dabei ist d der maximale Durchmesser eines Kreises, der genau einen Knoten der Vernetzung des Gebietes Ω enthält. Der Vorkonditionierer ergibt sich dann durch Abbildungen zwischen den Knoten der Vernetzung des Gebietes Ω und Knoten im erzeugten feinsten Rechtecksgitter sowie einem Multilevel-Zugang, der auf der Folge der Rechtecksgitter basiert. Für unstrukturierte Netze mit lokalen Netzverfeinerungen führt die obige Definition der Schrittweite im feinsten Rechtecksgitter zu extrem feinen Gittern und erfordert folglich sehr viel Speicherplatz und Rechenzeit bei der Anwendung des Vorkonditionierers. Deshalb wurde in diesem Berichtszeitraum untersucht, wie man für lokal verfeinerte unstrukturierte Netze effiziente Vorkonditionierer konstruieren kann.

Weiterhin wurden Multilevel-Vorkonditionierungsoperatoren auf lokal modifizierten Gittern entwickelt. Hierbei wird das zu vernetzende Gebiet Ω in ein Rechteck oder Dreieck eingebettet und für dieses zunächst eine Folge regelmäßiger Grundgitter generiert. Anschließend erfolgt eine lokale Modifikation des Grundgitters in der Umgebung des Gebietsrandes $\partial\Omega$, so dass man eine Vernetzung des Gebietes Ω erhält. Die konstruierten Vorkonditionierer nutzen wieder Abbildungen zwischen den Knoten der Vernetzung des Gebietes Ω und Knoten des Grundgitters sowie einen Multilevel-Vorkonditionierer auf der Folge der Grundgitter.

2.3.3 Teilaufgabe Anisotropie: Fehlerschätzer und schnelle Löser

Innerhalb dieser Teilaufgabe sind die folgenden Forschungsaufgaben bearbeitet worden.

A priori Fehlerabschätzungen

Wie in der Einleitung bereits festgestellt wurde, besteht bei der Simulation komplexer technischer Prozesse die zwingende Notwendigkeit, lösungsangepasste Diskretisierungen einzusetzen. Wenn die Lösung der betrachten Simulationsaufgabe anisotropes Verhalten aufweist, dann ist es eine natürliche Idee, dies auch in der Finite-Elemente-Approximation widerzuspiegeln. Vor einer Computersimulation mit neuen Diskretisierungen, die oft wesentlichen Einfluss auf die Datenstrukturen besitzen, sollte an wohldefinierten Modellproblemen der mögliche Erfolg bewiesen werden. Im Fall von Differentialgleichungsmodellen besteht die Aufgabe in der *a priori* Abschätzung des Diskretisierungsfehlers in geeigneten Normen.

A posteriori Fehlerschätzer

Seit dem Ende der 70-er Jahre werden Fehlerschätzer und darauf aufbauende adaptive Finite-Elemente-Verfahren breit untersucht. Jedoch werden in den meisten numerisch-analytischen Arbeiten nur isotrope Netze betrachtet. Eine rigorose Analysis für anisotrope Netze findet man kaum in der Literatur. Daher besteht die Aufgabe, Fehlerschätzer für anisotrope Dreiecks- und Tetraedernetze zu konstruieren und analytisch zu untersuchen. Dabei sollen verschiedene Differentialgleichungen, verschiedene Typen von Fehlerschätzern und verschiedene Normen des Fehlers betrachtet werden.

In der vorhergehenden Antragsperiode wurden erste Fehlerschätzer hergeleitet und untersucht, die auch für anisotrope FEM-Netze geeignet sind [Kun97]. Dazu wurden erste Beschreibungsmöglichkeiten der anisotropen Aufgabenstellungen vorgeschlagen sowie grundlegende Hilfsmittel zur Analyse bereitgestellt. Erste numerische Tests waren für zweidimensionale (2D) Gebiete vorhanden und vereinzelt auch in 3D.

Im Berichtszeitraum stand nun die Aufgabe, diese vorhandenen ersten Ansätze zu vervollkommnen, zu verbessern und eine umfassende Theorie aufzubauen. Es sollte ein tieferes Verständnis anisotroper Fehlerschätzung erreicht werden. Voraussetzungen und Grenzen der Theorie sollten ausgelotet werden. Die einzelnen *Teilaufgaben* können wie folgt untergliedert werden:

- Die bekannten Fehlerschätzer sollten verbessert und weitere Schätzer hergeleitet und analysiert werden. Es sollten Zusammenhänge zwischen den einzelnen Fehlerschätzern aufgedeckt werden (z.B. zwischen Residuenschätzern und Schätzern basierend auf lokalen Problemen).

- Es deutete sich an, dass die Beziehung zwischen einem anisotropen Netz und der anisotropen Lösung eine zentrale Rolle spielt. Hier waren analytische und experimentelle Zugänge gesucht.

- Alle theoretischen Erkenntnisse sollten implementiert und numerisch getestet werden. Der Schwerpunkt wurde in einer parallelen 3D Realisierung gesehen.

Die verwendeten *Methoden* lassen sich kurz umreißen:

- Bekannte Grundprinzipien und Vorgehensweisen sowohl von isotropen Vorbildern als auch von eigenen anisotropen Analysen sollten genutzt werden, um neue Fehlerschätzer und Hilfsmittel herzuleiten und zu untersuchen.
- Die Vorhersagen der Theorie sollten stets im numerischen Experiment überprüft werden. Die theoretischen Grenzen sollten am Experiment ausgelotet werden (z.B. Fehlerschätzer auf Basis eines lokalen Neumann-Problems). Alle Implementierungen sollten für einen Parallelrechner zugeschnitten werden.

Diese relativ allgemeinen Prinzipien sollen jedoch nicht darüber hinwegtäuschen, dass auch bei scheinbar klaren Verallgemeinerungen immer wieder neue, unerwartete Effekte zutage traten, die zu einer Bereicherung der Theorie anisotroper Fehlerschätzung führten (siehe auch Ergebnisse).

Netzadaption

In einem adaptiven Algorithmus wird aus Informationen, die aus einer vorhergehenden Näherungslösung abgeleitet werden, ein neues Finite-Elemente-Netz konstruiert. Bei anisotropen Vernetzungen benötigt man hierzu nicht nur eine Information über die lokale Elementgröße, sondern auch über das anzustrebende Streckungsverhältnis (*aspect ratio*) und die Ausrichtung der Elemente. In allen uns bekannten Arbeitsgruppen, die sich mit diesem Thema beschäftigen, werden Streckungsverhältnis und Streckungsrichtung durch die Eigenwerte und Eigenvektoren der Hesse-Matrix der Näherungslösung (bzw. einer Komponente davon) bestimmt. Zusätzlich soll hier die alternative Idee untersucht werden, die benötigte Information aus Schätzungen des Gradienten des Approximationsfehlers zu extrahieren.

Aus der Literatur sind im wesentlichen drei Strategien zur Generierung des neuen Netzes bekannt: Neuvernetzung unter Ausnutzung der gewonnenen lokalen Informationen, anisotrope Teilung der Elemente des vorhandenen Netzes und Knotenverschiebung (r-Version der FEM). Es ist außerhalb des Rahmens dieses Berichts, diese Strategien genauer zu diskutieren und zu werten. Die gewonnene Einsicht aus der Literatur ist, dass jede dieser Strategien für dreidimensionale Aufgaben eine sehr komplexe Programmieraufgabe ist. Deshalb sollte zunächst nur ein einfaches Testprogramm für zweidimensionale Modellprobleme erstellt werden. Die Umsetzung der durch die bisherigen Untersuchungen untermauerten Ideen im Rahmen der parallelen 3D-Programmentwicklungen soll in der nächsten Antragsphase erfolgen.

Vorkonditionierung

Zur Auflösung der entstehenden Finite-Elemente-Gleichungssysteme werden heute typischerweise Varianten des Verfahrens der konjugierten Gradienten mit Vorkonditionierung (zum Beispiel BPX-artige Vorkonditionierer oder Multigrid-Verfahren) genutzt. Theoretische Resultate bezüglich der Effektivität dieser Verfahren (zum Beispiel der Konditionszahl des vorkonditionierten Systems) wurden bisher nicht für die hier betrachteten anisotropen Diskretisierungen, z. B. für Modellprobleme in Gebieten mit Kanten, betrachtet.

Im Arbeits- und Ergebnisbericht 1996 – 1998 des SFB 393, Teilprojekt A1, mussten wir feststellen, dass das CG-Verfahrens mit BPX-Vorkonditionierer seine Optimalitätseigenschaften verliert, wenn anisotrope Finite-Elemente-Netze betrachtet werden. Während die Iterationszahlen bei isotropen Netzen und wachsender Anzahl von Knotenpunkten beschränkt bleiben, haben wir ein unbeschränktes Wachsen bei in Kantenumgebung anisotrop graduell verfeinerten Netzen festgestellt. Wir hatten Ideen geäußert, wie die Methoden weiter verbessert werden könnten. Ein entsprechend angepasster Vorkonditionierer sollte im Rahmen dieser Teilaufgabe entwickelt werden.

2.3.4 Teilaufgabe Löser für Platten- und Schalenprobleme

Der Beginn der Bearbeitungsphase war durch die Fertigstellung der Dissertationsschrift von M. Theß [The99] gekennzeichnet, in der vorrangig schnelle Löser für Schalenprobleme untersucht wurden, die mit Viereckselementen vernetzt sind. Grundlage war die Kirchhoffsche Plattentheorie in Anwendung auf Schalen, also das Koitersche Schalenmodell. Es wurden Diskretisierungen mit

Bogner-Fox-Schmidt-Elementen	(konform) und
Adini-Elementen	(nichtkonform)

betrachtet. Schon im Bericht zum Teilprojekt A3 für die Jahre 1996–98 sind die Ergebnisse zu schnellen BPX-Lösern für diese Problemklasse dargelegt worden. Dies sollte nunmehr durch den Vergleich mit

- DD-Lösern und Multigrid-Techniken für die Teilgebietsmatrizen und die Fortsetzungsoperatoren,
- globalen Multigrid-Techniken

komplettiert werden.

In der weiteren Folge sollte zu Dreiecksvernetzungen für Platten- und Schalenprobleme übergegangen werden. Ziel war die Konstruktion schneller Löser für das DKT-Element.

2.3.5 Teilaufgabe p- und hp-Methoden

Zur Lösung von Finite-Elemente-Gleichungssystemen, die bei der p- bzw. hp-Version entstehen, sind bisher nur wenige schnelle Auflösungverfahren bekannt. Im Berichtszeitraum bestand das Ziel darin, für Modellprobleme schnelle Löser zu entwickeln. Als Modellproblem wurde das Randwertproblem

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

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

$$\begin{pmatrix} K_{\mathrm{V}} & K_{\mathrm{VE}} & K_{\mathrm{VI}} \\ K_{\mathrm{EV}} & K_{\mathrm{E}} & K_{\mathrm{EI}} \\ K_{\mathrm{IV}} & K_{\mathrm{IE}} & K_{\mathrm{I}} \end{pmatrix} . \tag{2.1}$$

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

$$K_{1,\mathrm{d}} = \begin{pmatrix} K_{\mathrm{V}} & 0 \\ 0 & K^{(1)} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad K^{(1)} = \begin{pmatrix} K_{\mathrm{E}} & K_{\mathrm{EI}} \\ K_{\mathrm{IE}} & K_{\mathrm{I}} \end{pmatrix}$$

betrachtet, für die die Spektraläquivalenzungleichungen

$$\frac{c}{1+\log p} K_{1,\mathrm{d}} \leq K \leq 2K_{1,\mathrm{d}}$$

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

$$K^{(1)} = \begin{pmatrix} I_{\mathrm{E}} & K_{\mathrm{EI}}K_{\mathrm{I}}^{-1} \\ 0 & I_{\mathrm{I}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{\mathrm{E}} & 0 \\ 0 & K_{\mathrm{I}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{\mathrm{E}} & 0 \\ K_{\mathrm{I}}^{-1}K_{\mathrm{IE}} & I_{\mathrm{I}} \end{pmatrix}$$

der Matrix $K^{(1)}$ mit dem Schurkomplement $S_{\mathrm{E}} = K_{\mathrm{E}} - K_{\mathrm{EI}}K_{\mathrm{I}}^{-1}K_{\mathrm{IE}}$. Zur Konstruktion eines Vorkonditionierers der Matrix $K^{(1)}$ unter Nutzung der obigen Faktorisierung benötigt man einen Vorkonditionierer für das Schurkomplement, einen Fortsetzungsoperator von den Kanten ins Innere der Rechtecke und einen Vorkonditionierer für die Matrix K_{I}. In [IK95b] wurden drei Vorkonditionierer $C_{\mathrm{i,S}}$, $i = 1, 2, 3$, für das *Schurkomplement* S_{E} vorgeschlagen. Im ungünstigsten Fall ist die Konditionszahl $\kappa(C_{\mathrm{i,S}}^{-1}S_{\mathrm{E}})$ in der Größenordnung von $\mathcal{O}(1+\log^2 p)$. Die Lösung eines Gleichungssystems der Gestalt $C_{\mathrm{i,S}}x = y$ erfordert $\mathcal{O}(p^2)$ arithmetische Operationen.

In [JK97] wurden zur Matrix K_{I} der inneren Probleme spektraläquivalente Vorkonditionierer vorgeschlagen, die $\mathcal{O}(p^2)$ Nicht-Null-Einträge haben. Im Fall von Rechteckselementen hat die FE-Steifigkeitsmatrix ebenfalls $\mathcal{O}(p^2)$ Nicht-Null-Elemente. Die in [JK97] betrachteten Algorithmen zur Lösung der Vorkonditionierungsgleichungssysteme erfordern jedoch $\mathcal{O}(p^3)$ arithmetische Operationen. Daher war es das Ziel, Vorkonditionierer für K_{I} zu finden, so dass die entsprechenden Vorkonditionierungsgleichungssysteme mit einem Aufwand von $\mathcal{O}(p^2)$ Operationen gelöst werden können.

Literaturverzeichnis zu 2.3 (eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

[BX94] R. E. Bank und J. Xu. The hierarchical basis multigrid method and incomplete LU decomposition. In D. E. Keyes und J. Xu, Hrsg., *Domain decomposition for PDEs*, volume 180 of *Contemporary Mathematics*, Seiten 163–174, 1994.

[CS93] T. F. Chan und B. Smith. Domain decomposition and multigrid algorithms for elliptic problems on unstructured meshes. CAM Report 93–42, Department of Mathematics, University of California, Los Angeles, 1993.

[GN98] G. Globisch und S. V. Nepomnyaschikh. The hierarchical preconditioning on unstructured grids. *Computing*, 61(4):307–330, 1998.

[Glo97] G. Globisch. The hierarchical preconditioning having unstructured threedimensional grid. Preprint SFB393/97-25, TU Chemnitz, 1997.

[IK95a] S. A. Ivanov und V. G. Korneev. On the preconditioning in the domain decomposition technique for the p-version finite element method. Part I. Preprint SPC 95-35, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, 1995.

[IK95b] S. A. Ivanov und V. G. Korneev. On the preconditioning in the domain decomposition technique for the p-version finite element method. Part II. Preprint SPC 95-36, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, 1995.

[JK97] S. Jensen und V. G. Korneev. On domain decomposition preconditioning in the hierarchical p-version of the finite element method. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 150(1-4):215–238, 1997.

[KY94] R. Kornhuber und H. Yserentant. Multilevel methods for elliptic problems on domains not resolved by the coarse grid. In D. E. Keyes und J. Xu, Hrsg., *Domain decomposition for PDEs*, volume 180 of *Contemporary Mathematics*, Seiten 49–60, 1994.

[Kun97] G. Kunert. Error estimation for anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes. Preprint SFB393/97_16, TU Chemnitz, 1997.

[Nep95] S. V. Nepomnyaschikh. Fictitious space method on unstructured meshes. *East–West J. Numer. Math.*, 3(1):71–79, 1995.

[Xu96] J. Xu. The auxiliary space method and optimal multigrid preconditioning techniques for unstructured grids. *Computing*, 56:215–235, 1996.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe Adaptive FEM – Experimentalsoftware

SPC-PM-2Ad (2D-Programm – Adaptive FEM)

Wesentlicher Hauptzweck der adaptiven 2D-Implementierung war der Nachweis einer genügend sicheren Netzsteuerung gekoppelt mit gleichmäßigem Abfallen des (geschätzten) Fehlers. Dabei wurde auf eine möglichst große Klasse von Beispielanwendungen geachtet. Grundlegende Arbeitsweise ist die folgende:

Eingabe des Startnetzes mit Probleminformation

↓

Verfeinerung abhängig von Markierungen der Kanten/Elemente bzw. Elementeigenschaften

↓

Generieren der neuen Element-Steifigkeitsmatrizen und rechten Seiten

Assemblieren der rechten Seite des Gleichungssystems

↓

Startvektoren - Behandlung

PCG-Solver mit hierarchischem Vorkonditionierer und Unterraumprojektion

↓

Grafik-Ausgabemöglichkeit inklusive Postprocessing für Gradienten/Verzerrungen

↓

Fehlerschätzer, Setzen von Markierungen

↓ $\otimes$

An der Programmstelle $\otimes$ kann der Nutzer eventuell eine nochmalige Lösung des Gleichungssystems ohne weitere Netzverfeinerung verlangen (Genauigkeitssteigerung).

Der **Leistungsumfang** dieses Programms ist zur Zeit die Lösung einer (eventuell anisotropen)

a) Reaktions-Diffusionsgleichung

$$-a_{11}\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x_1^2} - a_{22}\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x_2^2} + c\mathbf{u} = f$$

mit stückweise konstanten Funktionen a_{ii}, c, f (konstant pro Grobelement des Eingabefiles; eine variable Definition $a_{ii}(x)$, $c(x)$, $f(x)$ ist durch Anhängen von Unterroutinen möglich),

b) Lamé-Gleichung der linearen Elastizität.

Beide Gleichungen ergeben die Bilinearform der schwachen Formulierung:

$$a(\mathbf{u},\mathbf{v}) = \int_\Omega [B(\nabla)\mathbf{v}]^T \, C \, [B(\nabla)\mathbf{u}] \, \mathrm{d}\Omega \quad ,$$

wobei im Fall a) $\mathbf{u},\mathbf{v}$ skalare Funktionen, $B(x) = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ 1 \end{pmatrix}$ und $C = \mathrm{diag}\,(a_{11}, a_{22}, c)$

sind. Im Fall b) stehen $\mathbf{u}, \mathbf{v}$ für Verschiebungsvektoren, deshalb ist

$$B(x) = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ x_1 & 0 \\ 0 & x_2 \\ x_2 & x_1 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \begin{cases} \alpha = 0 & \text{bei} \quad x, y\text{-Koordinaten,} \\ \alpha = \frac{1}{r} & \text{bei} \quad r, z\text{-Koordinaten,} \end{cases}$$

($B(\nabla)\mathbf{u}$ sind die Komponenten des Verzerrungstensors in Vektorschreibweise) und C die Materialmatrix mit den Laméкoeffizienten μ und λ, die wieder in Teilgebieten konstant sind. Im Falle von Zylinderkoordinaten ist $\mathrm{d}\Omega = r\mathrm{d}r\, \mathrm{d}z$, sonst $\mathrm{d}\Omega = \mathrm{d}x\, \mathrm{d}y$.

Um verschiedene Verfeinerungstechniken bei Dreiecken zu vergleichen, wurden 3 Strategien implementiert:

rg:	„rot–grün“	vorrangig „rote“ Verfeinerung, Netzabschluss durch „grüne“ nach Bänsch [Bän91];
Bg:	„grün“	ausschließlich „grüne“ Dreiecke nach Bänsch [Bän91];
hn:	„hanging nodes“	ausschließlich „rote“ Verfeinerung, kein Netzabschluss, sondern Nutzung von „hanging nodes“ (maximal eine Teilung pro Kante). Implementierung: Projektion im PCG garantiert Ergebnisse im konformen Teilraum.

Bei Vierecken werden ausschließlich „hanging nodes“ verwendet und die Verfeinerung basiert auf Halbierungen statt Viertelungen, um anisotrope Netze zu ermöglichen. Zusätzlich gibt es hier eine Anisotropiebeschränkung: ein Element wird automatisch halbiert, wenn sein Streckungsverhältnis (*aspect ratio*) über einer (Input-) Grenze liegt. Dies erlaubt extrem einfache Startnetze mit eventuell vollkommen unüblichen geometriebedingten, aber nicht der Lösung angepassten anisotropen Anfangsvierecken.

Die **Datenstruktur** zur Realisierung der Adaptivität wurde so gewählt, dass alle Grundschritte des o.a. Algorithmus auf natürliche Weise implementiert werden können, d. h. keine zusätzlichen Informationen erfordern, als die für die hierarchische Vernetzung vorhandenen. Deshalb wurde die Datenstruktur „Edge“ (der Kantenbaum) als Hierarchie von 3-Knoten-Kanten aufgebaut (Anfangs-, End-, Mittelknoten). Hiermit wird zum einen die automatisch richtige Geometrieverfeinerung bei gekrümmten Kanten erhalten, zum anderen enthält der Kantenbaum sofort die hierarchische Knoteninformation für den hierarchischen Vorkonditionierer (oder alle Multigrid-Varianten). Die Datenstruktur „Element“ ist ein 1D-Array von Strukturen der Form

(Kantennummern, Materialinfo, Knotennr., Elementmatrix, Element-rechte-Seite)

Hiermit wird zum einen ein Assemblieren einer Gesamtmatrix eingespart (nur *neue* Elemente sind zu generieren). Bei der Matrixmultiplikation im PCG wird elementweise vorgegangen. Von der kompakten Speicherung aller Informationen hierzu (Knotennummern und Matrix) kann man ein gutes Cache-Verhalten erwarten.

Bei der Gestaltung des **PCG-Lösers** ist besonders die von A. Meyer entwickelte Unterraum-Technik [Mey99c, Mey99a] erwähnenswert: Ohne Rücksicht auf Dirichlet-Randbedingungen bzw. auf hängende Knoten wird das $N \times N$-Gleichungssystem

$$K\underline{u} = \underline{b}$$

aufgestellt, dessen Lösung aber in einem Teilraum $im\, P$ des $\mathbf{R}^N$ gesucht ist, der z. B. durch die Erfüllung von Randbedingungen[1] und Werte an hängenden Knoten abhängig von „Vaterwerten" charakterisiert wird. Dies wird durch den Einbau des Projektors P ausschließlich im Vorkonditionierungsschritt des PCG erreicht, der zu

$$\underline{w} := PC^{-1}P^T\underline{r}$$

zu ändern ist und somit dem PCG im Teilraum zur Lösung von

$$P^TKP\underline{u} = P^T\underline{b}$$

entspricht [Mey01].

Die hohe Effizienz dieser Vorgehensweise soll exemplarisch durch folgende beiden Beispiele (siehe auch die Tabellen und Abbildungen) illustriert werden. Diese und weitere Beispiele kann man unter

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

finden.

Das erste Beispiel zeigt an den springenden Randbedingungen und Materialgrenzen erwartungsgemäß eine stärkere Verfeinerung. Erwartet man einen Fehlerabfall est.Err.$^2 = CN^{-1}$, dann erhält man in der Spalte „est.Err.$^2 * N$" den Wert für C. Eine Verkleinerung dieses Wertes bedeutet superlineare Konvergenz.

Der benutzte (besonders billige) Vorkonditionierer mit hierarchischen Basen lässt Iterationszahlen wie $\mathcal{O}(\ln N)$ erwarten, die bei solch „einfachen" Problemen durch die „cascade"-artige Vorgehensweise auf fast konstante Werte gedämpft werden. Dadurch beträgt der Zeitaufwand zum Lösen des linearen Gleichungssystems auch bei etwa 10^5 Knoten nur rund 2.5 Sekunden.

Das zweite Beispiel zeigt ein typisches adaptives Verfeinerungsverhalten an den einspringenden Kanten. An diesen Stellen ist der Diskretisierungsfehler durch die Verzerrungen bei uniformer Verfeinerung besonders groß. Die angegebene Tabelle zeigt eindrucksvoll das starke Sinken des Fehlers schon bei relativ geringer Verfeinerung. Die großen Absolutwerte des Fehlers sind durch den E-Modul bedingt.

Für den Löser stellt Beispiel 2 eine Extremsituation dar. Es gibt keinerlei Dirichlet-Randbedingungen, damit eine singuläre Systemmatrix, deshalb konnte kein Grobgitterlöser in der Vorkonditionierung genutzt werden. Dies erklärt die recht hohen Iterationszahlen, ohne aber das Verhalten $\mathcal{O}(\ln N)$ zu verletzen.

Die mit „Assem" überschriebenen Zeiten bezeichnen den Aufwand für die Generierung der **jeweils neuen** Elementmatrizen und Assemblierung der rechten Seite und Hauptdiagonale der Systemmatrix, weshalb sie wesentlich unter den Löserzeiten liegen.

[1] bei inhomogenen Dirichlet-Randbedingungen eigentlich eine lineare Mannigfaltigkeit, deshalb muss in „Startvektoren-Behandlung" dies für den Startvektor garantiert werden, dann liegen alle Korrekturen tatsächlich im Teilraum

Beispiel 1: Potentialproblem, x, y-Koordinaten mit mehreren wechselnden Randbedingungen, springendem Diffusionskoeffizienten und einem gekrümmten Rand.

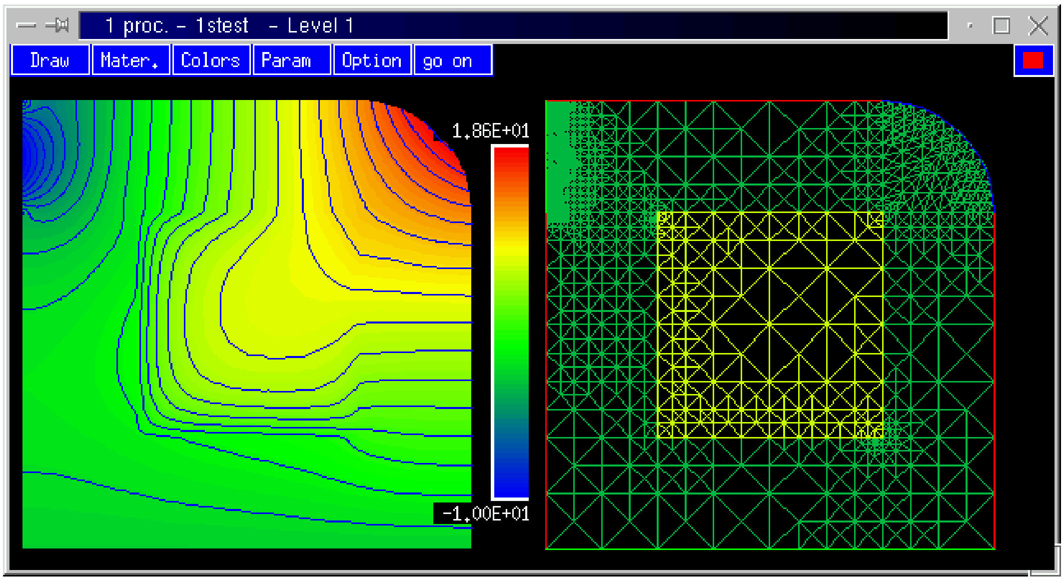
Netzentwicklung:			Assem :	PCGM		est.Err.	est.Err.^{2}
# Node	# Elem	# Edge	time(s)	It	time(s)	(squared)	$*N$
78	31	54	0.001	2	0.000	2.1E+02	2.E+04
279	124	255	0.002	7	0.003	9.8E+02	3.E+05
542	205	518	0.002	7	0.005	6.2E+02	3.E+05
922	403	898	0.005	8	0.011	4.3E+02	4.E+05
1404	631	1380	0.007	8	0.018	1.9E+02	3.E+05
1889	856	1865	0.007	8	0.025	8.4E+01	2.E+05
2754	1261	2730	0.013	8	0.039	4.2E+01	1.E+05
4630	2125	4606	0.026	9	0.082	2.2E+01	1.E+05
8753	4036	8729	0.057	9	0.164	1.1E+01	1.E+05
12446	5797	12422	0.058	9	0.245	7.2E+00	9.E+04
17935	8458	17911	0.087	10	0.411	4.8E+00	9.E+04
35722	16813	35698	0.253	9	0.818	2.4E+00	9.E+04
51896	24727	51872	0.262	10	1.340	1.6E+00	8.E+04
103941	49732	103917	0.965	9	2.581	8.2E–01	9.E+04

Tabelle 1: Verlauf der Rechnung bei „hanging nodes“, lineare Elemente.

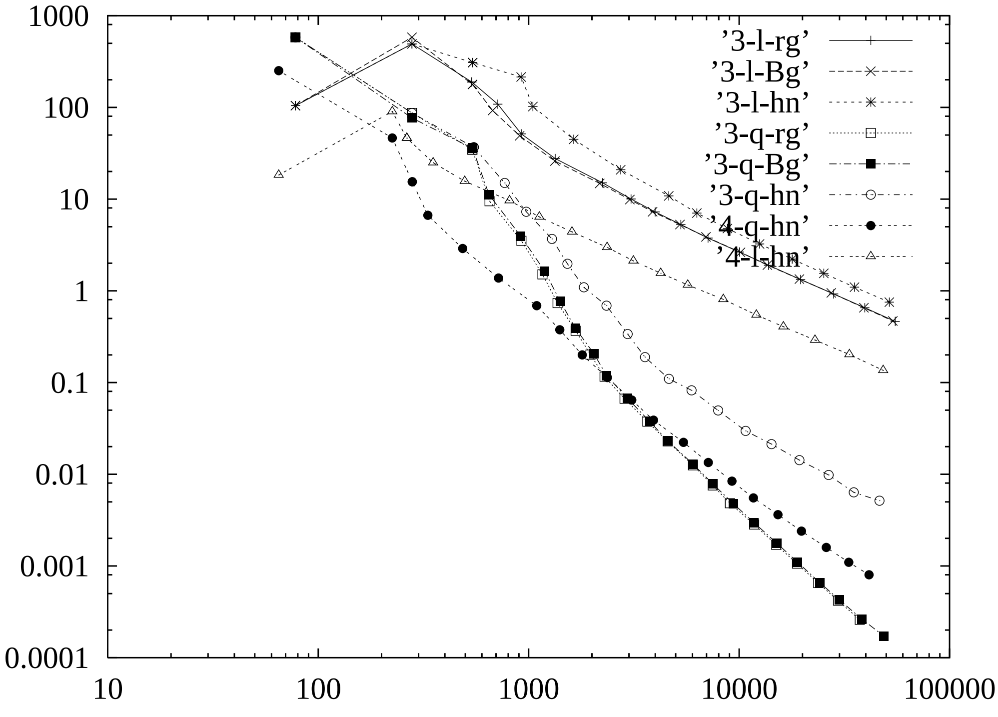
Beispiel 2: Elastizitätsproblem „Rad“, rotationssymmetrisches Bauteil mit rotationssymmetrischer Belastung (Fliehkraft)

Netzentwicklung:			Assem :	PCGM		est.Err.	est.Err.^{2}
# Node	# Elem	# Edge	time(s)	It	time(s)	(squared)	$*N$
50	10	37	0.008	21	0.000	7.7E+06	8.E+08
158	40	145	0.016	19	0.008	4.0E+06	1.E+09
174	40	161	0.000	28	0.016	2.3E+06	8.E+08
236	54	223	0.008	18	0.008	1.7E+06	8.E+08
320	72	307	0.008	19	0.016	9.9E+05	6.E+08
426	94	413	0.016	20	0.016	5.9E+05	5.E+08
544	120	531	0.016	22	0.031	3.9E+05	4.E+08
				⋮			
4944	1332	4931	0.250	32	0.680	9.6E+03	9.E+07
6632	1776	6619	0.281	33	1.016	5.5E+03	7.E+07
10002	2646	9989	0.539	37	1.922	3.0E+03	6.E+07
14250	3812	14237	0.742	37	2.906	2.4E+03	7.E+07
19102	5112	19089	0.875	41	5.258	1.8E+03	7.E+07
26391	7063	26378	1.586	45	7.344	1.5E+03	8.E+07
33560	9034	33547	1.289	47	9.102	1.1E+03	7.E+07
41379	11211	41366	1.438	50	12.023	7.5E+02	6.E+07

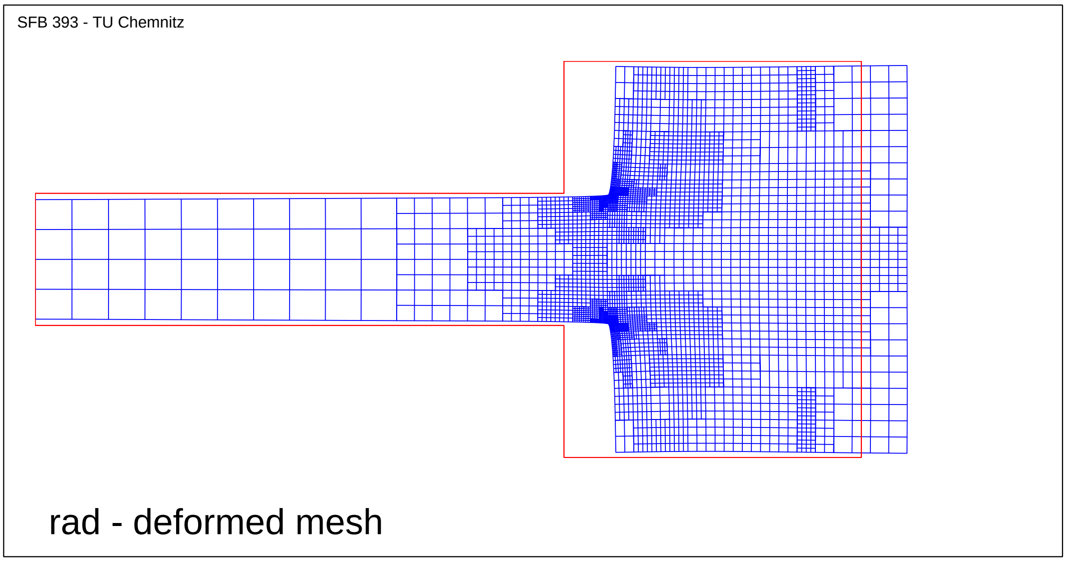
Tabelle 2: Verlauf der Rechnung bei 8-Knoten-Vierecken.



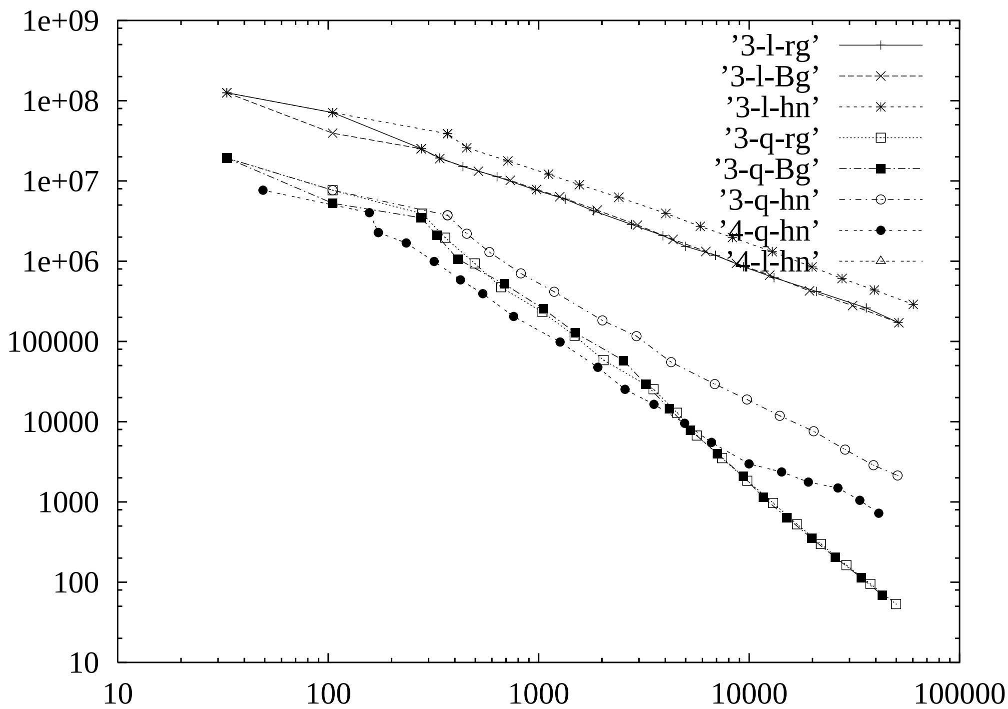
Ergebnisdarstellung, Beispiel 1



Fehlerverhalten bei verschiedener Verfeinerungstechnik, Beispiel 1



Ergebnisdarstellung, Beispiel 2



Fehlerverhalten bei verschiedener Verfeinerungstechnik, Beispiel 2

SPC-PM-3AdH und SPC-PM-3AdT (3D-Programme – Adaptive FEM)

Bei der Implementierung von adaptiven 3D-Rechnungen spielte zusätzlich zu den oben geschilderten Herangehensweisen die parallele Implementierung mit ihrer Balancierungsproblematik die wichtigste Rolle. Wesentliche Arbeit hierzu wurde von U. Reichel in Zusammenarbeit mit Kollegen der Universität Leeds[2] geleistet, von denen wichtige Kenntnisse über Wirkung und Nutzung der ParMETIS-

[2]Aufenthalt von U. Reichel in Leeds: 27.09.–24.10.98

Bibliothek erhalten wurden. Nach erfolgreichem Aufbau des neuen Parallelrechners (Ende 2000) konnte von F. Milde diese Arbeit so weit zum Abschluss gebracht werden, dass der beabsichtigte Leistungsumfang fehlerfrei funktionierte. Die 3D-Programme sind in [AMR99, BM01] dokumentiert.

Naturgemäß ist das Verhalten eines solchen Programms von vom Nutzer wählbaren Steuergrößen abhängig, so etwa:

- Ab wieviel % (α) des maximalen Fehleranteils wird ein Element geteilt?
- Wieviel % (MM) der Elemente werden mindestens geteilt?
- Ab wieviel %(MI) Disbalance wird rebalanciert?
- Wieviel % (MS) Speicherbelastung wird zugelassen bis zur anfänglichen Lastabgabe?

Durch Variation solcher Steuergrößen bei mehreren typischen Rechenbeispielen sind sehr viele Experimente durchgeführt worden, deren Dokumentation unter

`http://www.tu-chemnitz.de/~amey/adaptiv-3D`

eingesehen werden kann. Die Ergebnisse zeigen, dass die Wahl zwischen MM und α wohldosiert werden muss. So werden bei relativ hohem α (z.B. 70%) und niedrigem MM (z.B. 0.5%) sehr wenige Elemente markiert. Dies bewirkt einen relativ schwachen Abbau des Fehlers. Dagegen wird dieser Fehler bei niedrigem α (10%) und hohem MM (20%) recht schnell erreicht. Als günstig erweisen sich geeignete Mittelwerte, z.B. $\alpha = 40\%$ und MM= 5%.

Eine weitere Testserie untersuchte die Balancierungsfragen (via MS / MI). Die Variation von MS erweist sich als eher unkritisch. Höhere Werte ($\approx$ 20%) sind vorteilhaft, weil sich bessere Balance einstellt (höhere Zeiten auf gröberen Levels, die wenig ins Gewicht fallen).

2.4.2 Teilaufgabe Vorkonditionierung bei isotropen Finite-Elemente-Diskretisierungen

Wir betrachten Randwertprobleme der Art: Gesucht ist $u \in V_0 = \{u \in H^1(\Omega) : u = 0 \text{ auf } \partial\Omega\}$, so dass

$$a(u, v) = \langle F, v\rangle \quad \forall v \in V_0$$

mit einer symmetrischen, V_0-elliptischen und V_0-beschränkten Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ gilt. Bei der FE-Diskretisierung dieser Aufgabe verwenden wir stetige, stückweise lineare Ansatzfunktionen über Dreiecksnetzen. Das entstehende FE-Gleichungssystem

$$Ku = f$$

wird beispielsweise mittels des Verfahrens der konjugierten Gradienten mit Vorkonditionierung gelöst. Im Weiteren beschreiben wir die Konstruktion von Vorkonditionierern. Das wesentliche Hilfsmittel zur Konstruktion der Vorkonditionierer ist das Fictitious Space Lemma (siehe auch [Nep95]), das zum besseren Verständnis der folgenden Ausführungen hier wiederholt werden soll.

Fictitious Space Lemma. Seien H und $\tilde{H}$ Hilberträume mit den Skalarprodukten $(u,v)_H$ und $(\tilde{u},\tilde{v})_{\tilde{H}}$. Seien A und $\tilde{A}$ symmetrische, positive, lineare Operatoren in den Räumen H und $\tilde{H}$:

$$A\,:\,H \to H\,, \qquad \tilde{A}\,:\,\tilde{H} \to \tilde{H}\,.$$

Sei R ein linearer Operator mit

$$R\,:\,\tilde{H} \to H\,, \qquad (AR\tilde{v}, R\tilde{v})_H \le c_R(\tilde{A}\tilde{v}, \tilde{v})_{\tilde{H}} \quad \forall \tilde{v} \in \tilde{H}\,.$$

Weiterhin existiere ein Operator T, so dass

$$T\,:\,H \to \tilde{H}\,, \qquad RTu = u\,, \qquad c_T(\tilde{A}Tu, Tu)_{\tilde{H}} \le (Au,u)_H \;\; \forall u \in H\,,$$

gilt, wobei c_R und c_T positive Konstanten sind. Dann gelten die Ungleichungen

$$c_T(A^{-1}u,u)_H \le (R\tilde{A}^{-1}R^*u,u)_H \le c_R(A^{-1}u,u)_H.$$

R^* ist der zu R adjungierte Operator bezüglich der Skalarprodukte $(\cdot,\cdot)_H$ und $(\cdot,\cdot)_{\tilde{H}}$.

Wir diskutieren zuerst die Anwendung des Fictitious Space Lemmas bei der Konstruktion von Vorkonditionierern im Fall von FE-Diskretisierungen mit unstrukturierten, lokal verfeinerten Netzen. Für das Gebiet Ω sei eine reguläre, aber nicht notwendigerweise quasi-uniforme Vernetzung Ω^h gegeben, d. h. das Netz kann lokale Verfeinerungen haben. Zu dieser Vernetzung definieren wir den Raum $H_h(\Omega^h)$, der durch stückweise lineare Funktionen aufgespannt wird. Diese Funktionen sind linear über jedem Dreieck der Vernetzung Ω^h und verschwinden auf dem Rand $\partial\Omega^h$. Wir konstruieren ein Hilfsgitter $\tilde{Q}^h$ auf folgende Weise. Das Gebiet Ω wird in ein Quadrat Π eingebettet, für welches ein grobes regelmäßiges Rechtecksgitter Π_0^h generiert wird. Dieses wird wiederholt verfeinert, so dass man Rechtecksgitter Π_0^h, Π_1^h, ... erhält. Das Gitter Π_q^h besteht aus Gitterzellen $D_{ij}^{(q)}$. Sei Q_0^h das kleinste Gebiet, das aus Zellen $D_{ij}^{(0)}$ besteht und Ω^h enthält. Wir bezeichnen mit I_0 die Menge von Indizes (i,j), so dass

$$Q_0^h = \bigcup_{(i,j)\in I_0} D_{ij}^{(0)}, \qquad D_{ij}^{(0)} = \{(x,y)\,:\,x_i \le x < x_{i+1}\,,\; y_i \le y < y_{i+1}\},$$

gilt. Die Gitter Q_1^h, Q_2^h, ... werden wie folgt definiert. Sei I_q die Menge der Indizes (i,j) der Zellen $D_{ij}^{(q)}$, die mehr als einen Knoten der Vernetzung Ω^h enthalten. Wir teilen diese Zellen $D_{ij}^{(q)}$ und alle Nachbarzellen (Zellen, die wenigstens einen Eckpunkt mit der Zelle $D_{ij}^{(q)}$ gemeinsam haben) in vier kongruente Teilzellen. Die neuen Zellen werden mit $D_{ij}^{(q+1)}$ bezeichnet. Auf diese Weise entsteht das neue Gitter Q_{q+1}^h, $q = 0, 1, \ldots$. Dieser Verfeinerungsprozess wird beendet, wenn jede Gitterzelle nicht mehr als einen Knoten der Vernetzung Ω^h enthält. Das feinste Gitter bezeichnen wir mit $Q_J^h = \tilde{Q}^h$.

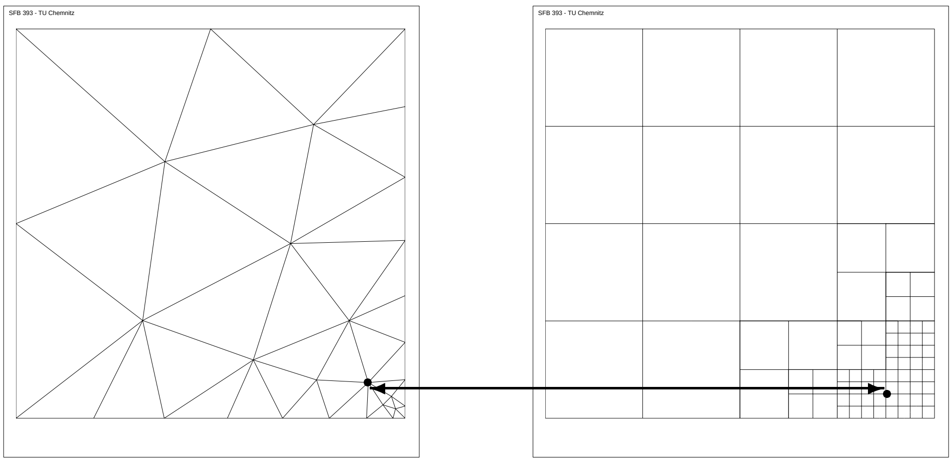
Als Raum $\tilde{H}$ im Fictitious Space Lemma definieren wir den Raum

$$H_h(Q_J^h) = \Bigg\{ \sum_{\operatorname{supp}\Phi_k^{(0)} \subset Q_J^h} \alpha_k^{(0)} \Phi_k^{(0)} + \sum_{q=0}^{J-1} \sum_{(i,j)\in I_q} \sum_{\operatorname{supp}\Phi_k^{(q+1)} \cap D_{ij}^{(q)} \neq \emptyset} \alpha_k^{(q+1)} \Phi_k^{(q+1)}, \quad \alpha_k^{(q)} \in \mathbb{R}, q = 0, 1, \ldots, J-1 \Bigg\},$$

wobei $\Phi_k^{(q)}$ die Ansatzfunktionen auf dem Gitter Q_q^h bezeichnen. Die Operatoren

$$R : H_h(Q_J^h) \to H_h(\Omega^h) \quad \text{und} \quad T : H_h(\Omega^h) \to H_h(Q_J^h)$$

werden analog zu denen in der Arbeit von G. Globisch und S. Nepomnyaschikh [GN98] definiert, siehe auch [Glo01]. Die dazu erforderliche eineindeutige Zuordnung zwischen Knoten der Vernetzung Ω^h und $\tilde{Q}^h = Q_J^h$ ist in der folgenden Abbildung dargestellt.



Weiterhin definieren wir als Operator $\tilde{A}$ den Operator $C_{\Pi_J^h}$ wie folgt:

$$\begin{aligned} C_{\Pi_J^h}^{-1} U^h = & \sum_{\operatorname{supp}\Phi_k^{(0)} \subset Q_J^h} (U^h, \Phi_k^{(0)})_{L_2(Q_J^h)} \Phi_k^{(0)} \\ & + \sum_{q=0}^{J-1} \sum_{(i,j)\in I_q} \sum_{\operatorname{supp}\Phi_k^{(q+1)} \cap D_{ij}^{(q)} \neq \emptyset} (U^h, \Phi_k^{(q+1)})_{L_2(Q_J^h)} \Phi_k^{(q+1)} \end{aligned} \tag{2.2}$$

für alle $U^h \in H_h(Q_J^h)$. Unter Anwendung des Fictitious Space Lemmas kann der folgende Satz bewiesen werden [Glo98].

Satz Es existieren positive, von der Diskretisierungsschrittweite h unabhängige, Konstanten c_1 und c_2, so dass

$$c_1(K^{-1}u, u) \leq (RC_{\Pi_J^h}^{-1} R^* u, u) \leq (K^{-1}u, u) \quad \forall u \in \mathbb{R}^N$$

gilt.

Im Folgenden geben wir noch ein numerisches Beispiel zur Demonstration des Konvergenzverhaltens des Verfahrens der konjugierten Gradienten mit der soeben beschriebenen Vorkonditionierung an. Es wird die Poisson-Gleichung im Einheitsquadrat gelöst, wobei bei der FE-Diskretisierung als gröbste Vernetzung die in der obigen Abbildung dargestellte Vernetzung mit 31 Knoten verwendet wird. Diese Vernetzung wird sechsmal uniform verfeinert. Als Vorkonditionierer im Verfahren der konjugierten Gradienten wählen wir $RC^{-1}_{\Pi^h_J}R^*$ mit $C^{-1}_{\Pi^h_J}$ aus (2.2), Die Iteration wurde beim Erreichen einer relativen Genauigkeit von 10^{-4} abgebrochen. In der folgenden Tabelle sind die benötigten Iterationszahlen angegeben.

Anz. d. Unbekannten	31	101	361	1361	5281	20801	82561
Anz. d. Iterationen	8	12	13	15	16	19	20

Zahlreiche weitere numerische Experimente sind in [Glo98] dokumentiert.

Wir beschreiben nun einen zweiten Weg zur Konstruktion von Vorkonditionierern unter Ausnutzung des Fictitious Space Lemmas. Für ein gegebenes zweidimensionales Gebiet Ω mit einem glatten Rand $\partial\Omega \in C^2$ konstruieren wir wie folgt eine Vernetzung, wobei wir die Teilschritte zur Netzgenerierung nur in groben Zügen beschreiben. Eine detaillierte Beschreibung ist in der Arbeit von M. Jung, A. Matsokin, S. Nepomnyaschikh und Yu. Tkachov [JMNT01] zu finden.

1. Das Gebiet Ω wird in ein Quadrat D eingebettet.

2. Wir definieren Größen σ und h_0 gemäß

$$\sigma = \min\left\{\frac{R}{2}, \frac{1}{2K}\right\} \quad \text{und} \quad h_0 = \frac{\sigma}{2\sqrt{2}}\,.$$

   Dabei ist K die maximale Krümmung des Randes. $R > 0$ wird so gewählt, dass ein Kreis mit dem Radius R, der den Rand in einem Punkt berührt, keine weiteren Berührungspunkte mit dem Rand hat.

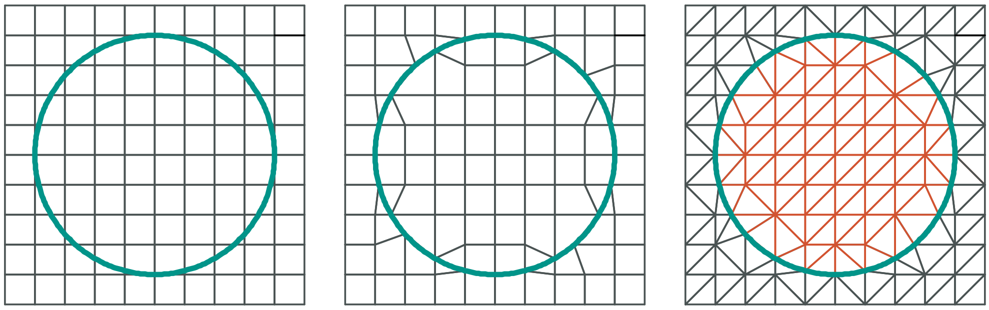
3. Wir generieren ein gleichmäßiges Rechtecksgitter $D^h_\square$ mit der Schrittweite $h < h_0$ im Quadrat D.

4. Wir führen eine lokale Modifikation dieses Gitters durch. Wenn der Abstand eines Gitterpunktes von einem Schnittpunkt des Gebietsrandes mit einer Gitterlinie kleiner als $\frac{h}{2}$ ist, wird der Gitterpunkt in diesen Schnittpunkt verschoben. Das lokal modifizierte Gitter wird mit $\tilde{D}^h_\square$ bezeichnet.

5. Jedes Viereck des Gitters $\tilde{D}^h_\square$ wird in zwei Dreiecke zerlegt. Damit erhalten wir die Vernetzung $\tilde{D}^h_\triangle$.

6. Wir definieren als Vernetzung Ω^h des Gebietes Ω die Vereinigung aller Dreiecke von $\tilde{D}^h_\triangle$, die wenigstens einen Knoten in Ω haben.

In der folgenden Abbildung werden die Teilschritte zur Generierung der Vernetzung Ω^h nochmals illustriert.



Eine Verallgemeinerung des obigen Netzgenerierungsalgorithmus für die Vernetzung von Gebieten mit stückweise glattem Rand ist in [JMNT01] angegeben.

Im Weiteren wird mit $H_h(\Omega^h)$ der Raum bezeichnet, der durch die üblichen stückweise linearen Ansatzfunktionen aufgespannt wird.

Im Folgenden beschreiben wir die Definition der Operatoren R, T und $\tilde{A}^{-1}$ im Fictitious Space Lemma. Sei $h = 2^{-J}s$, s die Länge der Seiten des Quadrats D. Wir definieren Gitterzellen D_{ij} durch

$$D_{ij} = \{(x, y) \,:\, x_i \leq x < x_{i+1}\,,\; y_i \leq y < y_{i+1}\}\,.$$

Mit Q^h bezeichnen wir das kleinste Gebiet, das aus Gitterzellen D_{ij} besteht und Ω enthält. S^h ist die Menge der Randknoten von Q^h. Die Gitterzellen von $D^h_\square$ werden in zwei Dreiecke zerlegt, so dass wir die Vernetzung $D^h_\triangle$ des Quadrates D erhalten. Die Einschränkung von $D^h_\triangle$ auf Q^h wird mit $Q^h_\triangle$ bezeichnet.

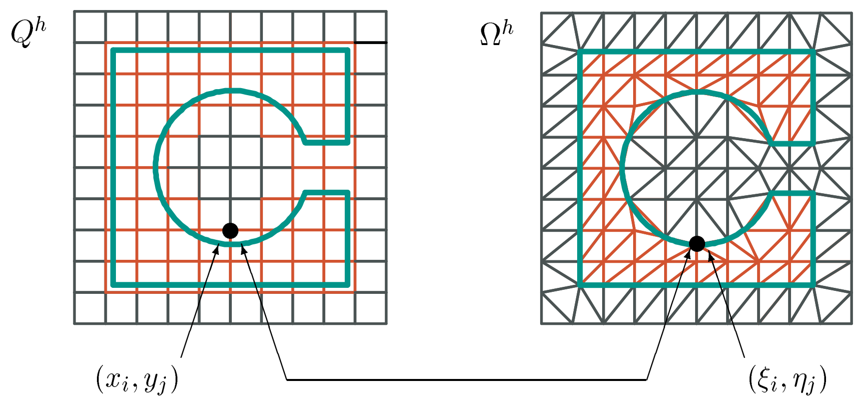
Als Raum $\tilde{H}$ im Fictitious Space Lemma nutzen wir den Raum $H_h(Q^h_\triangle)$. Dieser Raum wird durch die über den Dreiecken von $Q^h_\triangle$ stetigen, stückweise linearen Funktionen aufgespannt. Diese Funktionen sind auf dem Rand von Q^h identisch Null. Der Operator

$$R \,:\, H_h(Q^h_\triangle) \to H_h(\Omega^h)$$

bildet eine gegebene Funktion $U_h \in H_h(Q^h_\triangle)$ auf eine Funktion $u_h \in H_h(\Omega^h)$ ab, indem für alle Knoten $(\xi_i, \eta_j) \in \Omega^h$

$$u_h(\xi_i, \eta_j) = (RU_h)(\xi_i, \eta_j) = \begin{cases} U_h(x_i, y_j) & \text{für alle innere Knoten in } \Omega^h, \\ 0 & \text{für Knoten auf dem Rand } \partial\Omega^h, \end{cases}$$

gesetzt wird. Die Beziehung zwischen (x_i, y_j) und (ξ_i, η_j) wird in folgender Abbildung verdeutlicht.



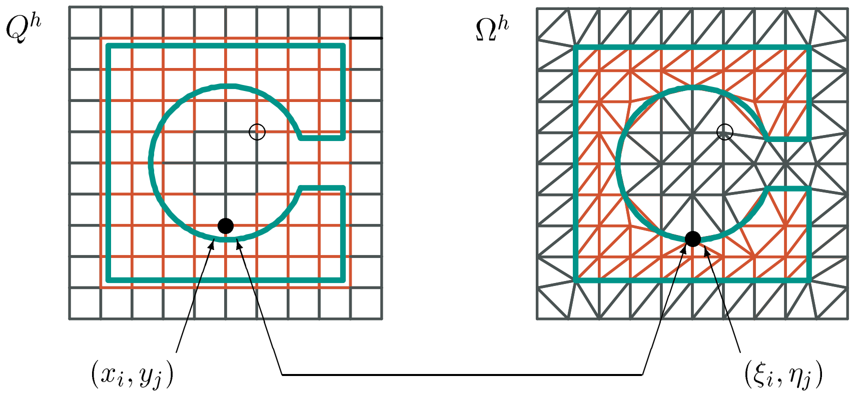
Wir beschreiben nun den Operator

$$T\ :\ H_h(\Omega^h) \rightarrow H_h(Q^h_\triangle)\,.$$

Für eine gegebene Funktion $u_h \in H_h(\Omega^h)$ definieren wir eine Funktion $U_h \in H_h(Q^h_\triangle)$ wie folgt: U_h ist Null in Randpunkten von Q^h. Wenn eine eineindeutige Beziehung zwischen einem Knoten $(x_i, y_j) \in Q^h$ und einem Knoten $(\xi_i, \eta_j) \in \Omega^h$ besteht, dann wird

$$U_h(x_i, y_j) = (Tu_h)(x_i, y_j) = u_h(\xi_i, \eta_j)\,.$$

gesetzt.



Wenn kein Knoten $(\xi_i, \eta_j) \in \Omega^h$ existiert, der mit einem Knoten $(x_i, y_j) \in D_{k\ell} \subset Q^h$ korrespondiert (z.B. der Knoten "$\circ$"), dann setzen wir

$$U_h(x_i, y_j) = U_h(x_m, y_n)\,,$$

wobei $(x_m, y_n) \in D_{k\ell}$ und mit (x_m, y_n) korrespondiert ein Knoten in Ω^h. Zur Definition des Operators $\tilde{A}$ werden die folgenden Schritte durchgeführt:

Wir definieren für das Quadrat D eine Folge von Gittern

$$D^{h_0}\,,\ D^{h_1}\,,\ \ldots\ ,\ D^{h_J} \equiv D^h$$

mit den Gitterschrittweiten $h_\ell = 2^{-\ell}s$, $\ell = 0, 1, \ldots, J$. Jedes Viereck in diesen Rechtecksgittern wird in zwei Teildreiecke zerlegt, so dass wir eine Folge von Dreiecksgittern erhalten. Auf diesen Gittern werden FE-Räume

$$H_h(D^{h_0}) \subset \cdots \subset H_h(D^{h_J}) \equiv H_h(D^h)$$

definiert, die von den üblichen stückweise linearen Ansatzfunktionen $\Phi_i^{(\ell)}$ aufgespannt werden. Die Funktionen dieser FE-Räume sind gleich Null auf dem Rand von D. Sei $\tilde{\Phi}_i^{(\ell)}$ die Einschränkung von $\Phi_i^{(\ell)}$ auf $Q^h_\triangle$. Der Operator $\tilde{A}$ wird nun durch

$$\tilde{A}^{-1}U_h = \sum_{\ell=0}^{J} \sum_{\substack{\mathrm{supp}\Phi_i^{(\ell)} \cap Q^h \neq \emptyset \\ \mathrm{supp}\Phi_i^{(\ell)} \cap S^h = \emptyset}} (U_h, \Phi_i^{(\ell)})_{L_2(Q^h)} \tilde{\Phi}_i^{(\ell)}$$

für alle $U_h \in H_h(Q^h_\triangle)$ definiert.

In [JMNT01] wird der folgende Satz bewiesen.

Satz: Es existieren positive, vom Diskretisierungsparameter h unabhängige Konstanten $\underline{c}$, $\overline{c}$, so dass für den Vorkonditionierer $B^{-1} = R\tilde{A}^{-1}R^*$

$$\underline{c}(K^{-1}u, u) \leq (B^{-1}u, u) \leq \overline{c}(K^{-1}u, u) \;\; \forall u \in R^N .$$

gilt.

Folglich haben wir einen spektraläquivalenten Vorkonditionierer gefunden.

Zum Abschluss geben wir noch ein numerisches Beispiel an. Wir betrachten die Poisson-Gleichung mit homogenen Randbedingungen in den beiden Gebieten

Die Vernetzungen wurden auf die oben beschriebene Weise generiert. Die Iterationszahlen des Verfahrens der konjugierten Gradienten mit dem soeben beschriebenen Vorkonditionierer sind in der folgenden Tabelle angegeben. Die Iteration wurde beim Erreichen einer relativen Genauigkeit von 10^{-5} beendet.

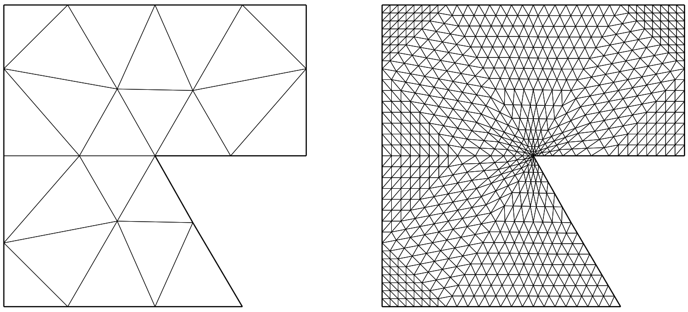
J	5	6	7	8	9	10
Gebiet I	10	14	17	19	22	23
Gebiet II	7	11	13	15	17	19

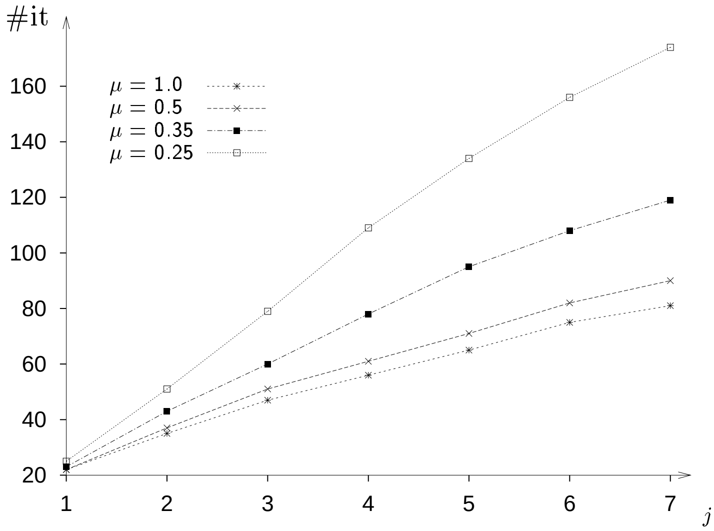
Die Schrittweite in der Vernetzung des Quadrates D war $h = 2^{-J}$.

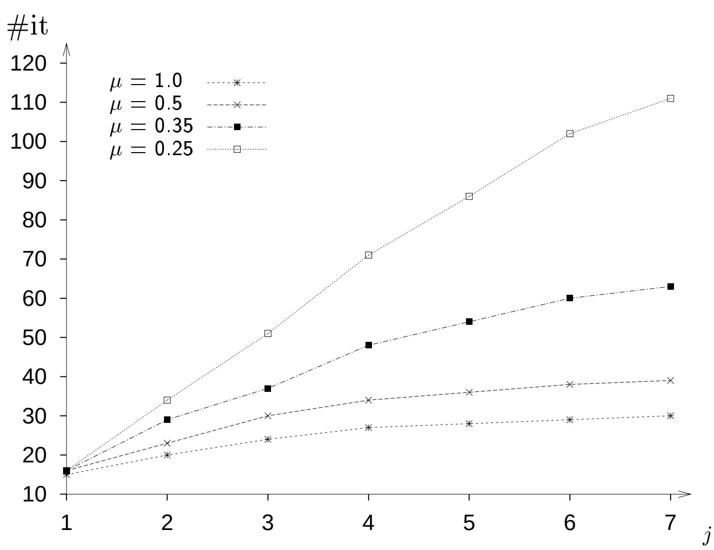
In [JNT00] wurden von M. Jung, S. Nicaise und J. Tabka Multilevel-Vorkonditionierer bei FE-Diskretisierungen mit graduierten Netzen untersucht. Der von Raugel [Rau78] vorgeschlagene Algorithmus zur Generierung graduierter Netze liefert keine Netzhierarchie. Jung/Nicaise/Tabka [JNT00] haben einen Vernetzungsalgorithmus entwickelt, der eine hierarchisch aufgebaute Folge von graduierten Netzen erzeugt. Damit ist die Voraussetzung geschaffen, dass zur Lösung der entsprechenden FE-Gleichungssysteme hierarchische Algorithmen eingesetzt werden können. Als Lösungsalgorithmus wurde das Verfahren der konjugierten Gradienten mit dem Vorkonditionierer nach Yserentant und mit einem Multilevel-Diagonal-Scaling-Vorkonditionierer [Zha92] eingesetzt. Es wurde in [JNT00] gezeigt, dass sich das PCG-Verfahren mit dem Vorkonditionierer nach Yserentant genauso verhält wie im Fall quasi-uniformer Netze, d. h., die Iterationszahl wächst wie $\mathcal{O}(J+1)$. Dabei ist $J+1$ die Anzahl der verwendeten Netze in der Netzhierarchie. Im Fall des MDS-Vorkonditionierers wächst die Iterationszahl wie $\sqrt{J+1}$.

Wir demonstrieren dieses Konvergenzverhalten anhand eines Beispiels. Wir betrachten die Poisson-Gleichung in dem in der folgenden Abbildung dargestellten

Gebiet. Diese Abbildung zeigt außerdem die gröbste Vernetzung und die dritte Verfeinerung. In den folgenden beiden Diagrammen ist die Iterationszahl in Abhängigkeit von der Anzahl der verwendeten Gitter für verschiedene Graduierungsparameter μ (siehe [Rau78, JNT00]) dargestellt. Zuerst zeigen wir die Iterationszahlen bei Anwendung des Vorkonditionierers von Yserentant und in der nächsten Abbildung bei Anwendung des MDS-Vorkonditionierers.







2.4.3 Teilaufgabe Anisotropie: Fehlerschätzer und schnelle Löser

Die erste Phase der Bearbeitung dieser Teilaufgabe war vor allem gekennzeichnet durch den erfolgreichen Abschluss des Habilitationsverfahrens von Th. Apel (Februar 1999) [Ape99a] und des Promotionsverfahrens von G. Kunert (Januar 1999) [Kun99].

A priori Fehlerabschätzungen

Poissonproblem. Kantensingularitäten in der Lösung des Poissonproblems,

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

in Polyedergebieten können durch anisotrope Netzverfeinerung behandelt werden. In der Arbeit von Th. Apel und M. Dobrowolski (Würzburg) [AD92] wurde der Beweis für Tetraedernetze mit stückweise linearen Ansatzfunktionen unter starken Voraussetzungen an die Regularität der rechten Seite f geführt.

Von Th. Apel wurden in [Ape99b] neben Tetraedernetzen auch Netze aus Dreiecksprismen (Pentaeder) behandelt und die Voraussetzungen auf den klassischen Fall $f \in L^2(\Omega)$ abgeschwächt. Dieser Beweis konnte auf der Basis von ebenfalls in [Ape99b] hergeleiteten anisotropen lokalen Abschätzungen des Fehlers einer modifizierten Scott-Zhang-Interpolierenden geführt werden. Durch die erfolgreiche Behandlung des Falls $f \in L^2(\Omega)$ konnte auch die L^2-Fehlerabschätzung mit dem Nitsche-Trick gefolgert werden.

In der Habilitationsschrift von Th. Apel [Ape99a] wurden des Weiteren anisotrop graduell verfeinerte Netze beschrieben, für die optimale Fehlerabschätzungen für quadratische Ansatzfunktionen bewiesen werden konnten.

Stokesproblem. Die Lösungskomponenten $u = (u_1, u_2, u_3)$ und p des Stokessystems

$$-\Delta u + \nabla p = f \quad \text{in } \Omega, \qquad \nabla \cdot u = 0 \quad \text{in } \Omega, \qquad u = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega,$$

besitzen Singularitäten in der Umgebung von Kanten, die ähnlich zu denen der Lösung des Poissonsproblems sind. Zur Vermeidung einer reduzierten Konvergenzordnung liegt es daher nahe, das Stokesproblem mit einer Finite-Elemente-Methode über einem analog zum Poissonproblem anisotrop graduell verfeinerten Netz zu lösen.

Für die Stabilität der Methode ist es notwendig, dass die Approximationsräume für u und p eine Inf-Sup-Bedingung mit einer Konstante, die unabhängig vom Streckungsverhältnis (*aspect ratio*) der Elemente ist, erfüllen. Für die nichtkonforme Methode mit Crouzeix-Raviart-Elementen (nichtkonformen $\mathcal{P}_1$-Elementen) für die Geschwindigkeit und stückweise konstanten Funktionen für den Druck ist dies einfach zu zeigen [ANS00]. Diese Eigenschaft gilt jedoch für viele andere, über isotropen Netzen erfolgreich verwendete Raumpaare nicht. Dazu erarbeitet der Masterstudent M. Randrianarivony eine umfassende experimentelle Studie [Ran01];

diese Fragestellung soll im neu zu beantragenden Teilprojekt A11 weiter verfolgt werden. Erst danach kann entschieden werden, welche Raumpaare in den parallelen adaptiven Finite-Elemente-Code implementiert werden sollen.

Für die Abschätzung des Diskretisierungsfehlers benötigt man eine Abschätzung des Interpolationsfehlers. Lokale Abschätzungen wurden durch Th. Apel, S. Nicaise[3] (Valenciennes) und J. Schöberl[4] (Linz) hergeleitet [ANS99]. Der globale Interpolationsfehler kann mit den gleichen Techniken wie beim Poissonproblem abgeschätzt werden. Dabei stellt sich heraus, dass einige technische Schwierigkeiten durch nichtkonforme Elemente vermieden werden. Insbesondere ist die Crouzeix-Raviart-Interpolierende für Funktionen mit geringer Regularität, z. B. H^1, definiert (im Gegensatz zur Lagrange-Interpolierenden) und erfüllt in schwachem Sinne die Dirichlet-Randbedingung auf dem gesamten Rand (im Gegensatz zur Scott-Zhang-Interpolierenden).

Das beschriebene Raumpaar führt auf eine nichtkonforme Methode. Für die Abschätzung des Diskretisierungsfehlers benötigt man daher auch eine Abschätzung des Konsistenzfehlers unter den schwachen Regularitätsannahmen infolge von Kantensingularitäten. Diese stellte die eigentliche Herausforderung dar. Eine solche Abschätzung wurde schließlich zunächst für den technisch einfacheren Fall der Diskretisierung des Poissonproblems mit Crouzeix-Raviart-Elementen gezeigt [ANS99] und dann auf den Fall des Stokes-Problems übertragen [ANS00]. Dabei wurde ein prismatisches Gebiet vorausgesetzt. Das Endresultat lautet

$$\|u - u_h\|_{1,h} + \|p - p_h\|_0 \leq Ch\|f\|_0.$$

In einem allgemeinen polyedrischen Gebiet sind sowohl Kanten- als auch Eckensingularitäten zu behandeln. Das Netz sollte anisotrop zu den Kanten hin und isotrop zu den Ecken hin verfeinert werden. Vorschläge zur Konstruktion solcher Netze sind von Th. Apel und S. Nicaise gemacht worden [AN98], der Fehler ist jedoch nur für eine konforme Approximation des Poissonproblems abgeschätzt worden. Wir vermuten, dass die gleichen Netze auch für das Stokesproblem geeignet sind. Die Inf-Sup-Bedingung ist erfüllt. Der Interpolationsfehler kann wie in [AN98] abgeschätzt werden. Der kritische Punkt ist der Konsistenzfehler. Die Abschätzung in [ANS99, ANS00] nutzt wesentlich die Tensorproduktstruktur des Netzes, so dass die Verallgemeinerung auf allgemeine Polyederprobleme noch offen ist.

A posteriori Fehlerschätzer

Im Bearbeitungszeitraum wurden von G. Kunert mehrere *a posteriori* Fehlerschätzer vorgeschlagen, die auch auf anisotropen Netzen robust sind. Die Hauptresultate sind:

- Es wurden adäquate Beschreibungen der anisotropen Gegebenheiten eingeführt und verbessert und ein umfangreiches Instrumentarium zur Analyse der Fehlerschätzer bereitgestellt bzw. untersucht.

[3] Aufenthalte von Th. Apel an der Universität Valenciennes: 10.–24.06.98 und 20.09.–01.10.98, Aufenthalt von S. Nicaise in Chemnitz: 14.–17.12.99

[4] Aufenthalt von J. Schöberl in Chemnitz: 12.–25.07.98, Aufenthalt von Th. Apel in Linz: 13.–18.03.00

- Alle anisotropen Fehlerschätzer wurden rigoros untersucht. Dabei haben sich einige wesentliche Hauptmerkmale herauskristallisiert, die der anisotropen Fehlerschätzung innezuwohnen scheinen und der Anisotropie von Netz und Lösung geschuldet sind.

  Grundlegende Aspekte anisotroper Fehlerschätzung sowie ihrer spezifischen Schwierigkeiten sind zunehmend verstanden.

- Eine wesentliche Erkenntnis besagt, dass das anisotrope Netz in etwa wie die anisotrope Lösung ausgerichtet sein muss, damit obere und untere Fehlerschranken die gleiche Qualität haben (*Effizienz* und *Zuverlässigkeit* der Fehlerschätzer). Diese Ausrichtung wird mit einer so genannten *matching function* gemessen. Das betrifft alle vorgeschlagenen Fehlerschätzer.

  Die genannte Eigenschaft ist von praktischer Seite sofort einleuchtend, geht hier jedoch explizit in die Fehlerschätzung ein.

- Alle Fehlerschätzer wurden implementiert und ausgiebig numerisch getestet. Es entstand das Fehlerschätzer-Modul im Programm-Paket *SPC-PM-Po3D*. Besonderen Wert wurde auf die Implementierung für Parallelrechner gelegt.

In den folgenden Unterpunkten werden die Teilergebnisse im Detail vorgestellt.

Problembeschreibung und Hilfsmittel. Die Beziehung zwischen einem anisotropen Netz und der anisotropen Lösung wurde völlig neu beschrieben, s. unten. Es steht jetzt eine ganze Familie von *bubble functions* zur Verfügung. Außerdem wurden neue oder verbesserte Abschätzungen hergeleitet, die jedoch neue, sehr technische Beweise erforderten. Verbesserte inverse Ungleichungen bzw. Äquivalenzen erlauben die Behandlung eines singulär gestörten Reaktions-Diffusions-Modellproblems.

Poisson Problem – Energienorm – Residuenfehlerschätzer. Dieser Schätzer war schon aus [Kun97] bekannt und bildete teilweise die Grundlage der Beweise für andere Schätzer. Eine verbesserte Version wurde in [Kun00a] veröffentlicht. Als weiteres neues Resultat wurde gemeinsam mit R. Verfürth gezeigt, dass das Element-Residuum weggelassen werden kann, d.h. alleine die Gradientensprünge über die Flächen bestimmen den Fehlerschätzer [KV00].

Als Nebenresultat der neuesten Forschung über singulär gestörte Reaktions-Diffusions-Probleme [Kun01e] ergab sich, dass auch der altbekannte anisotrope Residuenschätzer für das Poisson-Problem modifiziert werden kann. Mit einer anderen Skalierung der Gradientensprünge kann der Fehlerschätzer verändert (vergrößert) werden, wobei die Struktur der Abschätzungen erhalten bleibt. Dies scheint eine Verbesserung zu sein. Darüber und über die Auswirkungen auf die gesamte Theorie anisotroper Fehlerschätzung muss jedoch die weitere Forschung befinden.

Dieses letzte Beispiel verdeutlicht gleichzeitig die Schwierigkeiten und Überraschungen, die das gesamte Thema auch nach längerer intensiver Forschung noch bereithält.

Poisson Problem – Energienorm – Lokales Problem. Die Basis dieses Fehlerschätzers war schon aus der letzten Berichtsperiode bekannt. Die Behandlung von Neumann- und Robin-Randbedingungen erforderte jetzt verfeinerte Ungleichungen, Äquivalenzen und natürlich auch (technische) Beweise. Der resultierende Fehlerschätzer wurde in [Kun01a] veröffentlicht.

Außerdem wurde versucht, aus der lokalen Lösung weitere Informationen zu extrahieren (Richtung und Streckungsverhältnis). Dies scheiterte jedoch, da das Verhalten der lokalen Lösung schon zu wesentlichen Teilen von der Geometrie des zugrunde liegenden Tetraeders bestimmt zu sein scheint.

In [Kun01a] wurden zwei weitere anisotrope Schätzer auf Basis lokaler Probleme analysiert, die beide isotropen Vorbildern entlehnt sind. Die theoretischen Abschätzungen besagten, dass einer dieser Schätzer im anisotropen Fall versagen kann, was durch die numerischen Experimente eindrucksvoll bestätigt wurde. Das ist ein Beispiel für ein typisches, spezifisches Wesensmerkmal anisotroper Fehlerschätzung.

Poisson Problem – H^1-Norm – Zienkiewicz-Zhu-Schätzer. Erste Ideen und Ansätze wurden schon in [Kun97] vorgestellt, dort aber nur für tensorproduktartige Tetraedernetze. Ab Mitte 2000 kam es zu einer verstärkten Zusammenarbeit mit S. Nicaise (Valenciennes, Frankreich), wobei die existierenden Hilfsmittel und Beweise kritisch beleuchtet sowie neue Ideen diskutiert wurden. Es zeigte sich, dass die Voraussetzungen an die Netze weniger gravierend sind. Die intensive Diskussion Anfang 2001 wird im Frühjahr in einem Preprint münden.

Poisson Problem – L_2-Norm – Residuenfehlerschätzer. Der schon bekannte Vorschlag aus [Kun97] konnte verbessert werden, indem modifizierte *bubble functions* hergeleitet und genutzt wurden. Für diese Funktionen konnten geeignete inverse Ungleichungen bzw. Abschätzungen bewiesen werden, die im Gegensatz zu [Kun97] ohne eine zusätzliche geometrische Netzvoraussetzung auskommen. In der Arbeit [Kun01c] wurde weiterhin die Rolle der H^2-Regularität diskutiert, die für die theoretische Analysis benötigt wird. Numerische Experimente legen nahe, dass man auf die H^2-Regularität verzichten kann, solange das anisotrope Netz der Lösung angepasst ist. Diese Netzanpassung entzog sich leider einer weitergehenden Analyse.

In Analogie zum Energienorm-Residuenschätzer wurde in [KV00] gezeigt, dass die Gradientensprünge alleine ausreichend für robuste Fehlerschätzung sind.

Poisson Problem – L_2-Norm – Lokales Problem. Analog zur Energienorm (s. oben) konnte auch ein lokales Problem formuliert werden, das eine Schätzung des L_2-Fehlers erlaubt. Diese Formulierung erforderte aber sehr kompliziert aufgebaute *bubble functions*. Da die numerische Realisierung nur mit unvertretbar hohem Rechen- und Programmier-Aufwand möglich schien, wurde dieser Fehlerschätzer nicht weiter verfolgt.

Reaktions-Diffusions-Problem – Energienorm – Residuenfehlerschätzer. Beim betrachteten singulär gestörten Reaktions-Diffusions-Modellproblem ist eine Hauptschwierigkeit, Schranken für den Fehler nach *oben* und *unten* zu finden, die von gleicher Qualität sind, wenn der singuläre Störungsparameter ε klein wird (Robustheit für $\varepsilon \to 0$). Erste Ansätze waren schon aus der letzten Berichtsperiode bekannt. Die Beweise erfordern (im Vergleich zum Poisson Problem) ein erweitertes

Instrumentarium (z.B. *bubble functions* und inverse Ungleichungen). Der Preprint [Kun00c] wird demnächst als Artikel erscheinen [Kun01d].

In Analogie zum Poisson Problem wurde in [KV00] gezeigt, dass die Gradientensprünge alleine ausreichend für robuste Fehlerschätzung sind.

Dieser Fehlerschätzer verdeutlicht auch die Überraschungen, die das Thema Fehlerschätzer auch nach langer intensiver Forschung bereithält. So schien die Skalierung der Residuen bei diesem Fehlerschätzer seit längerem bekannt zu sein. Erst die Beschäftigung mit einem Schätzer auf Basis eines lokalen Problems (s.u.) führte zu anderen, möglicherweise besseren Skalierungen. Diese Ideen wiederum sind auch beim Poisson Problem anwendbar. Die Auswirkungen auf alle oben beschriebenen Schätzer sind jedoch noch nicht erforscht.

Reaktions-Diffusions-Problem – Energienorm – Lokales Problem. Dieser Fehlerschätzer ist die Erweiterung des Lokalen-Problem-Schätzers für das Poisson Problem auf ein Reaktions-Diffusions-Problem. Was auf den ersten Blick als einfache Kombination bekannter Ideen und Hilfsmittel schien, offenbarte sich im Detail als erstaunlich schwierig. Wie schon erwähnt, mussten im Laufe der Analyse der vorherige Fehlerschätzer modifiziert werden und die Abschätzungen geeigneter *bubble functions* verbessert werden. Der Preprint [Kun01e] ist als Artikel eingereicht.

Beziehung anisotropes Netz – anisotrope Lösung. Im Laufe aller Untersuchungen hat sich zunehmend herauskristallisiert, dass *Effizienz* und *Zuverlässigkeit* von Fehlerschätzern auf *beliebigen* anisotropen Netzen nicht gleichzeitig erreicht werden kann. Das kann nur erwartet werden, wenn ein anisotropes Netz passend zur anisotropen Lösung gewählt wird. Dieses Verhalten scheint nicht an einer unausgereiften Analysis zu liegen, sondern im Gegenteil ein typisches Wesensmerkmal anisotroper Fehlerschätzung zu sein.

Bei den besprochenen Fehlerschätzern wurde deshalb eine so genannte *matching function* eingeführt, die den Grad der Anpassung eines anisotropen Netzes $\mathcal{T}$ an eine anisotrope Funktion v misst. Für isotrope Netze oder angepasste anisotrope Netze hat diese *matching function* den Wert $\mathcal{O}(1)$, unabhängig von der Anzahl der Freiheitsgrade. Für unangepasste anisotrope Netze jedoch kann der Wert $\gg 1$ sein. Diese *matching function* geht in die obere Fehlerschranke ein, siehe auch [Kun99, Kun00a].

Implementation und Programmierung. Alle genannten Fehlerschätzer wurden in das dreidimensionale parallele Programm-Paket *Po3D* implementiert und bilden das Fehlerschätzer-Modul. Damit wurde großer Wert auf die experimentelle Bestätigung der theoretischen Aussagen gelegt. Ebenfalls wurden die theoretischen Grenzfälle untersucht, um das Versagen ungeeigneter Schätzer zu demonstrieren (siehe z.B. Lokaler-Problem-Schätzer [Kun01a]).

Netzadaption

Für einen ersten theoretischen Zugang erwies es sich als günstig, die anisotrope Netzadaption (formal) aufzuspalten in die beiden Teile *Informationsgewinnung* sowie *Netzverfeinerung*. Im Schritt *Informationsgewinnung* sind vor allem die Streckungsrichtungen und -verhältnisse und die (quasi-optimale) Elementgröße gesucht. Während sich die letzte Information aus den anisotropen *a posteriori*-Fehlerschätzern ablesen lässt, ist dies bei den Streckungsinformationen nicht der Fall. Um trotzdem die gewünschten Informationen zu erhalten, werden häufig die Hesse-Matrix der Lösung und ihre Eigenvektoren/Eigenwerte betrachtet, siehe zum Beispiel [PVMZ87].

In [Kun00b] wurde nun untersucht, welche Eigenschaften diese mit Hilfe der Hesse-Matrix gewonnenen Netze besitzen. Speziell wurde analysiert, ob die Netze mit der anisotropen Lösung ausgerichtet sind, was eine wesentliche Bedingung für die anisotropen *a posteriori* Fehlerschätzer ist (siehe vorherige Abschnitte). Es konnte gezeigt werden, dass dies unter gewissen heuristischen Annahmen der Fall ist, d.h. die oben angesprochene *matching function* liefert die gewünschten Werte $\mathcal{O}(1)$. Die heuristischen Voraussetzungen sind der heuristischen Natur der Informationsgewinnung geschuldet, wurden aber trotzdem so stringent wie möglich formuliert und numerisch analysiert. Der Preprint wurde zur Veröffentlichung eingereicht.

In der Arbeit [AGJM01] von Th. Apel, S. Grosman, P. Jimack (Leeds) und A. Meyer[5] wird eine weitere Strategie zur Steuerung der anisotropen Netzverfeinerung beschrieben. Dazu werden *a posteriori* Fehlerschätzer betrachtet, die eine Approximation des Fehlers in Form einer Funktion berechnen, z. B. durch Lösung lokaler Probleme. Die Erfahrungen zeigen, dass der Gradient dieser Fehlerfunktion das Potential zur Netzsteuerung besitzt.

In der nächsten Antragsperiode soll auf der Grundlage dieser Arbeiten mit der programmtechnischen Umsetzung der Adaption begonnen werden. Die entscheidende Forderung (und Herausforderung) ist dabei die Einbettung in eine Multigrid-/Multilevel-Programmumgebung.

Vorkonditionierung

Wir betrachten die Lösung des Finite-Elemente-Gleichungssystems

$$A\underline{u} = \underline{f}.$$

Nach der Theorie von D. Braess und W. Hackbusch [BH83] konvergiert der V-Zyklus eines Multigrid-Verfahrens mit m Glättungsschritten pro Level mit einer Rate $\kappa \leq C/(C+m)$, wenn man eine Abschätzung der Form

$$\|\underline{u}_h - \underline{u}_H\|_D \leq C\|\underline{u}_h\|_A$$

beweisen kann. Dabei sind $\underline{u}_h$ und $\underline{u}_H$ Lösungen des FE-Gleichungssystems auf zwei aufeinander folgenden Netzen $\mathcal{T}_l$ und $\mathcal{T}_{l-1}$ unserer Netzhierarchie $\mathcal{T}_0, \ldots, \mathcal{T}_L$; $\|\,.\,\|_D$ und $\|\,.\,\|_A$ sind die durch die Glättungsmatrix D_l und die Steifigkeitsmatrix A_l induzierten Normen.

[5] Aufenthalte von Th. Apel in Leeds: 14.–19.12.98, 25.06.-28.06.99, 02.07.–06.07.99, 16.–23.02.00, 06.–18.08.00, Aufenthalte von A. Meyer in Leeds: 31.5.–4.6.99, 12.–18.08.00, Aufenthalte von P. Jimack in Chemnitz: 14.–19.03.1999, 8.–11.08.1999, 7.–12.11.1999, 16.–20.04.00, 10.–15.09.00, 11.–16.03.01

Betrachten wir eine Folge von uniformen isotropen Netzen, dann folgt obige Abschätzung aus der Abschätzung der Differenz der entsprechenden Finite-Elemente-Funktionen

$$\|u_h - u_H\|_0 \lesssim h\|u_h\|_1$$

und den Normäquivalenzen

$$\|\underline{u}_h\|_D \sim h^{-1}\|u_h\|_0 \qquad \text{und} \qquad \|u_h\|_1 \sim \|\underline{u}_h\|_A.$$

Dies gilt nicht mehr für eine Folge anisotroper Netze, sogar wenn man im einfachsten Fall Rechtecksnetze aus gleich großen Elementen mit den Größenparametern $h_{\min}$ und $h_{\max}$ betrachtet. Es gilt lediglich

$$\|u_h - u_H\|_0 \lesssim h_{\max}\|u_h\|_1 \qquad \text{und} \qquad \|\underline{u}_h\|_D \sim h_{\min}^{-1}\|u_h\|_0,$$

was zur unzureichenden Abschätzung

$$\|\underline{u}_h - \underline{u}_H\|_D \lesssim \frac{h_{\max}}{h_{\min}}\|\underline{u}_h\|_A$$

führt. Als Abhilfe schlagen verschiedene Autoren, z. B. W. Hackbusch [Hac89], die Verwendung von Linienglättern vor, wobei alle Knoten, die den Abstand $h_{\min}$ voneinander haben, zu Linien zusammengefasst werden. In diesem Fall gilt

$$\|\underline{u}_h\|_D \sim h_{\max}^{-1}\|u_h\|_0 + \|\partial_y u_h\|_0,$$

was für den Beweis der gesuchten Abschätzung hinreichend ist.

Will man diese Idee auf den Fall der anisotropen graduellen Verfeinerung in der Umgebung von Kanten anwenden, so stellt man zunächst fest, dass die Elemente nur in eine Richtung gestreckt sind und in zwei Richtungen eine kleine Ausdehnung haben. Statt eines Linienglätters müsste folglich ein Ebenenglätter angewendet werden. Dies ist erfolgversprechend und wird von J. Seidel in der Diplomarbeit untersucht [Sei01]. Allerdings sind Ebenenglätter deutlich aufwendiger als Linienglätter.

Einen alternativen Zugang bildet die Verwendung von Semicoarsening-Strategien, siehe z. B. M. Griebel und P. Oswald [GO95], in denen das anisotrope Netz solange nur in einer Richtung vergröbert wird, bis keine Anisotropie mehr vorliegt. Es kann dann eine verbesserte Abschätzung

$$\|u_h - u_H\|_0 \lesssim h_{\min}\|u_h\|_1$$

bewiesen werden.

Linienglätter und Semicoarsening können auch kombiniert werden. Wir betrachten dazu das zweidimensionale Beispiel einer Folge anisotroper Netze aus Rechtecken mit den Größenparametern h_x und h_y. Für ein Multigrid-Verfahren mit Semicoarsening in x-Richtung und einem Linienglätter in y-Richtung kann man

$$\|\underline{u}_h\|_D \sim h_x^{-1}\|u_h\|_0 + \|\partial_y u_h\|_0$$

und

$$h_x^{-1}\|u_h - u_H\|_0 + \|\partial_y(u_h - u_H)\|_0 \lesssim \|u_h\|_1$$

beweisen, was auf die für den Multigrid-Konvergenzbeweis benötigte Abschätzung führt. Es ist insbesondere zu bemerken, dass diese Abschätzung unabhängig von der Streckungsrichtung der Elemente gilt.

Th. Apel und J. Schöberl[6] (Linz) schlagen nun für das dreidimensionale Problem mit Kantensingularität vor [AS00], Linienglätter in Kantenrichtung und Semicoarsening senkrecht zur Kante zu verwenden. Der Multigrid-Konvergenzbeweis erfolgt mit der genannten Technik, allerdings mit Modifikationen infolge der nicht vorhandenen Regularität ($u \notin H^2(\Omega)$) der Lösung u der Ausgangsaufgabe. Hier konnten Ideen von H. Yserentant verwendet werden, der in [Yse86b] einen Multigrid-Beweis für den zweidimensionalen Fall mit Eckensingularität führt. In [AS00] wurden die Abschätzungen

$$\|\underline{u}_h\|_D \sim h^{-1}\|r^{-\beta}u_h\|_0 + \|\partial_z u_h\|_0$$

und

$$h^{-1}\|r^{-\beta}(u_h - u_H)\|_0 + \|\partial_z(u_h - u_H)\|_0 \lesssim \|u_h\|_1$$

bewiesen, wobei h hier die maximale Elementausdehnung im Netz ist und eine wohldefinierte graduelle Netzverfeinerung zugrunde gelegt wurde.

Das so begründete Verfahren erfordert die Unterstützung des Semicoarsening durch entsprechende Datenstrukturen, ist dann aber leicht implementierbar. Die Ergebnisse in Testbeispielen sind überzeugend, siehe dazu [AS00].

2.4.4 Teilaufgabe Löser für Platten- und Schalenprobleme

Wie in 2.3.4 ausgeführt, sind die Hauptergebnisse für diese Teilaufgabe in den Arbeiten von Michael Theß [The98, The99] nachzulesen. Es wurden jeweils optimale Vorkonditionierer mit BPX-, Multigrid- und Multigrid-DD-Techniken für die Koiter-Schale bei BFS- sowie Adini-Elementen bewiesen.

Analog zu den wichtigen kubischen Ansatzfunktionen bei oben genannten Rechteckselementen wurden zu Beginn des Berichtszeitraums FE-Räume mit kubischen Polynomen und Dreiecksvernetzungen betrachtet. Mit Hilfe des *Fictitious Space Lemmas* konnte ein effizienter, gut parallelisierbarer Vorkonditionierer für den Raum mit Hermite-Dreiecken (je 3 Freiheitsgrade an Eckknoten: Wert und Gradient) angegeben werden, vorerst für den Fall von Differentialoperatoren 2. Ordnung. Hier gibt es weder eine Einbettung $\mathbb{V}_{2h}^{\mathrm{Hermite}} \not\subset \mathbb{V}_h^{\mathrm{Hermite}}$ (non nested), noch ist $\mathbb{V}_h^{(1)}$ (lineare Elemente) ein Teilraum von $\mathbb{V}_h^{\mathrm{Hermite}}$. Mit dem *Fictitious Space Lemma* gelingt wieder ein fast optimaler Vorkonditionierer unter Nutzung von

$$\ldots \subset \mathbb{V}_{2h}^{(1)} \subset \mathbb{V}_h^{(1)} \subset \mathbb{V}_h^{(3)} \quad \text{und} \quad \mathbb{V}_h^{\mathrm{Hermite}} \subset \mathbb{V}_h^{(3)},$$

[6] Aufenthalt von J. Schöberl in Chemnitz: 12.–25.07.98, Aufenthalt von Th. Apel in Linz: 13.–18.03.00

indem ein größerer Raum $\mathbb{V}_h^{(3)}$ von stückweise kubischen Funktionen als Hilfsraum benutzt wird [Mey99a, Mey99b].

In der Anwendung auf Schalen- und Plattenprobleme ergab sich nicht sofort eine Analogie beim DKT-Element. Deshalb wird seit Beginn des Jahres 2000 intensiver die modernere Behandlung solcher Probleme über die Reissner-Mindlin-Formulierung und mit der MITC-Elemente-Familie betrachtet. Hierzu begann S. Derezine innerhalb seines Promotionsstudiums mit der Einarbeitung in diese Problematik, die in der Fortsetzungsphase im Teilprojekt A11 weiterbearbeitet werden soll.

2.4.5 Teilaufgabe p- und hp-Methoden

Zur Konstruktion von Vorkonditionierungsmatrizen für Steifigkeitsmatrizen, die bei der Diskretisierung mittels p-Version der Finite-Elemente-Methode entstehen, wurde der im Abschnitt 2.3.5 beschriebene Weg genutzt.

Schur-Komplement-Vorkonditionierer

Im Rahmen der Diplomarbeit [Beu99] wurden von S. Beuchler Schur-Komplement-Vorkonditionierer basierend auf Basistransformationen in besser geeignete Polynombasen entwickelt und untersucht. Dabei konnte das optimale bzw. suboptimale Verhalten der Vorkonditionierer bezüglich wachsendem Polynomgrad p bestätigt werden.

Vorkonditionierer für das innere Problem

Die Matrix K_{I} in (2.1) (siehe Abschnitt 2.3.5) ist eine Blockdiagonalmatrix. Zu jedem finiten Element (Rechteck) gehört ein Block $K_{\mathrm{I,el}}$ von $K_{\mathrm{I}} = \mathrm{blockdiag}(K_{\mathrm{I,el}})$. Bei entsprechender Nummerierung der Unbekannten sind die Matrizen $K_{\mathrm{I,el}}$ ebenfalls Blockdiagonalmatrizen mit Blöcken $K_{\mathrm{I,el,i}}$, $i = 1, 2, 3, 4$ (für Details siehe [Beu00]). Zur Vorkonditionierung der Matrizen $K_{\mathrm{I,el,i}}$ wurden von S. Beuchler Modifikationen der in [JK97] angegebenen Vorkonditionierer vorgeschlagen. Für den entsprechenden Vorkonditionierer $C_{\mathrm{I,el}}$ wurden die Spektraläquivalenzungleichungen

$$\underline{c}(C_{I,\mathrm{el}}v, v) \leq (K_{\mathrm{I,el,i}}v, v) \leq \overline{c}(1 + \log p)(C_{I,\mathrm{el}}v, v) \qquad (2.3)$$

mit positiven, von p unabhängigen Konstanten $\underline{c}$, $\overline{c}$ für $i = 1, 2, 3, 4$ bewiesen. Die Matrix $C_{\mathrm{I,el}}$ hat $\mathcal{O}(p^2)$ Nicht-Null-Einträge. Es bestand das Ziel darin, Auflösungsverfahren für das Vorkonditionierungsgleichungssystem

$$C_{\mathrm{I,el}}\underline{u}_p = \underline{f}_p$$

zu finden, die einen Arithmetikaufwand von $\mathcal{O}(p^2)$ erfordern. Es wurde gezeigt, dass die vorgeschlagene Vorkonditionierungsmatrix $C_{\mathrm{I,el}}$ bis auf einen Faktor mit der Steifigkeitsmatrix $\widetilde{K}$ übereinstimmt, die aus der FE-Diskretisierung der folgenden Aufgabe resultiert, wenn stückweise lineare Ansatzfunktionen über gleichschenkligen, rechtwinkligen Dreiecken genutzt werden.

Gesucht ist $u \in V_0 = \{u \in H^1(\Omega_{\mathrm{el}}) \,:\, u = 0 \text{ auf } \partial\Omega_{\mathrm{el}}\}$, $\Omega_{\mathrm{el}} = (0,1) \times (0,1)$, so dass

$$a(u,v) = \langle F, v\rangle \quad \forall v \in V_0 \tag{2.4}$$

mit

$$a(u,v) = \int\limits_{\Omega_{\mathrm{el}}} (y^2 u_x v_x + x^2 u_y v_y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y, \qquad \langle F, v\rangle = \int\limits_{\Omega_{\mathrm{el}}} f v \,\mathrm{d}x\mathrm{d}y.$$

Zur Lösung der bei der FE-Diskretisierung der Aufgabe (2.4) entstehenden Gleichungssysteme wurden Mehrgitter-Verfahren eingesetzt. Im Weiteren seien

$$\begin{aligned} V_k &= \mathrm{span}\{\Phi_k^{(i)} \,:\, i \in \omega_k\}\,, \\ V_{k-1} &= \mathrm{span}\{\Phi_{k-1}^{(i)} \,:\, i \in \omega_{k-1}\}\,, \\ T_k &= \mathrm{span}\{\Phi_k^{(i)} \,:\, i \in \omega_k \setminus \omega_{k-1}\}\,. \end{aligned}$$

Dabei wird vorausgesetzt, dass für das Gebiet Ω_{el} eine Folge ineinander enthaltener Dreiecksnetze $\mathcal{T}_k$, $k = 1, 2, \ldots, \ell$, generiert wurde. Die Funktionen $\Phi_k^{(i)}$ sind die üblichen stückweise linearen Ansatzfunktionen. Die Indexmengen ω_k und ω_{k-1} enthalten die Knotennummern der Knoten im Netz $\mathcal{T}_k$ bzw. $\mathcal{T}_{k-1}$.

Konvergenzabschätzungen konnten für Mehrgitter-Verfahren vom Projektionstyp hergeleitet werden. Solche Mehrgitter-Verfahren laufen wie folgt ab:

Gegeben sei die Startnäherung $u_k^{(j,0)} \in V_k$.

1. Vorglättung

$$\begin{array}{lll} \text{Bestimme} & u_k^{(j,1)} \in u_k^{(j,0)} + T_k & : \ \|u_k^{(j,1)} - u_{k,*}^{(j,1)}\| \le \varrho_1 \|u_k^{(j,0)} - u_{k,*}^{(j,1)}\|\,, \\ \text{wobei} & u_{k,*}^{(j,1)} \in u_k^{(j,0)} + T_k & : \ a(u_{k,*}^{(j,1)}, v) = \langle F, v\rangle \quad \forall v \in T_k\,. \end{array}$$

2. Grobgitterkorrektur

$$\begin{array}{lll} \text{Bestimme} & u_k^{(j,2)} \in u_k^{(j,1)} + V_{k-1} & : \ \|u_k^{(j,2)} - u_{k,*}^{(j,2)}\| \le \varrho_2 \|u_k^{(j,1)} - u_{k,*}^{(j,2)}\|\,, \\ \text{wobei} & u_{k,*}^{(j,2)} \in u_k^{(j,1)} + V_{k-1} & : \ a(u_{k,*}^{(j,2)}, v) = \langle F, v\rangle \quad \forall v \in V_{k-1}\,. \end{array}$$

3. Nachglättung

$$\begin{array}{lll} \text{Bestimme} & u_k^{(j,3)} \in u_k^{(j,2)} + T_k & : \ \|u_k^{(j,3)} - u_{k,*}^{(j,3)}\| \le \varrho_3 \|u_k^{(j,2)} - u_{k,*}^{(j,3)}\|\,, \\ \text{wobei} & u_{k,*}^{(j,3)} \in u_k^{(j,2)} + T_k & : \ a(u_{k,*}^{(j,3)}, v) = \langle F, v\rangle \quad \forall v \in T_k\,. \end{array}$$

Setze $u_k^{(j+1,0)} = u_k^{(j,3)}$.

Für einen derartigen Mehrgitter-Algorithmus hat Schieweck [Schie86] das folgende Konvergenzresultat bewiesen. Es gilt

$$\|u_k^{(j+1,0)} - u_k\| \le \eta\, \|u_k^{(j,0)} - u_k\|\,, \tag{2.5}$$

mit

$$\eta = \varrho_2 + (1-\varrho_2)[\varrho_1 + (1-\varrho_1)\gamma][\varrho_3 + (1-\varrho_3)\gamma]\,. \tag{2.6}$$

Dabei ist u_k die Lösung des Problems: Gesucht ist $u_k \in V_k$, so dass

$$a(u_k, v_k) = \langle F, v_k\rangle \quad \forall v_k \in V_k$$

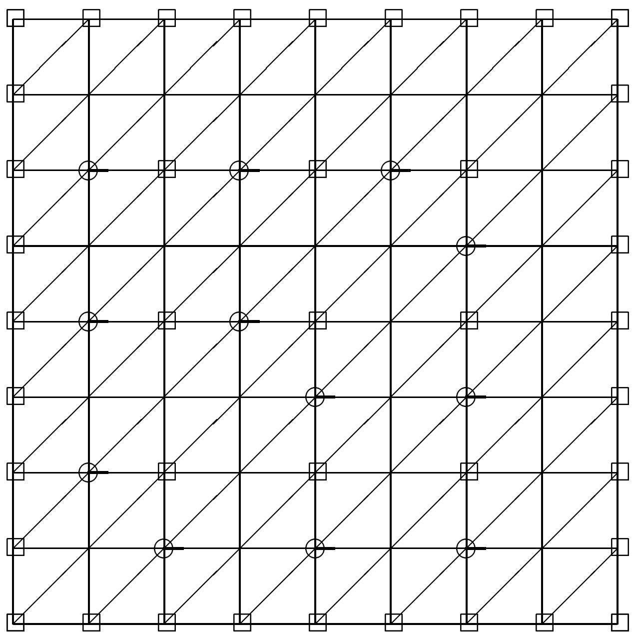
gilt. Mit $\|\cdot\|^2$ ist die energetische Norm $\|\cdot\|^2 = a(\cdot,\cdot)$ bezeichnet und γ ist Konstante aus der verstärkten Cauchy-Ungleichung

$$|a(u_k, v_{k-1})| \le \gamma \|u_k\|\|v_{k-1}\| \quad \forall u_k \in T_k\,,\ v_{k-1} \in V_{k-1}\,. \tag{2.7}$$

Zur Lösung des Grobgitterproblems im Schritt 2 des obigen Algorithmus werden rekursiv μ Iterationsschritte des Mehrgitter-Algorithmus vom Projektionstyp eingesetzt. Zur Glättung wurde ein spezieller Linienglätter verwendet. Die Idee für diesen Glätter wurde der Arbeit [AP98] entnommen. Dieser Linienglätter ist ein Jacobi-ähnlicher Glätter der Art

$$S = I - \tilde{C}_{T_k}^{-1} \tilde{K}_{T_k}, \tag{2.8}$$

wobei $\tilde{K}_{T_k}$ die auf den Raum T_k eingeschränkte Steifigkeitsmatrix $\tilde{K}$ ist. Die Matrix $\tilde{C}_{T_k}$ erhält man aus $\tilde{K}_{T_k}$ durch Wegstreichen all der Nebendiagonaleinträge a_{ij}, für die $4|a_{ij}| < a_{ii} + a_{jj}$ ist. Die Operation $\tilde{C}_{T_k}^{-1}\underline{w}$ kann mittels Cholesky-Zerlegung in arithmetisch optimalem Aufwand gelöst werden. Die folgende Graphik zeigt die Kopplung der Knoten für die Netzgröße $\frac{1}{8}$.



Knoten, die mit $\square$ markiert sind, sind Randknoten oder gehören zu ω_{k-1}, sie existieren also nicht für $\tilde{K}_{T_k}$. Die mit $\circ$ markierten Knoten werden für $\tilde{C}_{T_k}$ entkoppelt. Die verbleibenden Knoten sind jeweils entlang einer Linie gekoppelt.

Es gibt weitere Glätter, die aber auf dem Raum V_k arbeiten. Diese zeigen im allgemeinen bessere numerische Ergebnisse als der oben beschriebene, jedoch konnte die Glättungseigenschaft bisher nicht bewiesen werden.

Bei Anwendung eines Iterationsschrittes dieses Glätters im Schritt 1 und 3 des Mehrgitter-Verfahrens vom Projektionstyp erhält man

$$\varrho_1 = \varrho_3 = \frac{1}{10}\sqrt{35}\,.$$

Für die Konstante in der verstärkten Cauchy-Ungleichung (2.7) mit der Bilinearform aus (2.4) gilt

$$\gamma^2 \leq \frac{95}{176}\,.$$

Die Herleitung dieser Abschätzungen ist in der Arbeit [Beu01] von S. Beuchler enthalten. Damit erhält man aus der Abschätzung (2.5), dass die Konvergenzrate des Mehrgitter-Verfahrens vom Projektionstyp unabhängig vom Diskretisierungsparameter ist, falls $\mu \geq 3$ gewählt wird und mindestens 3 Glättungsschritte durchgeführt werden. Für $\mu = 3$ ist der Arithmetikaufwand pro Iterationsschritt des Mehrgitter-Verfahrens proportional zur Anzahl N_k der Unbekannten.

Weiterhin wurden AMLI-Vorkonditionierer [AV89, AV90] für die bei der Diskretisierung der Aufgabe (2.4) entstehende Steifigkeitsmatrix $\widetilde{K}$ analysiert. Es wurde gezeigt, dass spektraläquivalente AMLI-Vorkonditionierer unter Nutzung des speziellen Linienglätters (2.8) konstruiert werden können [Beu01].

Damit ist es gelungen, Löser zu finden, die das bei der Diskretisierung der Aufgabe (2.4) entstehende Gleichungssystem

$$\widetilde{K}\underline{u} = \underline{f}$$

mit optimalem arithmetischen Aufwand lösen. Diese Löser lässt sich nun auch auf K_I anwenden. Als Vorkonditionierer zeigt er dann die folgenden Iterationszahlen des PCG-Verfahrens bei einer relativen Genauigkeit von 10^{-9} in der vorkonditionierten Energienorm.

p	Multigrid		AMLI	
	It	time [sec]	It	time [sec]
7	15	0.008	18	0.004
15	17	0.035	23	0.039
31	20	0.148	26	0.211
63	21	0.637	29	1.031
127	22	2.988	31	4.855
255	23	13.855	33	23.637
511	24	64.539	34	114.437
1023	24	265.621	34	493.477

DD-Vorkonditionierer

Während der vergangenen Jahre entwickelte S. Beuchler durch Umarbeitung von *SPC-PM-Po2d* ein paralleles Programm *SPC-PM-Po2p* zur Lösung von Reaktions-Diffusionsgleichungen mittels der p-Version der FEM unter Benutzung von Rechtecksnetzen. Dieses Programm wird die Grundlage für den Einbau der erwähnten Vorkonditionierer für die inneren Probleme und das Schur-Komplement in einen globalen DD-Vorkonditionierer bilden, was im Rahmen des Teilprojekts A3 in der künftigen Antragsphase bearbeitet werden soll.

Literaturverzeichnis

Eigene Veröffentlichungen im Berichtszeitraum

Referierte Literatur

[Ape99a] Th. Apel. *Anisotropic finite elements: Local estimates and applications.* Advances in Numerical Mathematics. Teubner, Stuttgart, 1999. Habilitationsschrift.

[Ape99b] Th. Apel. Interpolation of non-smooth functions on anisotropic finite element meshes. *Math. Modeling Numer. Anal.*, 33:1149–1185, 1999.

[AL98] Th. Apel und G. Lube. Anisotropic mesh refinement for a singularly perturbed reaction diffusion model problem. *Appl. Numer. Math.*, 26:415–433, 1998.

[AN98] Th. Apel und S. Nicaise. The finite element method with anisotropic mesh grading for elliptic problems in domains with corners and edges. *Math. Methods Appl. Sci.*, 21:519–549, 1998.

[ANS99] Th. Apel, S. Nicaise und J. Schöberl. Crouzeix-Raviart type finite elements on anisotropic meshes. Preprint SFB393/99-10, TU Chemnitz, 1999. Erscheint in Numer. Math.

[ANS00] Th. Apel, S. Nicaise und J. Schöberl. A non-conforming finite element method with anisotropic mesh grading for the Stokes problem in domains with edges. Preprint SFB393/00-11, TU Chemnitz, 2000. Erscheint in IMA J. Numer. Anal.

[GN98] G. Globisch und S. V. Nepomnyaschikh. The hierarchical preconditioning on unstructured grids. *Computing*, 61(4):307–330, 1998.

[BJ99] B. Heise und M. Jung. Efficiency, scalability, and robustness of parallel multilevel methods for nonlinear partial differential equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 20(2):553–567, 1999.

[JR98] M, Jung und U. Rüde, Implicit extrapolation methods for variable coefficient problems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(4):1109–1124, 1998.

[Ju98] M. Jung. Parallel multi-level solvers for elliptic boundary value problems in three-dimensional domains. In W. Hackbusch und G. Wittum, Hrsg., *Multigrid Methods V.* Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Bd. 3, Springer-Verlag, Seiten 125–139, 1998.

[Ju99] M. Jung. Einige Klassen paralleler iterativer Auflösungsverfahren. Habilitationsschrift, Technische Universität Chemnitz, Fakultät für Mathematik, März 1999

[JN99] M. Jung und S. V. Nepomnyaschikh. Variable additive preconditioning procedures. *Computing*, 62:109–128, 1999.

[JM99] M. Jung und J.-F. Maitre. Some remarks on the constant in the strengthened CBS inequality: Estimate for hierarchical finite element discretizations of elasticity problems. *Numer. Methods for PDE*, 15(4):469–487, 1999.

[JNT00] M. Jung, S. Nicaise und J. Tabka. Some multilevel methods on graded meshes. Zur Veröffentlichung angenommen bei *J. Comput. Appl. Math.*, 2000.

[Kun99] G. Kunert. *A posteriori error estimation for anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes.* PhD thesis, TU Chemnitz, 1999. Logos, Berlin, 1999.

[Kun00a] G. Kunert. An a posteriori residual error estimator for the finite element method on anisotropic tetrahedral meshes. *Numer. Math.*, 86(3):283–303, 2000.

[Kun01a] G. Kunert. A local problem error estimator for anisotropic tetrahedral finite element meshes. *accepted by SIAM J. Numer. Anal.*, 2001.

[Kun01c] G. Kunert. A posteriori l_2 error estimation on anisotropic tetrahedral finite element meshes. *accepted by IMA J. Numer. Anal.*, 2001.

[KV00] G. Kunert und R. Verfürth. Edge residuals dominate a posteriori error estimates for linear finite element methods on anisotropic triangular and tetrahedral meshes. *Numer. Math.*, 86(2):283–303, 2000.

[Mey01] A. Meyer. Projected PCGM for handling hanging nodes in adaptive finite element procedures. *Numer. Linear Algebra Appl.* erscheint 2001.

[The98] M. Theß. Parallel multilevel preconditioners for thin smooth shell finite element analysis. *Numer. Linear Algebra Appl. 5, 401–440,* (1998).

[The99] M. Theß. Parallel multilevel preconditioners for thin shell problems. *Dissertation, TU Chemnitz,* (1998, verteidigt 1999).

Sonstige Arbeiten

[ABJ+00] Th. Apel, M. Berzins, P. K. Jimack, G. Kunert, A. Plaks, I. Tsukerman und M. Walkley. Mesh shape and anisotropic elements: Theory and practice. In J. R. Whiteman, Hrsg., *The Mathematics of Finite Elements and Applications X*, Seiten 367–376, Amsterdam, 2000. Elsevier.

[AGJM01] Th. Apel, S. Grosman, P. K. Jimack und A. Meyer. A new methodology for anisotropic mesh refinement based upon error gradients. Preprint 01-11, TU Chemnitz, 2001.

[AMR99] Th. Apel, F. Milde und U. Reichel. *SPC-PMPo3D* v4.0 — Programmer's Manual (Part II). Preprint SFB393/99-37, TU Chemnitz, 1999.

[ANS01] Th. Apel, S. Nicaise und J. Schöberl. Finite element methods with anisotropic meshes near edges. In M. Křížek and P. Neittaanmäki, editors, *Finite Element Methods: Three-dimesional Problems*. Erscheint 2001.

[AR99] Th. Apel und U. Reichel. *SPC-PMPo3D* v3.3 — User's Manual. Preprint SFB393/99-06, TU Chemnitz, 1999.

[AS00] Th. Apel und J. Schöberl. Multigrid methods for anisotropic edge refinement. Preprint 00-19, Johannes Kepler Universität Linz, SFB F013, 2000. Eingereicht bei *SIAM J. Numer. Anal.*

[Beu99] S. Beuchler. Lösungsmethoden bei der p-Version der FEM. Diplomarbeit, Technische Universität Chemnitz, Fakultät für Mathematik, 1999.

[Beu00] S. Beuchler. A preconditioner for solving the inner problem of the p-version of the f.e.m. Preprint SFB393/00-25, TU Chemnitz, 2000.

[Beu01] S. Beuchler. A preconditioner for solving the inner problem of the p-version of the f.e.m. Part II – Algebraic multi-grid proof. Preprint SFB393/01-07, TU Chemnitz, 2001.

[BM01] S. Beuchler und A. Meyer. *SPC-PM3AdH* v1.0 — Programmer's Manual. Preprint SFB393/01-08, TU Chemnitz, 2001.

[Glo98] G .Globisch. The hierarchical preconditioning on locally refined unstructured grids. Preprint SFB393/98_30, TU Chemnitz, 1998.

[Glo01] G .Globisch. The hierarchical preconditioning on unstructured 3D-grids with locally refined regions. Eingereicht bei *Computing*, 2001.

[JS01] M. Jung und O. Steinbach. A finite element-boundary element algorithm for inhomogeneous boundary value problems. Eingereicht bei *Computing*, 2001.

[Kun00b] G. Kunert. Anisotropic mesh construction and error estimation in the finite element method. Preprint SFB393/00_01, TU Chemnitz, 2000.
Also http://archiv.tu-chemnitz.de/pub/2000/0066/index.html.

[Kun00c] G. Kunert. Robust a posteriori error estimation for a singularly perturbed reaction–diffusion equation on anisotropic tetrahedral meshes. Preprint SFB393/00-39, TU Chemnitz, 2000.
Also http://archiv.tu-chemnitz.de/pub/2000/0086/index.html.

[Kun01b] G. Kunert. A note on the energy norm for a singularly perturbed model problem. Preprint SFB393/01-02, TU Chemnitz, January 2001. Also http://archiv.tu-chemnitz.de/pub/2001/0006/index.html.

[Kun01d] G. Kunert. Robust a posteriori error estimation for a singularly perturbed reaction–diffusion equation on anisotropic tetrahedral meshes. *submitted to Adv. Comp. Math.*, 2001.

[Kun01e] G. Kunert. Robust local problem error estimation for a singularly perturbed problem on anisotropic finite element meshes. Preprint SFB393/01-01, TU Chemnitz, January 2001.
Also http://archiv.tu-chemnitz.de/pub/2001/0001/index.html.

[Mey99a] A. Meyer. Hierarchical Preconditioners for High Order Elements and Application in Computational Mechanics. Preprint SFB393/99-02, TU Chemnitz, 1999.

[Mey99b] A. Meyer. Hierarchical Preconditioners for High Order Elements and Application in Computational Mechanics. In: *Developments in Computational Mechanics with High Performance Computing*, B. Topping (ed.) Civil Comp Press, Edinburgh 1999, S. 107–112.

[Mey99c] A. Meyer. Projected PCGM for Handling Hanging Nodes in Adaptive Finite Element Procedures. Preprint SFB393/99-25, TU Chemnitz, 1999.

In Vorbereitung befindliche Arbeiten

[JMNT01] M. Jung, A. M. Matsokin, S. V. Nepomnyaschikh und Yu. A. Tkachov. Multilevel preconditioning operators on locally modified grids. (in Vorbereitung), 2001.

[Ran01] M. Randrianarivony. Stabile Diskretisierungen des Stokes-Problems auf anisotropen Netzen. Masterarbeit, TU Chemnitz, 2001. In Vorbereitung.

[Sei01] J. Seidel. Eine Auflösungsmethode für das Finite-Elemente-Gleichungssystem bei anisotroper Diskretisierung in der Umgebung einer Kante. Diplomarbeit, TU Chemnitz, 2001. In Vorbereitung.

Weitere zitierte Literatur

[AD92] Th. Apel und M. Dobrowolski. Anisotropic interpolation with applications to the finite element method. *Computing*, 47:277–293, 1992.

[AV89] O. Axelsson und P. S. Vassilevski. Algebraic multilevel preconditioning methods I. *Numer. Math.*, 56:157–177, 1989.

[AV90] O. Axelsson und P. S. Vassilevski. Algebraic multilevel preconditioning methods II. *SIAM J. Numer. Anal.*, 27(6):1569–1590, 1990.

[AP98] O. Axelsson und A. Padiy. On the additive version of the algebraic multilevel iteration method for anisotropic elliptic problems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 1998.

[Bän91] E. Bänsch. Local mesh refinement in 2 and 3 dimensions. *IMPACT of Computing in Science and Engineering 3*, 181–191, 1991.

[BH83] D. Braess und W. Hackbusch. A new convergence proof for the multigrid method including the V-cycle. *SIAM J. Numer. Anal.*, 20:967–975, 1983.

[GO95] M. Griebel und P. Oswald. Tensor product type subspace splittings and multi-level iterative methods for anisotropic problems. *Adv. Comput. Math.*, 4:171–206, 1995.

[Hac89] W. Hackbusch. The frequency decomposition multi-grid method. Part I: Application to anisotropic equations. *Numer. Math.*, 56:229–245, 1989.

[JK97] S. Jensen und V. G. Korneev. On domain decomposition preconditioning in the hierarchical p-version of the finite element method. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 150(1-4):215–238, 1997.

[Kun97] G. Kunert. Error estimation for anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes. Preprint SFB393/97_16, TU Chemnitz, 1997.

[Nep95] S. V. Nepomnyaschikh. Fictitious space method on unstructured meshes. *East–West J. Numer. Math.*, 3(1):71–79, 1995.

[PVMZ87] J. Peraire, M. Vahdati, K. Morgan und O. C. Zienkiewicz. Adaptive remeshing for compressible flow computation. *J. Comp. Phys.*, 72:449–466, 1987.

[Rau78] G. Raugel. *Résolution numérique de problèmes elliptiques dans des domaines avec coins.* PhD thesis, Université de Rennes (France), 1978.

[Schie86] N. Schieweck. A multigrid convergence proof by a strengthened Cauchy inequality for symmetric elliptic boundary value problems. In G. Telschow, Hrsg., *Second Multigrid Seminar, Garzau, November 5–8, 1985*, S. 49–62, Karl–Weierstraß–Institut für Mathematik, Berlin, 1986. Report R–Math–08/86.

[Yse86a] H. Yserentant. On the multi–level splitting of finite element spaces. *Numer. Math.*, 49(4):379–412, 1986.

[Yse86b] H. Yserentant. The convergence of multi-level methods for solving finite-element equations in the presence of singularities. *Math. Comp.*, 47:399–409, 1986.

[Zha92] X. Zhang. Multilevel Schwarz methods. *Numer. Math.*, 63:521–539, 1992.

2.5 Offene Fragen/Ausblick

In der Berichtsperiode wurden von einer großen Anzahl von Bearbeitern umfangreiche Ergebnisse in verschiedenen Teilaufgaben erzielt, wobei der Schwerpunkt bei der Betrachtung symmetrischer, positiv definiter Probleme lag. Die Arbeit an den Teilaufgaben *Anisotropie: Fehlerschätzer und schnelle Löser* und *Löser für Platten- und Schalenprobleme* führte jedoch auch auf die Betrachtung gemischter Formulierungen für das Stokes- und das Reissner-Mindlin-Problem. Sowohl bei den definiten, als auch bei den indefiniten Problemen gibt es eine Reihe unzureichend geklärter Fragen. Zur besseren Strukturierung sollen im Fortsetzungsantrag zwei eigenständige Teilprojekte beantragt werden.

Im Teilprojekt A3 des Fortsetzungsantrags sollen weiter symmetrische, positiv definiter Probleme betrachtet werden, wobei folgende Fragen angegangen werden sollen.

- Es sollen die beschriebenen Ansätze zur adaptiven Steuerung anisotroper Netze, insbesondere die automatische Erkennung von Anisotropierichtungen im Laufe der Rechnung und eine entsprechende Ausrichtung der finiten Elemente, so modifiziert werden, dass Netzhierarchien zum Zwecke der effektiven Auflösung der entstehenden Gleichungssysteme erhalten bleiben sollen. Das Ziel besteht in der Erweiterung unserer parallelen 3D-Finite-Elemente-Software auf adaptive, anisotrope Netzsteuerung und der theoretischen Begründung der implementierten Algorithmen.

- Eine weitere Herausforderung bei anisotropen Netzen stellt die Entwicklung effektiver Gleichungslöser dar. Bekannte Algorithmen benutzen Glätter über Linien, die *a priori* gewählt werden. Des Weiteren sind für adaptive Verfahren „cascade"-artige Algorithmen besonders geeignet. Diese Zugänge sollen in einem zweiten Schwerpunkt des beantragten Projekts kombiniert und weiterentwickelt werden.

- Im Berichtszeitraum wurden Resultate zur effektiven Vorkonditionierung der bei der p-Version der FEM entstehenden Gleichungssysteme erzielt. Für einen DD-Vorkonditionierer wurde für zweidimensionale Aufgaben ein optimaler Multigrid-Löser für die Probleme im Inneren der Teilgebiete konstruiert und analysiert. Offen ist noch die Wahl eines geeigneten Fortsetzungsoperators. Für dreidimensionale Probleme ist die Lösung insgesamt noch nicht ausreichend geklärt. Beide Fragestellungen sollen in einem dritten Schwerpunkt des Projektes bearbeitet werden. Außerdem sollen die bisher entwickelten Löser auf andere Aufgabenklassen übertragen werden.

Im neuen Teilprojekt A11 geht es um die gemischten Formulierungen. Das Ziel besteht auch hier in der Entwicklung von effizienter Simulationssoftware, die auf theoretisch fundierten effizienten, d. h. adaptiven und lösungsangepaßten, parallelen Lösungsstrategien beruht.

- Bei der Simulation der Strömung viskoser Fluide entstehen Lösungen mit anisotropem Verhalten durch Kantensingularitäten oder Randschichten. Lösungsangepaßte Diskretisierungen sind folglich auch *anisotrop*. Für geeignete Elementepaare sind *a priori* Fehlerabschätzungen und *a posteriori* Fehlerschätzer für das Stokes-Problem mit anisotropen Netzen herzuleiten. Des Weiteren soll ein paralleles 3D-Finite-Elemente-Programm entstehen. Dabei soll auf den Entwicklungen in Teilprojekt A3 aufgebaut werden, durch die die adaptive Netzsteuerung inklusive Lastbalancierung sowie Komponenten des Lösers bereitgestellt werden.

  Durch diese Arbeiten wird eine wichtige Vorarbeit für eine spätere Weiterführung des Teilprojekts D3 geleistet, in dem bisher eine parallele Umsetzung eines erweiterten Navier-Stokes-Modells auf uniform und isotrop verfeinerten Netzen erfolgte.

- Für das Reissner-Mindlin-Plattenmodell soll die Diskretisierung mit MITC-Elementen und deren stabilisierten Versionen untersucht werden. Schwerpunkte sind parallele Auflösungsmethoden und *a posteriori* Fehlerschätzer.

  Eine weiteres Problem besteht im Auftreten von Randschichten bei kleiner Plattendicke. Aus der Analogie mit der singulär gestörten Reaktions-Diffusionsgleichung wird eine lösungsangepaßte Diskretisierung *anisotrop* sein. Es ist zunächst zu untersuchen, welche Elementtypen sich dafür eignen.

Teilprojekt A4

2.1 Teilprojekt A4

Parallele Algorithmen für große Gleichungssysteme, basierend auf algebraischen Zerlegungsmethoden

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Volker Mehrmann
Fachbereich 3 / Mathematik
Sektretariat MA 4–5
Technische Universität Berlin
Straße des 17. Juni 136
D–10623 Berlin

Tel. (030) 314-25736 (21264)
FAX (030) 314-79706
email: mehrmann@math.tu–berlin.de

2.1.2 Projektbearbeiter

Projektbearbeiter (Ergänzungsausstattung):
Dipl.–Math. U. Elsner (Lehrstuhl Numerische Algebra)
Dipl.–Ing. P.N. Prochkov (Lehrstuhl Numerische Algebra)

Mitarbeiter (Grundausstattung):
Dr. M. Bollhöfer (Lehrstuhl Numerische Algebra)
Dr. U. Schrader (Lehrstuhl Numerische Algebra)

2.2 Zwischenbericht

Ein ausführlicher Bericht wird bis zum 30.09.2001 vorgelegt. Es folgt ein Zwischenbericht.

Ziel des Projekts war die Entwicklung neuer numerischer Methoden zur Lösung von großen, dünn besetzten, unsymmetrischen Gleichungssystemen. Dabei sollten insbesondere allgemeine Präkonditionierungs- und Konvergenzbeschleunigungstechniken entwickelt werden, die selbststeuernd adaptiv arbeiten. Im Gegensatz zu den üblichen Ansätzen für diskretisierte partielle Differentialgleichungen sollten alle Methoden und Ansätze zur Parallelisierung auf rein algebraischen und graphentheoretischen Grundlagen entstehen. Grundlage dafür ist das nested-divide-and-conquer Verfahren (NDC), welches in [3, 5] entwickelt wurde. Weiter sollten diese neuen Methoden auf Parallelrechnern implementiert werden und der Zusammenhang dieser neuen Methoden zu algebraischen Mehrgittermethoden und Gebietszerlegungsmethoden untersucht werden. Weiterhin sollten Graphenzerlegungsmethoden zur statischen und dynamischen Lastverteilung bei der Speicherung und

Lösung von allgemeinen linearen Gleichungssytemen entwickelt werden. Insbesondere dabei die parallele Lösung dieser Zerlegeungsmethoden mittels Multilevelmethoden.

Weiterhin wurde bei der Begutachtung angeregt die Behandlung von grossen Eigenwertproblemen (eigentlich Teilprojekt A10) im Rahmen von A4 durchzuführen.

Die gestecken Ziele des Projekts sind im wesentlichen erreicht bzw. stehen kurz vor der Fertigstellung.

Es wurde ein neuer Zugang zu algebraischen Mehrgittermethoden entwickelt bei dem der Vergröberungspozess auf sparsen approximativen Inversen basiert. Diese Methode wurde implementiert und an Hand von zahlreichen Testbeispielen getestet [6, 7].

Es wurden weiterhin neue Präkonditionierer basierend auf stabilisierend faktorisierten approximativen Inversen entwickelt, [8, 9], sowie eine robuste ILU-Zerlegung auf der Basis der Kontrolle der Wachstumsfaktoren [4]. Kern dieser Untersuchungen stellten dabei die Beziehungen und Äquivalenzen zwischen unvollständigen Dreieckszerlegungen und faktoriserten schwach besetzten approximativen Inversen dar [8]. Aus diesen Beziehungen konnte zum einen durch Übertragung von Pivotisierungstechniken eine stabilisierte faktorisierte approximative Inverse entwickelt werden [9]. Zum anderen konnten die theoretischen Beziehungen aus [8] auch in die andere Richtung genutzt werden. D.h. aus der Beobachtung, dass bei vielen Problemen approximative Inverse weniger empfindlich auf die Wahl der Parameter reagieren als unvollständige Dreieckszerlegungen [9], konnte eine neue unvollständige Dreieckszerlegung konstruiert werden, bei welcher das Wachstum der Dreiecksfaktoren direkt mit dem Weglassen betraglich kleiner Einträge gekoppelt ist. Der hieraus resultierende Vorkonditionierer hat sich in numerischen Tests als extrem robust erwiesen [4].

Für die Lastbalancierungsmethoden sind parallele dynamische Multilevelmethoden entwickelt worden. Die Dissertation [10] steht kurz vor dem Abschluss.

Ebenfalls im Rahmen des Projekts wurde die Dissertation von Herrn Schrader abgeschlossen [17] bei der monotonieerhaltende Diskretisierungsmethoden und deren numerische Umsetzung untersucht wurden.

Im Rahmen der Behandlung von Eigenwertproblemen sind verschiedene Untersuchungen durchgeführt worden und auch zahlreiche Fortschritte gemacht worden.

So wurde ein intensiver Vergleich verschiedener Techniken, wie sie in den Teilprojekten C1,C2, C6 genutzt werden gemacht der zeigt, dass moderne Eigenwertverfahren im Moment keine echt Alternative zum klassischen unsymmetrischen Lanczos-Verfahren darstellen [11].

Weiterhin wurde ein Eigenwertproblem, welches bei der Behandlung von Elasitizitätsproblemen für anisotrope Materialien auftritt untersucht und strukturerhaltende schelle implizit-gestartete Arnoldi-Methoden entwickelt, [16]. Im Rahmen dieser Methoden werden schnelle Faktorisierung für schiefsymmetrische matrizen benötigt. Dafür wurde eine neue Faktorisierung entwickelt und anlysiert [2].

Weiterhin wurden inverse Eigenwertprobleme studiert und neue Ergebnisse zur Lösung des rekursiven inversen Eigenwertproblems erarbeitet [1] und kanonische Formen für mehrfach strukturierte Eigenwertprobleme entwickelt [14].

Ferner wurden normale Matrizen in idefiniten Produkten näher untersucht, um dadurch eine verallgemeinerte Theorie verschiedener strukturierter Eigenwertprobleme zu erhalten [12], [13], [15].

Einige weitere Untersuchungen zu Eigenwertproblemen und Gleichungsszstemlösern stehen kurz vor dem Abschluss.

Zusammenarbeit mit A3, C1.

Literaturverzeichnis

[1] M. Arav, D. Hershkowitz, V. Mehrmann und H. Schneider, 'The Recursive Inverse Eigenvalue Problem', *Preprint SFB393/99-09, Sonderforschungsbereich 393, 'Numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern'*, Fakultät für Mathematik, TU Chemnitz, *SIAM Journal Matrix Analysis and Applications*, 22:392–412, 2000.

[2] P. Benner, R. Byers, H. Faßbender, V. Mehrmann und D. Watkins, 'Cholesky-like factorizations of skew-symmetric matrices', *Preprint SFB393/00-35, Sonderforschungsbereich 393, 'Numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern'*, Fakultät für Mathematik, TU Chemnitz,) *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, 11:85–93, 2000.

[3] M. Bollhöfer. *Algebraic Domain Decomposition.* PhD thesis, TU Chemnitz, Fak. f. Mathematik, March 1998.

[4] M. Bollhöfer. A robust ILU based on monitoring the growth of the inverse factors. Preprint SFB393/00–31, TU Chemnitz, Fak. f. Mathematik, July 2000. Submitted to Lin. Alg. App.

[5] M. Bollhöfer and V. Mehrmann. Nested divide & conquer methods for the solution of large sparse linear systems. Preprint SFB393/98_05, TU Chemnitz, Fak. f. Mathematik, 1998.

[6] M. Bollhöfer and V. Mehrmann. A new approach to algebraic multilevel methods based on sparse approximate inverses. Preprint SFB393/99–22, TU Chemnitz, Fak. f. Mathematik, August 1999.

[7] M. Bollhöfer and V. Mehrmann. Algebraic multilevel methods and sparse approximate inverses. Preprint, TU Chemnitz, Fak. f. Mathematik, Oct. 1999. Submitted SIAM Matrix. Anal. App.

[8] M. Bollhöfer and Y. Saad. *ILU*s and factorized approximate inverses are strongly related. Part I: Overview of results. Technical Report umsi–2000-39, Minnesota Supercomputer Institue, University of Minnesota, 2000. Submitted to SIAM Matrix. Anal. App.

[9] M. Bollhöfer and Y. Saad. *ILU*s and factorized approximate inverses are strongly related. Part II: Applications to stabilization. Technical Report umsi–2000-70, University of Minnesota at Minneapolis, Dep. of Computer Science and Engineering, 2000. Submitted to SIAM Matrix. Anal. App.

[10] U. Elsner,

Dissertation, Fak. f. Mathematik, TU Chemnitz, in Vorbereitung.

[11] U. Elsner, V. Mehrmann, F. Milde, R.A. Römer, M. Schreiber, 'The Anderson Model of Localization: A Challenge for Modern Eigenvalue Methods', *SIAM Journal Scientific Computing*, 20:2089–2102, 1999.

[12] B. Lins, P. Meade, C. Mehl, L. Rodman, 'Normal matrices and polar decompositions in indefinite inner products', *Preprint SFB393/00-12, Sonderforschungsbereich 393, 'Numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern'*, Fakultät für Mathematik, TU Chemnitz,) erscheint in *Linear und Multilinear Algebra.*

[13] B. Lins, P. Meade, C. Mehl, L. Rodman, 'Polar decompositions of indecomposable normal matrices in indefinite inner products: Explicit formulas and open problems', *Preprint 2000-9, Fakultt fr Mathematik, Technische Universitt Chemnitz, 2000.*

[14] C. Mehl, V. Mehrmann und H. Xu, 'Canonical forms for doubly structured matrices and pencils', *Preprint SFB393/00-27, Sonderforschungsbereich 393, 'Numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern'*, Fakultät für Mathematik, TU Chemnitz,) *Electronic Journal on Linear Algebra*, 7:112–151, 2000.

[15] C. Mehl, L. Rodman, 'Classes of normal matrices in indefinite inner products', erscheint in *Linear Algebra Appl.*

[16] V. Mehrmann und D. Watkins. 'Structure-preserving Methods for Computing Eigenpairs of Large Sparse Skew-Hamiltonian/Hamiltonian Pencils', *Preprint SFB393/00-02, Sonderforschungsbereich 393, 'Numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern'*, Fakultät für Mathematik, TU Chemnitz, erscheint in *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2001.

[17] U. Schrader, Invers–isotone Diskretisierungsmethoden für invers–isotone lineare und quasilineare Zwei–Punkt–Randwertaufgaben. *Dissertation, Fak. f. Mathematik, TU Chemnitz*, Januar 2001

Teilprojekt A7

2.1 Teilprojekt A7

Biorthogonale Waveletbasen zur effizienten Behandlung für Randintegralgleichungen

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Reinhold Schneider
geb. 20.03.1957
Professur Numerik (Partielle Differentialgleichungen)
Fakultät für Mathematik
Technische Universität Chemnitz
09107 Chemnitz
Tel.: (0371) 531-8441
Fax: (0371) 531-2657
reinhold.schneider@mathematik.tu-chemnitz.de

2.1.2 Projektbearbeiter

Name(n) des/der Projektbearbeiter/Mitarbeiter, Lehrstuhl, Fachgruppe

Dr. Christian Bourgeois (Projektberarbeiter, vorübergehend)
Dipl.-Math. Helmut Harbrecht (Projektbearbeiter / Grundausstattung)
Doz. Dr. Michael Jung (Grundausstattung)
Dipl.-Math. Michael Konik (Grundausstattung / Projektbearbeiter)
Dipl.-Ing. Cristian Pérez (Projektbearbeiter, vorübergehend)

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Gegenstand des Teilprojektes A7 war die effiziente Behandlung von Randintegralgleichungsmethoden mittels Waveletbasen. Randintegralgleichungsmethoden eignen sich vielfach zur numerischen Lösung bestimmter Randwertprobleme partieller Differentialgleichungen, wie beispielsweise Außenraumprobleme der Akustik und der Elektrostatik sowie Randwertprobleme der Elastizitätstheorie und der Strömungsmechanik. Anstatt eine Diskretisierung des Gebietes bzw. des unbeschränkten Außenraumes vorzunehmen, wird zur Lösung einer Randintegralgleichung lediglich die Oberfläche des Gebietes diskretisiert. Dies reduziert erheblich die Anzahl der erforderlichen Freiheitsgrade zur Approximation der Lösung. Ein wesentlicher Nachteil beim Einsatz von Randelementmethoden besteht jedoch darin, dass die auftretenden Matrizen vollbesetzt sind. Im Gegensatz dazu führen z.B. Finite-Elemente-Methoden im allgemeinen zu dünn besetzten Matrizen.

Ziel und Aufgabe moderner effizienter Methoden zur Lösung von Integralgleichungen [GR, HANO, GI, GT, HA, RO, TYR] ist es den Aufwand zur Lösung auf eine asymptotisch nahezu optimale Ordnung zu reduzieren ohne die Genauigkeit der Verfahren zu beeinträchtigen. Bedeutsam hierbei ist sowohl die Reduktion des erforderlichen Speicherplatzes als auch der Rechenzeiten. Während zur traditionellen Darstellung der Systemmatrix $\mathcal{O}(N^2)$ Matrixeinträge erforderlich sind, N sei hier die Anzahl der Gleichungen, reduzieren diese Methoden den Aufwand für eine Matrix-Vektor-Multiplikation auf eine fast optimale Rate $\mathcal{O}(N \log^a N)$ oder gar optimale Rate $\mathcal{O}(N)$. Waveletbasen offerieren ebenfalls eine Möglichkeit dies zu erreichen [BCR]. Die Verwendung von Waveletbasen, z.B. im Rahmen des Galerkin-Verfahrens, führt zu quasi dünn besetzten Matrizen. Dies bedeutet, dass ein Großteil der Matrixeinträge vernachlässigt werden kann ohne das Ergebnis wesentlich zu beeinträchtigen [DPS2]. Der Antragstellung gingen grundlegende Entwicklungen dieser Methoden voraus [DPS1, DPS2, DPS3, S, PSS], an der der Antragsteller aktiv beteiligt war. Im Berichtszeitraum sollten das vom Antragsteller mitentwickelte Konzept [S, DPS3, DSII], wie u.a. die Anwendung biorthogonaler Waveletbasen [CDF, DS1], und die direkte Generierung der komprimierten Matrix [S, PS2] realisiert und weiterentwickelt werden. Die Verbindung dieser Methoden mit Finite-Elemente-Methoden, die die Vorteile beider Methoden vereinigt, wurde im Berichtszeitraum begonnen.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

Schnelle Methoden zur Lösung von Randintegralgleichungen eröffnen für die Randelementmethoden neue und bislang ungeahnte Möglichkeiten. Darüberhinaus initiieren sie die Entwicklung neuer Verfahren, welche auf Darstellungen beruhen, die ehemals viel zu aufwendig waren, aber mit Hilfe dieser neuen Ansätze wesentlich effizienter werden. Als Beispiel seien genannt das Aufstellen der inversen Matrix einer Finite-Elemente-Berechnung, Funktionen von Operatoren wie $\mathbf{A}^{-1}$, $e^{-t\mathbf{A}}$ usw. [HAK]. Abgesehen von Vorläufervarianten waren die ersten schnellen Methoden für Integralgleichungen die *Fast Multipole Methode* [GR, RO] und das unabhängig davon entwickelte *Panel Clustering* [HANO]. Beide Methoden sind inzwischen weiterentwickelt worden und finden in verschiedenen Anwendungen Einsatz. Diesen Verfahren ist gemeinsam, daß das Potential lokal unterschiedlich approximiert wird um die Matrix-Vektor-Multiplikation zu beschleunigen. Die eigentliche Systemmatrix wird dabei nicht direkt aufgestellt. Dies bedeutet in Termen der Matrix eine Approximation ganzer Matrixblöcke durch Matrizen von niedrigem Rang. Diese Vorgehensweise wurde im Konzept der hierarchischen Matrizen [GT, HA, HAS] zu einem sehr allgemeinen und flexiblen Werkzeug formuliert.

2.3.1 Teilaufgabe Biorthogonale Waveletbasen für BEM

Wavelet- und Multilevelverfahren [BCR, BL, DPS3, HS] stellen eine Alternative dar, die inhaltlich den obigen Verfahren sehr nahe kommt, aber die besonderen Eigenschaften spezieller Wavelet- oder Multislevelbasen ausnutzt. Diese Methoden besitzen den Vorteil sich mit der effizienten Darstellung der Lösung verbinden zu lassen [CDD1, CDD2]. Hierbei wird die Anzahl der erforderlichen Matrixkoeffizienten drastisch reduziert. Diese *Matrixkompressionsmethoden* wurden in den vergangenen Jahren untersucht und sind mittlerweile gut verstanden. Dabei erwies sich der Einsatz der Matrixkompressionstechnik für Randintegralgleichungen als schwierig, da sich weder die ursprünglichen Konzepte der Waveletbasen noch Standardtechniken der Randelementmethoden wie das Panelverfahren einfach auf die neue Situation anwenden ließen.

Nach Wissen des Antragstellers ist die Arbeitsgruppe in Chemnitz eine der wenigen Gruppen, die mittlerweile Randintegralgleichungen effizient mit Hilfe von Waveletbasen zu lösen versteht. Sie ist vermutlich die einzige Gruppe, die die vielfältigsten Randintegralgleichungen in 3D, d.h. sowohl erster als auch zweiter Art, auch hypersinguläre Integraloperatoren, effizient mittels Wavelets behandeln kann. Die Arbeitsgruppe von C. Schwab (ETH Zürich) hat ebenfalls eine Implementierung von Waveletverfahren zur Lösung von Randintegralgleichungen vorzuweisen [LS, LSB, SCS]. Deren Realisierungen basieren auf unstetigen *Multiwavelets* [PSS] und beschränken sich aus diesem Grund auf Gleichungen zweiter Art. A. Rathsfeld betrachtet bei seinen konkreten Berechnungen ein geodätisches Problem [RA1, RA2] und behandelt daher nur ein rechteckiges Gebiet oder eine Kugel. Neuere Arbeiten von K. Amaratunga [AMA] basieren auf dem *Lifting Scheme* [SW] bzw. der *Stable completion* [CDP]. Dies wurde in [DPS3, S] vorgeschlagen. Erste Implementierungen dieser Idee wurden in einer Diplomarbeit [WES] durchgeführt mit vergleichbaren Ergebnissen. In der Arbeitsgruppe M. Griebel (Uni Bonn) liegen bezüglich der Waveletmatrixkompression Erfahrungen mit Geometrien vor, die den Tensorproduktansatz unterstützen. Dies sind in der Regel rechtwinklige Gebiete [GOS, KK].

In enger Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von W. Dahmen (RWTH Aachen) wurden vom Antragsteller biorthogonale Waveletbasen auf Gebieten und Mannigfaltigkeiten [DS1] entwickelt, gegebenenfalls unter Einbeziehung homogener Randbedingungen [DS2], die es erlauben Waveletmethoden für Randintegralgleichungen in 3D als auch für Randwertprobleme und Anfangsrandwertprobleme anzuwenden. Diese Waveletbasen können global stetig gewählt werden und erfüllen die Erfordernisse der Theorie, vgl. Abbildung 2.1. Ähnliche Konstruktionen wurden etwa zeitgleich von [CTU, CM] zur Behandlung von elliptischen Differentialgleichungen vorgelegt. Wavelets optimaler Regularität auf Mannigfaltigkeiten wurden in [DSI] vorgeschlagen, allerdings ist hierbei der Aufwand der praktischen Realisierung beträchtlich.

Geradezu komplementär zu den bisherigen Methoden ist ein neuartiger Zugang von J. Tausch und J. White [TW], der sehr vielversprechend erscheint. Die Hierarchie der Funktionenräume wurde bislang durch Verfeinerung einer groben Ausgangstriangulierung definiert. Dagegen liegt in [TW] eine übliche feine Diskretisierung zugrunde. Die Hierarchie der Funktionenräume wird durch Vergröbern oder Agglomeration generiert. Diese Methode scheint nach unseren Erfahrungen und Vorstellungen sehr erfolgversprechend. So lassen sich mit dieser Methode die Vorteile der Waveletapproximation mit denen der Fast Multipole Methode verbinden. Der Fortsetzungsantrag zum Teilprojekt A7 basiert in wesentlichen Teilen auf dieser Konstruktion.

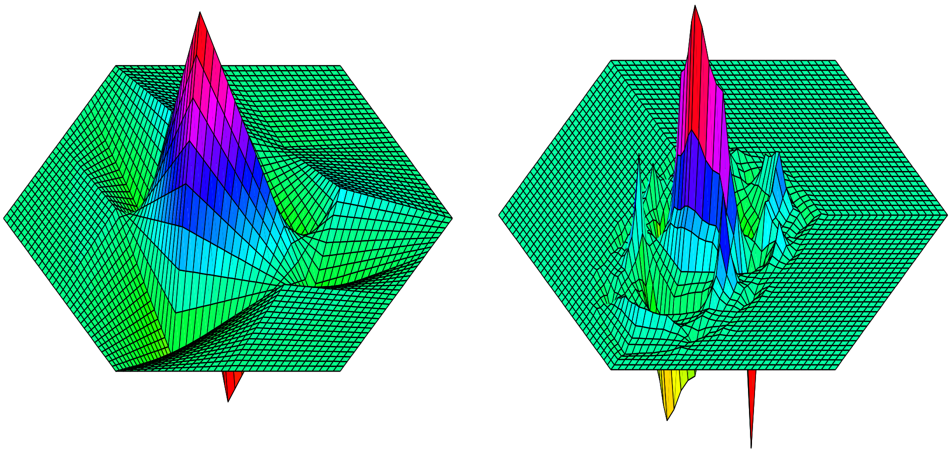


Abbildung 2.1: Global stetige lineare Wavelets nahe einer degenerierten Ecke.

2.3.2 Teilaufgabe Volldiskrete Wavelet-Galerkin-Verfahren

Zur Kompression wurde in mehreren Arbeiten eine Strategie entworfen, die die Konvergenzordnung, beispielsweise des Galerkin-Verfahrens, nicht beeinträchtigt [DPS2, DPS3, DSII, PS, PSS, S]. Die Kriterien nach denen entschieden wird, ob ein Matrixkoeffizient benötigt wird oder nicht, hängen lediglich von den Waveletindizes bzw. der räumlichen Position der Wavelets ab [DPS3, S]. Die Berechnung der relevanten Matrixkoeffizienten erfordert geeignete numerische Integrationsmethoden, da eine analytische Berechnung der auftretenden Integrale i.a. nicht möglich ist. Effiziente Berechnungen dieser Matrixkoeffizienten basieren zumeist auf adaptiven Zerlegungen des Integrationsgebietes und analytischen Integranden. Die ersten Vorschläge finden sich in [S, PS2] und basieren auf den zusammengesetzten Quadraturmethoden von [SWA] für die fast singulären Integrale und Techniken von S. Sauter für die singulären Integrale [SAT, SAS]. Die ersten Implementierungen erwiesen sich als langsam, sind aber mittlerweile deutlich verbessert worden [KDIS, HDIS]. Für das Kollokationsverfahren wurden in [ER] Produktintegrationsformeln entwickelt, die mit einer beschränkten Glattheit auskommen. Insgesamt erweist sich das Berechnen der Koeffizienten im Verhältnis zum Lösen des Gleichungssystems als relativ teuer. Erfahrungen von S. Schwab und C. Lage [LS, LSB] belegen, dass sich die Rechenzeiten des Wavelet-Galerkin-Verfahren im Vergleich zum Panel Clustering bezüglich der Kompression günstiger, aber bezüglich der Quadratur der erforderlichen Integrale ungünstiger verhalten. In der Arbeitsgruppe des Antragstellers wurden verschiedene Lösungen erarbeitet, die den Aufwand zum Generieren der komprimierten Matrix reduzieren [KDIS, HDIS, RS, KRS].

2.3.3 Teilaufgabe Kopplung der Waveletmatrixkompression mit Finiten Elementen

Die Einsatzmöglichkeiten von Randintegralgleichungsmethoden beschränken sich in der Regel auf lineare Randwertprobleme. Nichtlineare Phänomene sind im allgemeinen lokaler Natur, d.h. auf Teilgebiete begrenzt, während außerhalb dieser

Teilgebiete eine einfache (lineare) Modellierung zulässig bleibt. In dieser Situation lassen sich Finite-Elemente-Methoden zur Behandlung der nichtlinearen Gleichungen und Integralgleichungsmethoden im Restgebiet koppeln [CS, CKL, GS, HAN], wodurch die Vorteile beider Methoden verbunden werden. Diese Methodik ist mittlerweile weiterentwickelt worden und findet vielfach Einsatz [CKL].

In der letzten Antragsperiode wurde die Kopplung zwischen Finite-Elemente-Methoden und Randelementmethoden untersucht, obwohl dies ursprünglich erst später vorgesehen war. Die bislang entwickelten Waveletkonzepte bieten sich hervorragend zum Einsatz für die Kopplung von FEM und BEM an, denn der Koppelrand wird künstlich gewählt. Dabei will man sich nicht nur auf einfache Standardgeometrien, wie die Sphäre oder eine Würfeloberfläche, beschränken. Doch kann der Koppelrand so gewählt werden, dass die geometrische Komplexität die in den numerischen Beispielen behandelten Modellgeometrien nicht nennenswert übersteigt, vgl. Abbildung 2.2.

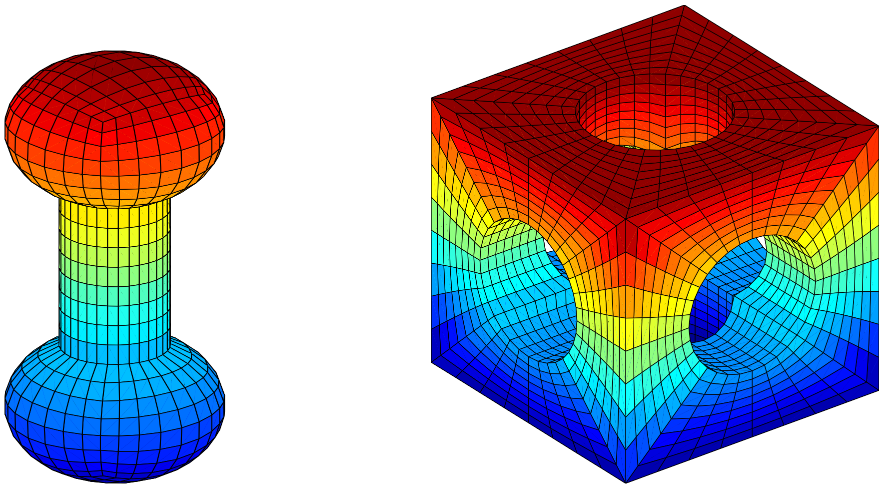


Abbildung 2.2: Gerechnete Modellgeometrien, dargestellt mit 14 bzw. 48 Patches.

Mit der Kopplung sollten darüberhinaus Schnittstellen geschaffen werden, die eine Basis für eine enge Zusammenarbeit mit der Gruppe um A. Meyer liefern soll. Die Kopplung von Wavelets zur Behandlung von Randintegralgleichungen und Multilevelverfahren für Finite Elemente wurden vorher lediglich von S. Zaprianov in seiner Dissertation [ZAP] behandelt. Allerdings stand dort vornehmlich die Vorkonditionierung der gekoppelten Systemmatrizen im Vordergrund. Die Kopplung von *komprimierten* Waveletverfahren mit Finite-Elemente-Methoden wurde in dieser Arbeit nicht betrachtet.

Im Gegenzug trat die Behandlung der *adpativen Approximation* auf Basis der *Nichtlinearen Approximation* [DELU, DEV] etwas zurück. Auf diesem Gebiet wurden von A. Cohen, W. Dahmen und R. deVore unlängst fundamentale Fortschritte erzielt [CDD1, CDD2].

Literaturverzeichnis zu 2.3 (eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

[AMA] K. Amaratunga, A wavelet based approach for the compression of kernel data in large scale simulations of 3D integral problems, *IEEE Comput. Sci. Enging.*, **2**, 34–45, (2000).

[BDD] A. Barinka, T. Barsch, P. Charton, A. Cohen, S. Dahlke, W. Dahmen, K. Urban, Adaptive Wavelet Schemes for Elliptic Problems – Implementation and Numerical Experiments, *IGPM RWTH Aachen Preprint*, Nr. 173, (1999), erscheint in *SIAM J. Sci. Comput.*.

[BCR] G. Beylkin, R. Coifman, V. Rokhlin, The fast wavelet transform and numerical algorithms, *Comm. Pure Appl. Math.*, **44**, 141–183, (1991).

[BL] A. Brandt, A.A. Lubrecht, Multilevel matrix multiplication and fast solution of integral equations, *J. Comp. Phys.*, **90**, 348 – 370, (1991).

[CTU] C. Canuto, A. Tabacco, K. Urban, The wavelet element method, part I: Construction and analysis, *Appl. Comp. Harm. Anal.*, bf 6, 1–52, (1999).

[CDP] J.M. Carnicer, W. Dahmen, J.M. Peña, Local decomposition of refinable spaces, *Appl. Comp. Harm. Anal.*, **3**, 127–153, (1996).

[CKL] C. Carstensen, M. Kuhn, U. Langer, Fast parallel solvers for symmetric boundary element domain decomposition methods, *Num. Math.*, **79**, 321–347, (1998).

[CDD1] A. Cohen, W. Dahmen, R. DeVore, Adaptive wavelet schemes for elliptic operator equations – Convergence rates, *Math. Comp.*, **70**, 27–75, (2001).

[CDD2] A. Cohen, W. Dahmen, R. DeVore, Adaptive Wavelet Methods II - Beyond the Elliptic Case, *IGPM RWTH Aachen Preprint*, Nr. 199, (2000).

[CDF] A. Cohen, I. Daubechies, J.-C. Feauveau, Biorthogonal bases of compactly supported wavelets, *Comm. Pure Appl. Math.*, **45**, 485–560, (1992).

[CM] A. Cohen, R. Masson, Wavelet adaptive method for second order elliptic problems – boundary conditions and domain decomposition, *Num. Math.*, **86**, 193–238, (2000).

[CS] M. Costabel, E.P. Stephan, Coupling of finite element and boundary element methods for an pseudo-plastic interface problem, *SIAM J. Numer. Anal.*, **27**, 1212–1226, (1988).

[DPS1] W. Dahmen, S. Prössdorf, R. Schneider, Wavelet approximation methods for periodic pseudodifferential equations. Part 1 - Convergence analysis, *Math. Zeitschrift*, **215**, 583–620, (1994).

[DPS2] W. Dahmen, S. Prössdorf, R. Schneider, Wavelet approximation methods for periodic pseudodifferential equations. Part 2 - Fast solution and matrix compression, *Advances in Computational Mathematics*, **1**, 259–335, (1993).

[DPS3] W. Dahmen, S. Prössdorf, R. Schneider, Multiscale methods for pseudodifferential equations on smooth manifolds, in: *Proceedings of the International Conference on Wavelets: Theory, Algorithms, and Applications,* C.K. Chui, L.

Montefusco, L. Puccio (eds.), *Wavelet Analysis and Applications*, **5**, Academic Press, 385–424, (1994).

[DS1] W. Dahmen, R. Schneider, Composite wavelet bases for operator equations, *Math. Comp.*, **68**, 1533–1567, (1999).

[DS2] W. Dahmen, R. Schneider, Wavelets with complementary boundary conditions, Function spaces on the cube, *Result. Math.*, **34**, 255–293, (1998).

[DSI] W. Dahmen, R. Schneider, Wavelets on manifolds I. Construction and domain decomposition, *SIAM J. Math. Anal.*, **31**, 184–230, (1999).

[DSX] W. Dahmen, R. Schneider, Y. Xu, Nonlinear functionals of wavelet expansions – Adaptive reconstruction and fast evaluation, *Numer. Math.*, **86**, 40–101, (2000).

[DELU] R. DeVore, B.J. Lucier, Wavelets, *Acta Numerica*, **1**, 1–56, (1991).

[DEV] R. DeVore, Nonlinear Approximation, *Acta Numerica*, **7**, 51–150, (1998).

[ER] S. Ehrich, A. Rathsfeld, Piecewise linear wavelet collocation on triangular grids, Approximation of the boundary manifold and quadrature, *WIAS Preprint*, Nr. 434, Berlin, (1998).

[GS] G. Gatica, G. Hsiao, On the coupled BEM and FEM for a nonlinear exterior Dirichlet problem in $\mathbb{R}^2$, *Numer. Math.*, **61**, 171–214, (1992)

[GG] T. Gerstner, M. Griebel, Numerical Integration using Sparse Grids, *Numer. Algorithms*, **18**, 209–232, (1998).

[GI] K. Giebermann, Multilevel representation of boundary integral operators, *SFB 256 Preprint*, Uni Bonn, Nr. 637, (2000).

[GT] S.A. Goreinov, E.E. Tyrtischnikov, A.Y. Yeremin, Matrix-free iterative solution strategies for large dense linear systems, *Numer. Linear Algebra Appl.*, **4**, 273–294, (1997).

[GR] L. Greengard, V. Rokhlin, A fast algorithm for particle simulation, *J. Comput. Phys.*, **73**, 325–348, (1987).

[GK] M. Griebel, S. Knapek, Optimized tensor-product approximation spaces, *Constructive Approximation*, **16**, 525–540, (2000).

[GO] M. Griebel, P. Oswald, Remarks on the abstract theory of additive and multiplicative Schwarz algorithms, *Numer. Math.*, **70**, 163–180, (1995).

[GOS] M. Griebel, P. Oswald, T. Schiekofer, Sparse grids for boundary integral equations, *Numer. Math.*, **83**, 279–312, (1999).

[HA] W. Hackbusch A sparse matrix arithmetic based on $\mathcal{H}$-matrices, Part I: Introduction to $\mathcal{H}$-matrices, *Computing*, **62**, 89–108, (1999).

[HAK] W. Hackbusch, B. Khoromskij, Towards $\mathcal{H}$-matrix approximation of linear complexity, *MPI Leipzig Preprint*, Nr.15, (2000).

[HAS] W. HACKBUSCH, B. KHOROMSKIJ, S.A. SAUTER, On $\mathcal{H}^2$ matrices, in: *Lectures on Applied Mathematics*, Eds. H.-J. Bungartz, R.H.W. Hoppe, C. Zenger, 9–30, Springer-Verlag, Heidelberg (2000).

[HANO] W. HACKBUSCH, Z.P. NOWAK, On the fast matrix multiplication in the boundary element method by panel clustering, *Numer. Math.*, **54**, 463–491, (1989).

[HAN] H.HAN, A new class of variational formulation for the coupling of finite and boundary element methods, *J. Comput. Math.*, **8** (3), 223–232, (1990).

[KK] S. KNAPEK, F. KOSTER, Integral operators on sparse grids, erscheint in *SIAM J. Numer. Anal.*

[LS] C. LAGE, C. SCHWAB, Advanced boundary element algorithms, *The mathematics of finite elements and applications X, MAFELAP 1999*, J.R. Whiteman (ed.), Proceedings of the 10th conference, Brunel Univ., Uxbridge, Middlesex, GB, June 22–25, 1999. Amsterdam: Elsevier, 283-306 (2000).

[LSB] C. LAGE, C. SCHWAB, Wavelet Galerkin algorithms for boundary integral equations, *SIAM J. Sci. Comput.*, **20**, 2195–2222, (1999).

[LA] U. LANGER, Parallel iterative solution of symmetric coupled FE/BE-equations via domain decomposition, *Contempary Mathematics*, 335–344, (1994).

[PS1] T. VON PETERSDORFF, C. SCHWAB, Wavelet approximation of first kind integral equations in a polygon, *Numer. Math.*, **74**, 479–516, (1996).

[PS2] T. VON PETERSDORFF, C. SCHWAB, Fully discretized Multiscale Galerkin BEM, erscheint in *Multiscale Methods: Wavelet Analysis and Applications*, W. Dahmen, A. Kurdila, P. Oswald (eds.), Academic Press.

[PSS] T. VON PETERSDORFF, R. SCHNEIDER, C. SCHWAB, Multiwavelets for second kind integral equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, **34**, 2212–2227, (1997).

[RA1] A. RATHSFELD, A wavelet algorithm for the boundary element solution of the geodetic boundary value problem, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, **157**, 267–287, (1998).

[RA2] A. RATHSFELD, A wavelet algorithm for the solution of a singular integral equation over a smooth two-dimensional manifold, *Journal of Integral Equations and Applications*, **10**, 445–501, (1998).

[RO] V. ROKHLIN, Rapid solution of integral equations of classical potential theory, *J. Comp. Phys.*, **60**, (1985).

[SAT] S. SAUTER, Über die effiziente Verwendung des Galerkin-Verfahrens zur Lösung Fredholmscher Integralgleichungen, *Dissertation*, Christian-Albrecht-Unviersität, Kiel, (1992).

[SAS] S. SAUTER, C. SCHWAB, Quadrature for *hp*-Galerkin BEM in $\mathbf{R}^3$. *Numer. Math.*, **78**, 211–258, (1997).

[SCS] G. SCHMIDLIN, C. SCHWAB, Wavelet Galerkin BEM on unstructured meshes by aggregation, *SAM Preprint ETH Zürich*, Nr. 15, (2000).

[S] R. Schneider, Multiskalen- und Wavelet-Matrixkompression: Analysisbasierte Methoden zur Lösung großer vollbesetzter Gleichungssysteme, Habilitationsschrift, TH Darmstadt, (1995), *Advances in Numerical Mathematics*, Teubner Stuttgart, (1998).

[SWA] C. Schwab, Variable order composite quadrature of singular and nearly singular integrals, *Computing*, **53**, 173–194, (1994).

[SW] W. Sweldens, The lifting scheme: A custom-design construction of biorthogonal wavelets, *Appl. Comput. Harmon. Anal.*, **3**, 186-200, (1996).

[TW] J. Tausch, J. White, Multiscale bases for the sparse representation of boundary integral operators on complex geometry, *Preprint SMNU*, (1999).

[TYR] E.E. Tyrtyshnikov, Mosaic sceleton approximation, *Calcolo*, **33**, 47–57, (1996).

[WES] F. Wessollek, Berechnung elektrostatischer Felder mittels Waveletmethoden *Diplomarbeit*, FB Mathematik, TU Darmstadt, (1997).

[ZAP] S. Zaprianov, Wavelet-Präkonditionierer für schwach- und hypersinguläre Integralgleichungen sowie Kopplungsprobleme, *Dissertation*, Universität Hannover, (1997).

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe Waveletbasen für 3D BEM

Seit Beginn der Arbeit im SFB 393 konzentrierten sich die Anstrengungen im Teilprojekt A7 auf die Entwicklung und Realisierung geeigneter Waveletbasen. Basierend auf den Arbeiten [DPS3, S, DSII] wurden entsprechende Waveletapproximationsverfahren entwickelt. Dabei muss betont werden, dass in der Arbeit [DS1] ein allgemeines Konstruktionsprinzip vorgestellt wurde, das eine Reihe von Freiheiten hinsichtlich der konkreten Realisierung lässt. Wie die numerischen Beispiele belegen, weist das zugehörige Wavelet-Galerkin-Verfahren ein asymptotisch optimales oder fast optimales Verhalten auf. Allerdings kann die generische Konstante, die sich in den asymptotischen Abschätzungen findet, sehr unterschiedlich ausfallen. Auch die Anzahl der Freiheitsgrade, ab der sich das erwartete asymptotische Verhalten konstatieren lässt, differiert sehr mit der Wahl der jeweiligen Waveletbasen obwohl die Multiresolutionsräume unverändert bleiben. Wesentliche Eigenschaften, die auf die Effizienz Einfluss haben, sind die Größe des Trägers der Wavelets und die Kondition der entstehenden Gleichungssysteme. Über die ersten Implementierungen hinaus sind vielfältige Modifikationen, Versuche und Ideen eingeflossen um die Verfahren weiter zu verbessern. Dies erforderte viel Zeit und Aufwand. Die Ergebnisse sind in die beiden Dissertationen von H. Harbrecht und M. Konik eingeflossen, die augenblicklich fertiggestellt werden. Beide Arbeiten sollen Anfang April eingereicht werden.

H. Harbrecht hat die in [DS1] vorgeschlagene Basiskonstruktion realisiert. Ihm gelang es eine direkte Darstellung der Waveletbasen an den Patchrändern und

Ecken zu finden. Aufbauend auf diesem neuen Ergebnis hat er eine Vielzahl biorthogonaler Waveletbasen auf Oberflächen konstruiert und die einzelnen Konstruktionen optimiert um die Lösung von Randintegralgleichungen zu beschleunigen. Die Ansatzfunktionen sind jeweils stückweise konstant oder linear und im letzteren Fall sogar global stetig. Damit gelang ihm erstmals die Realisierung des hypersingulären Operators mit stetigen und stabilen Wavelets auf Oberflächen im $\mathbb{R}^3$, vgl. Tabelle 2.1. Diese Waveletbasen werden in ähnlicher Form auch in der Gruppe von W. Dahmen zur adaptiven Lösung partieller Differentialgleichungen eingesetzt [BDD]. Hinsichtlich der Auswahl und Konstruktion der Basisfunktionen hat H. Harbrecht mehrfach Verbesserungen durchgeführt [HDIS], die eine Beschleunigung von ein bis zwei Grössenordnungen gegenüber den ersten Resultaten brachten. Er hat den Träger der Waveletbasen wesentlich verkleinert und das Konditionsverhalten der entstehenden Matrizen immens verbessert.

Unbekannte		Skalierungsfunktionen $\phi^{(2)}$			Wavelets $\psi^{(2,2)}$		
J	N_J	abs. Fehler	Red.	Zeit (s)	abs. Fehler	Red.	Zeit (s)
1	48	6.1	—	2.1	7.6	—	0.44
2	192	4.2	1.4	9.8	4.2	1.8	12
3	768	1.3	3.6	611	1.2	3.5	213
4	3072	2.0e-1	6.3	6327	1.9e-1	6.2	2795
5	12288	(2.5e-2)	($\leq$8.0)	(101220)	1.4e-2	14	30311
6	49152	(3.1e-3)	($\leq$8.0)	(1619600)	4.9e-4	29	159990

Tabelle 2.1: Absolute Fehler und Rechenzeiten zur Bestimmung der Lösung eines inneren Neumann-Problems bezüglich der linken Modellgeometrie in Abbildung 2.2. Hierbei wurde der hypersingulären Operator mittels global stetigen linearen Ansatzfunktionen diskretisiert. Die Kompressionsraten des Wavelet-Galerkin-Verfahrens sind in Abbildung 2.3 zu finden.

Zusammenfassend darf gesagt werden, dass die in den Arbeiten des Antragstellers [DPS3, S, DS1] schon früher entwickelten Waveletverfahren das erwartete Verhalten zeigen. Ab ca. 1000 Gleichungen sind sie den traditionellen Verfahren überlegen. Bei ca. 10^6 Gleichungen liegen die Kompressionsraten zwischen 200 und 1000 und der Rechenzeitgewinn liegt bei einem Faktor von 20 bis 100. Wie ähnliche Experimente in [LS, TW] zeigen, sind die Waveletverfahren bei solchen Beispielsgeometrien den anderen schnellen Verfahren zumindest ebenbürtig. Für diese Modellbeispiele sind im Durchschnitt etwa 100 Einträge pro Zeile (bzw. Spalte) ausreichend um die erforderliche Genauigkeit zu erzielen, siehe Abbildung 2.3. Konkret wird die Genauigkeit des vollen Galerkin-Verfahrens nicht verletzt und in der Tat ist die Lösung des komprimierten Systems mitunter sogar etwas genauer. Im Rahmen dieses Konzeptes ist die Parallelisierung recht einfach [KDIS]. Hinsichtlich der Komplexität der Geometrie sind der Methode Grenzen gesetzt, da die Basen auf stückweise parametrisch definierten Oberflächendarstellungen beruhen. Für die künstlich definierten Interfaces, die man zur Kopplung von Finiten Elementen mit Randelementen benutzt, sind die entwickelten Basen allerdings hervorragend geeignet [PS, HPPS1, HPPS2].

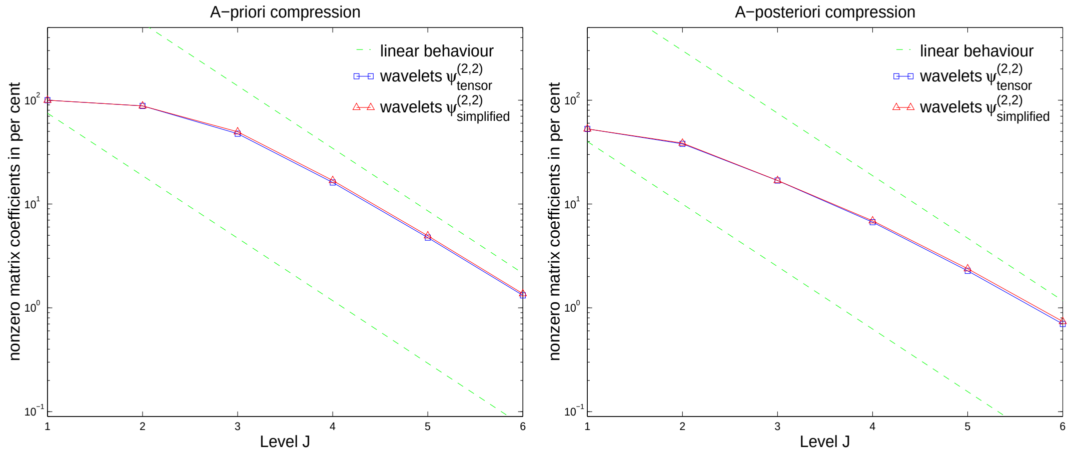


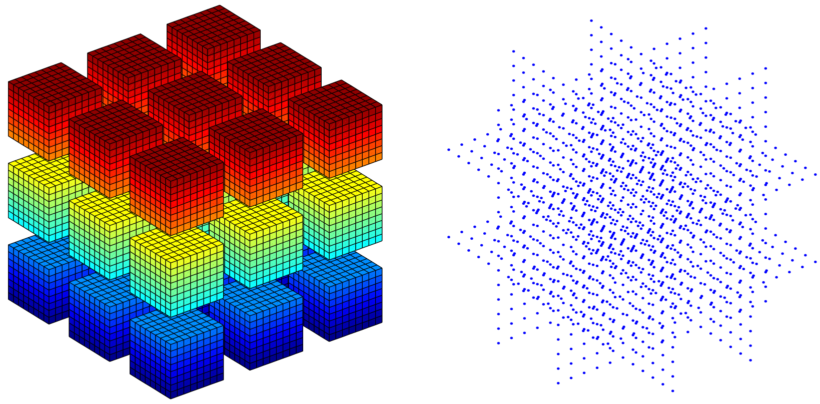
Abbildung 2.3: Kompressionsraten der a-priori und a-posteriori Kompression bezüglich des hypersingulären Operators definiert auf der linken Modellgeometrie in Abbildung 2.2.

2.4.2 Teilaufgabe Volldiskrete Wavelet-Galerkin-Verfahren

Die direkte Berechnung der komprimierten Matrix basiert auf geeigneten Methoden zur numerischen Integration, da die auftretenden Integrale nicht analytisch berechenbar sind. Die Thematik volldiskreter Wavelet-Galerkin-Verfahren wurde zuerst im DFG-Einzelprojekt *Numerische Quadraturverfahren für Wavelet und Multiskalenmethoden zur effizienten Behandlung von Randintegralgleichungen* (SCHN 530/2-2) von M. Konik und H. Harbrecht bearbeitet. Durch diese Vorarbeiten waren erste Realisierungen zu Beginn des Antragszeitraumes bereits implementiert. Im Berichtszeitraum wurden diese Ansätze wesentlich verbessert. Dabei stellt das Aufstellen der Matrix immer noch den Bottleneck der gesamten Berechnung dar. Dieser Entwicklung lag das Manuskript [DSII] zugrunde, wobei mittlerweile viele Einzelergebnisse und Verbesserungen hinzugekommen sind, die in die Dissertationen von M. Konik und H. Harbrecht einfliessen werden [KDIS, HDIS]. Hier sind zu erwähnen:

1. Basisbasierte Quadraturformeln und Quasiinterpolation [BDK1, BDK2, DSX].
2. Sigmoidale Transformationen um periodische Integranden zu erzeugen [KDIS],
3. Smolyak oder Blended Quadraturformeln [GG, KDIS, RHA, KRS],
4. geschicktes Wiederverwenden (*Recyclen*) berechneter Integrale [HDIS],
5. Ausnutzen spezieller Eigenschaften der Integraloperatoren des Doppelschichtpotentials [HDIS], vgl. Abbildung 2.4,
6. Beschränkung der Glattheitvoraussetzungen [RHA, RS, KDIS, KRS].

Von M. Konik und H. Harbrecht wurden die Abschätzungen in [S, DSII] bezüglich der Quadratur eingehender untersucht und verschärft. Dadurch konnte der Quadraturgrad gesenkt und viele Ausdrücke und Integrale zur Berechnung

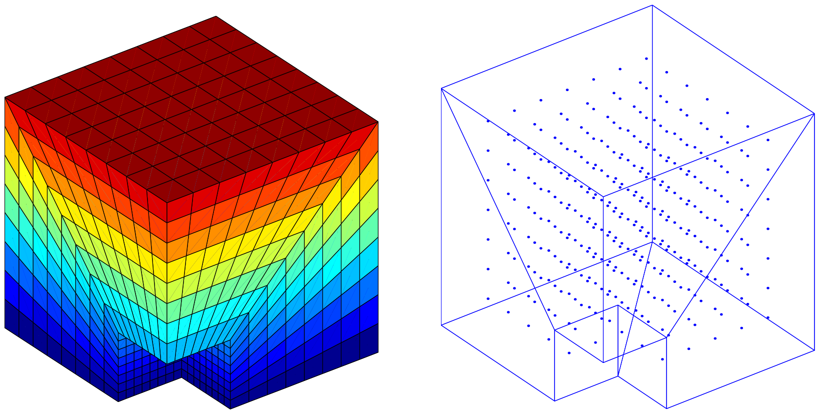


Unbekannte		Skalierungfunktionen $\phi^{(1)}$			Wavelets $\psi^{(1,3)}$			
J	N_J	abs. Fehler	Red.	Zeit (s)	abs. Fehler	Red.	Zeit (s)	nnz (%)
1	648	4.8e-1	—	4.7	1.3	—	3.1	19.7
2	2592	5.5e-2	8.7	84	8.2e-2	16	22	4.63
3	10368	(1.4e-2)	(4.0)	(1338)	1.5e-2	5.6	178	1.39
4	41472	(3.4e-3)	(4.0)	(21414)	3.4e-3	4.3	795	0.32
5	165888	(8.6e-4)	(4.0)	(342630)	8.1e-4	4.2	5290	0.07

Abbildung 2.4: Numerische Ergebnisse zur Berechnung der Lösung eines äußeren Neumann-Problems bezüglich obigen Gebiets mittels stw. konstanten Funktionen und adjungiertem Doppelschichtoperator. Das Potential ist in den gezeigten Punkten in den Zwischenräumen der Würfel ausgewertet worden.

verschiedener Matrixelemente wiederverwendet werden. Ein solches Vorgehen ist algorithmisch nicht einfach zu realisieren und verlangt eine sorgfältige Implementierung, ist aber sehr wirksam [HDIS]. Insgesamt wurden im Laufe der Entwicklung die Rechenzeiten zum Aufstellen der Matrix um Größenordnungen verbessert. Das Aufstellen der komprimierten Matrix in der Standardform ist zeitlich immer noch der aufwendigste Teil. Es dauert deutlich länger als das eigentliche Lösen des Gleichungssystems. Im Vergleich zur Kompressionsrate ist der zeitliche Beschleunigungsfaktor um eine Größenordnung schlechter, wobei Cache-Effekte eine vielleicht nicht ganz unerhebliche Rolle spielen, vgl. Abbildung 2.5. Während die Parallelisierung des klassichen Verfahrens einfach ist und im wesentlichen optimal mit der Anzahl der Prozessoren skaliert, ist die Parallelisierung des Aufstellens der komprimierten Matrix nicht immer ganz optimal. Dennoch verbessert sich die Situation durch die Parallelisierung.

Zu ergänzen bleibt die Arbeit [DSX], obwohl sie eine vollkommen andere Problematik behandelt, nämlich die effiziente Auswertung von nichtlinearen Funktionen von Waveletentwicklungen. Hierin ist das wesentliche Herzstück ein numerisches Integrationsverfahren basierend auf der Quasiinterpolation. Man kann die vorgeschlagene effiziente algorithmische Auswertung als eine Art nichtuniforme Quadratur auffassen. Solche Quadraturen eignen sich auch zur numerischen Integration der singulären Kerne in der Nähe der Singularität. Zur Zeit liegt in der Arbeitsgruppe noch keine Realisierung eines solchen Verfahrens vor, jedoch werden diese Ansätze in Zusammenhang mit adaptiven Verfahren zur Zeit in der Arbeitsgruppe von W. Dahmen realisiert und weiterentwickelt.



Unbekannte		Skalierungfunktionen $\phi^{(1)}$			Wavelets $\psi^{(1,3)}$			
J	N_J	abs. Fehler	Red.	Zeit (s)	abs. Fehler	Red.	Zeit (s)	nnz (%)
1	48	8.1e-1	—	0.13	1.0	—	0.11	99.48
2	192	1.2e-1	6.8	0.72	1.2e-1	8.6	2.0	55.27
3	768	5.7e-2	2.1	42	5.8e-2	2.1	37	30.21
4	3072	9.7e-3	5.9	477	9.5e-3	6.1	418	11.04
5	12288	(1.2e-3)	($\leq$ 8.0)	(7640)	1.5e-3	6.2	2239	3.37
6	49152	(1.5e-4)	($\leq$ 8.0)	(122240)	3.0e-4	5.2	16876	0.92

Abbildung 2.5: Numerische Ergebnisse zur Berechnung der Lösung eines inneren Dirichlet-Problems bezüglich der Fichera-Ecke mittels stw. konstanten Funktionen und Einfachschichtoperator. Das Potential ist in den gezeigten Punkten ausgewertet worden.

Wesentliche Fortschritte wurden durch Zusammenarbeit mit A. Rathsfeld hinsichtlich der Berechnung der Matrixkoeffizienten erzielt. Setzten die bisherigen Untersuchungen immer voraus, dass die Oberfläche stückweise analytisch ist und dadurch der Quadraturgrad beliebig hoch gesteigert werden kann, kommt man nun mit einer fixen Quadraturordnung und einer endlichen Glattheit aus. In der Arbeit [RS] wurde ein Verfahren für das Kollokationsverfahren entwickelt und untersucht, wobei sich hier die Situation infolge des Fehlens der doppelten Integration wesentlich einfacher gestaltet. Die grundlegende Idee, die zur *2. Kompression* in [S] führte, bildete dabei den Ausgangspunkt dieser Entwicklung. Die Behandlung des Galerkin-Verfahrens [RHA, KRS] erforderte deutlich mehr Anstrengungen. Zum einem wurde die Idee der Blended Integration zwingend. Vorher musste aber eine Variablentransformation durchgeführt werden und in eine Variablenrichtung benötigt man ein graduiertes Gitter.

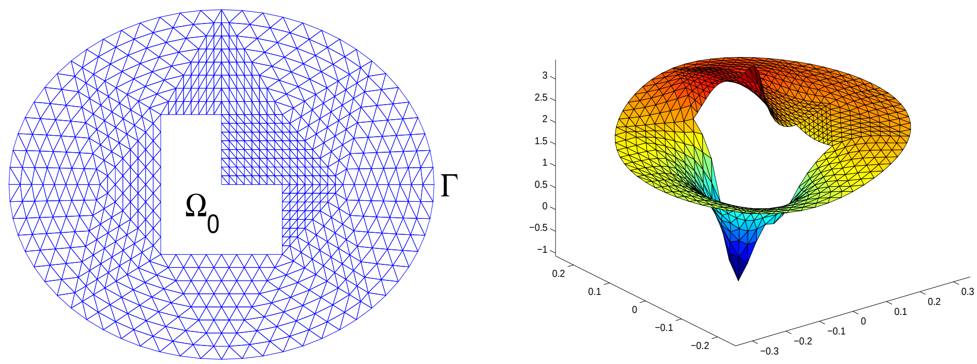
2.4.3 Teilaufgabe Kopplung FEM-BEM

Durch den Gastaufenthalt von C. Pérez wurde die Kopplung von FEM und BEM, die im nächsten Antrag als weitere Persepktive und zukünftiges Projekt behandelt werden sollte, vorgezogen. Ausgangspunkt waren ein Gastaufenthalt des Antragstellers an der Universidad de Concepcion (Chile) und ein dreimonatiges DAAD-Kurzzeitstipendium für einen Aufenthalt von C. Pérez in Chemnitz. Es folgten ein wechselseitiger Aufenthalt von H. Harbrecht in Concepcion und C. Pérez in Chemnitz. Bei dieser Teilaufgabe ging es vornehmlich darum, das entwickelte Kompressionskonzept auf ein System von Integralgleichungen anzuwenden und dies mit Finite Elementen zu koppeln. Dabei zeigte sich, dass sich die Argumentation aus [S] nicht direkt übertragen ließ, sondern an einigen Stellen geschickte Modifaktionen notwendig waren [PS, HPPS1]. Die Ergebnisse dieser Arbeiten beinhalten auch die Theorie der Matrixkompression für Randintegralgleichungen zu gemischten Randwertproblemen, da nun die einzelnen Bestandteile des Calderón Projektors in den korrekten Räumen untersucht wurden. Eine weitere Problematik bestand darin, dass die Finite-Elemente-Diskretisierung in der traditionellen Basis erfolgte, während die Integralgleichungen in einer Waveletbasis diskretisiert werden sollten. Von allen Verfahren zur iterativen Lösung erwies sich das Bramble-Pasciak-CG, das auch von der Gruppe um U. Langer (Linz) [CKL, LA] verwendet wird, als besonders effizient. Praktisch vorteilhaft war es die Nebenbedingung an die Neumann-Daten explizit zu formulieren, wodurch die theoretische Behandlung eines multiskalenbasierten Vorkonditionierers erschwert wurde. Die technischen Details finden sich in der Arbeit [HPPS2].

Während seines Aufenthaltes in Chile hatte der Antragsteller begonnen Least-Squares-Verfahren unter dem Aspekt der Waveletbasen und Normäquivalenzen zu studieren. Daraus entstand die gemeinsame Arbeit [DKS] sowie [GS].

2.4.4 Teilaufgabe Spezielle Randintegralgleichungen und weitere Probleme

Es ist bekannt, dass sich Randintegraloperatoren zur Lösung der Wärmeleitungsgleichung wie elliptische Operatoren in anisotropen Sobolevräumen verhalten. Für C. Bourgeois war dies Ausgangspunkt zum Einsatz von Wavelets für die effiziente Behandlung dieser Gleichung. Da die Zeit als weitere Variable hinzukommt, verschärft sich die Problematik der Komplexität, und damit die Frage nach einem schnellen Lösen dieser Gleichungen. Das Problem konnte auf eine verblüffend einfache Art und Weise gelöst werden; man berücksichtigt, dass die Orts- und Zeitvariablen unterschiedlich skalieren. Durch diese Modifikation kann die Kompressionsstrategie und ihre Analysis auf den zeitabhängigen Fall übertragen werden. Allerdings ist in der Zeitvariable eine homogene Anfangsbedingung gegeben, weshalb man Wavelets benötigt, die dieser Bedingung genügen. Die von dem Antragsteller gemeinsam mit W. Dahmen entwickelten biorthogonalen Wavelets mit komplementären Randbedingungen erfüllen gerade diese Anforderungen [DS2]. Gemeinsam mit C. Bourgeois wurde erstmalig die der Wärmeleitungsgleichung entsprechende Gleichung erster Art betrachtet [BS]. Eine Implementierung die-



N_J^Ω	N_J^Γ	$\|u-u_\psi\|_{L^2(\Omega)}$	$\|\lambda-\lambda_\psi\|_{L^2(\Gamma)}$	Kompr. **K**	Kompr. **V**
188	32	9.3063e-03	5.9980e-02	100	95
696	64	3.7929e-03	1.6402e-02	86	68
2672	128	7.7040e-04	4.6409e-03	59	44
10464	256	1.3317e-04	1.3907e-03	37	27
41408	512	3.9051e-05	4.2303e-04	22	16
164736	1024	8.6512e-06	1.4341e-04	13	8.9
657152	2048	2.0487e-06	7.5080e-05	7.1	5.0

Tabelle 2.2: Kopplung von FEM und BEM mit dem Koppelrand Γ zur Behandlung eines äußeren Randwertproblems bzgl. des Gebietes Ω_0 (oben links) mit der exakten Lösung u (oben rechts). In der Tabelle sind sowohl die Kompressionsraten (in %) für die Matrix des Doppelschichtoperators **K** und die des Einfachschichtoperators **V** als auch die L^2-Fehler der numerischen Approximation zur Lösung im Gebiet (u) und auf dem Rand ($\lambda := \frac{\partial u}{\partial n_\Gamma}$) angegeben.

ser Methoden wurde begonnen. Bei der Behandlung der Wärmeleitungsgleichung sind zur Berechnung vieler Matrixeinträge die zugehörigen Integranden glatt. Die Realisierung und Programmierung wurde von C. Bourgeois und M. Konik aufbauend auf den Arbeiten [KDIS, BS] begonnen, ist aber noch nicht abgeschlossen.

C. Bourgeois arbeitete zuerst als Post-Doktorand gefördert vom TMR Netzwerk *Wavelets in Numerical Simulation*. In dieser Zeit wurde begonnen, die *Dual Reprocity Methode* zu analysieren. Diese Methode wird von Ingenieuren benutzt um nichtlineare Differentialgleichungen mit Integralgleichungsmethoden zu behandeln. Diese Fragestellungen gehen über den Rahmen des Teilprojektes TP A7 hinaus und sind noch nicht abgeschlossen. Ähnliches gilt für die Zusammenarbeit mit H.-J. Flad (MIS Leipzig) zur *Elektronenstrukturberechnung*. Dabei ist ein direkter Zusammenhang mit dem hiesigen Projekt durch den Einsatz von Wavelets zur effizienten Darstellung nichtlokaler Operatoren gegeben.

Integralgleichungen erster Art sind im Grunde *schlecht gestellte Probleme*. Im Bereich der Randelementmethoden ist dieser Aspekt zumeist nicht von Bedeutung. In Fällen aber, in denen die rechte Seite durch ein Rauschen gestört ist, muss man dieser Problematik Rechnung tragen. In einer aktuellen Arbeit mit S. Pereverzev

[PES] wurden schlecht gestellte Probleme betrachtet bei denen man die Glattheit der exakten Lösung nicht kennt. Durch eine Multilevelstrategie wird eine Sequenz von Diskretisierungen betrachtet, aus der dann diejenige Lösung ausgewählt wird, die sich genausogut wie die optimale Lösung mit bekannter Glattheit verhält. Hierbei gehen entscheidend die bekannten Normäquivalenzen der Waveletbasen ein. Es wäre außerordentlich lohnenswert die Konzepte der Rauschunterdrückung mittels Wavelets, wie sie in der Signalverabeitung erfolgreich angewandt werden, auf die Situation schlecht gestellter Operatorgleichungen zu übertragen, denn es gibt eine Vielzahl von Zusammenhängen zwischen Approximation und Regularisierung.

Es folgt die Sammlung neuentstandener Publikationen.

Neuentstandene Literatur

Referierte Literatur

[BDK1] A. Barinka, T. Barsch, S. Dahlke, M. Konik, Some Remarks on Quadrature Formuals for Refinable Functions and Wavelets, *SFB 393 Preprint 00-15*, TU Chemnitz (2000), erscheint in *ZAMM*.

[BDK2] A. Barinka, T. Barsch, S. Dahlke, M. Konik, M. Mommer, Quadrature Formulas for Refinable Functions and Wavelets II: Error Analysis, *SFB 393 Preprint 00-15*, TU Chemnitz (2000), erscheint in *Journal of Computational Analysis and Applications.*

[DS1] W. Dahmen, R. Schneider, Composite wavelet bases for operator equations, *Math. Comp.*, **68**, 1533–1567, (1999).

[DS2] W. Dahmen, R. Schneider, Wavelets with complementary boundary conditions, Function spaces on the cube, *Result. Math.*, **34**, 255–293, (1998).

[DSI] W. Dahmen, R. Schneider, Wavelets on manifolds I. Construction and domain decomposition, *SIAM J. Math. Anal.*, **31**, 184–230, (1999).

[DSX] W. Dahmen, R. Schneider, Y. Xu, Nonlinear functionals of wavelet expansions – Adaptive reconstruction and fast evaluation, *Numer. Math.*, **86**, 40–101, (2000).

[HS] H. Harbrecht, R. Schneider, Wavelet Galerkin Schemes for 2D BEM, *Operator Theory Advances and Applications*, **121**, 221–260, (2001).

[HPPS1] H. Harbrecht, F. Paiva, C. Pérez, R. Schneider, Biorthogonal wavelet approximation for the coupling of FEM-BEM, *Preprint SFB393/99-32*, (1999), erscheint in *Numer. Math.*

[LSS] P.L. Levin, R. Schneider, M. Spasojevic, Creation of sparse boundary element matrices for 2-D and axi-symmetric electrostatic problems using the bi-orthogonal wavelets, *IEEE Transaction on Dielectrics and Electric Insulation*, **5**, 469–486, (1998).

[PDIS] C. Pérez, Métodos de Ondelettes para Ecuaciones Integrales de Frontera, *Dissertation*, Universidad de Concepcion/Chile, (2000).

[RHA] A. RATHSFELD, Über Waveletalgorithmen für die Randelementmethode, *Habilitationsschrift*, TU Chemnitz, (2000).

[S] R. SCHNEIDER, Multiskalen- und Wavelet-Matrixkompression: Analysisbasierte Methoden zur Lösung großer vollbesetzter Gleichungssysteme, Habilitationsschrift, TH Darmstadt, (1995), *Advances in Numerical Mathematics*, Teubner Stuttgart, (1998).

Sonstige Literatur

[BS] C. BOURGEOIS, R. SCHNEIDER, Biorthogonal wavelets for the direct integral formulation of the heat equation, *Preprint SFB393/00-14*, TU Chemnitz (2000).

[DKS] W. DAHMEN, A. KUNOTH, R. SCHNEIDER, Wavelet least squares methods for boundary value problems, *IGPM Bericht Nr. 175*, RWTH Aachen, (1999), eingereicht bei *SIAM J. Num. Math.*

[HPPS2] H. HARBRECHT, F. PAIVA, C. PÉREZ, R. SCHNEIDER, Multiscale preconditioning for the coupling of FEM-BEM, *Preprint SFB393/00-07*, (2000), eingereicht bei *Numerical Linear Algebra with Applications.*

[KS] M. KONIK, R. SCHNEIDER, Object-oriented implementation of multiscale methods for boundary integral equations, *SFB-Preprint 98-14*, TU Chemnitz, (1998).

[PS] C. PÉREZ, R. SCHNEIDER, Wavelet Galerkin methods for boundary integral equations and the coupling with FEM, *Preprint SFB393/99-33*, (1999).

[RS] A. RATHSFELD, R. SCHNEIDER, On a quadrature algorithm for the piecewise linear collocation applied to boundary integral equations, *Preprint SFB393/00-15*, TU Chemnitz, (2000).

In Vorbereitung befindliche Literatur

[DSII] W. DAHMEN, H. HARBRECHT, M. KONIK, R. SCHNEIDER, Wavelets on manifolds II: Application to Boundary Element Methods and pseudodifferential equations, (Manuskript).

[HDIS] H. HARBRECHT, Wavelet Galerkin Schemes for 3D BEM, *Dissertation*, TU Chemnitz, (2001).

[KDIS] M. KONIK, A fully discrete wavelet Galerkin boundary element method in three dimensions, *Dissertation*, TU Chemnitz, (2001).

[KRS] M. KONIK, A. RATHSFELD, R. SCHNEIDER, A Quadrature Algorithm for Wavelet Galerkin Methods, (Manuskript).

[PES] S. PEREVERZEV, R. SCHNEIDER, An adaptive regularization by projection for noisy pseudodifferential operators of negative order, (Manuskript).

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Die vorgeschlagenen Waveletbasen und die Matrixkompressionsmethoden haben die theoretischen Erwartungen erfüllt. Es ist hiermit gezeigt, dass diese Verfahren überaus effizient sind und bei ca. 50.000 Gleichungen eine Verbesserung um 1-2 Größenordnungen gegeüber den traditionellen Verfahren zeigen und in diesem Bereich schon (fast) linear skalieren, dies sogar im wesentlichen unabhängig von der Geometrie. Ein solches Verhalten ist zu erwarten, falls mit N Unbekannten zur Diskretisierung die Oberfläche mit höchstens etwa $\sqrt{N}$ verschiedenen Patches dargestellt werden kann. In diesem Rahmen eignen sich die entwickelten Methoden auf alle Fälle zu einer hochgenauen Diskretisierung von Randintegralgleichungen. Die hiermit behandelbaren Geometrien sind noch nicht extrem kompliziert.

In der Ingenieur-Praxis kann man oftmals solche Geometrien mit traditionellen Verfahren in Verbindung mit relativ wenig Unbekannten aufgrund geringer Genauigkeitsanforderungen zufriedenstellend rechnen. Die zwingende Notwendigkeit schnelle Verfahren einzusetzen wird zwingend, wenn die Geometrien äußerst kompliziert werden oder im Falle der Helmholtz-Gleichung in hohen Frequenzbereichen die Diskretisierung eine sehr große Zahl von Freiheitsgraden benötigt. Dies sind die Bereiche in denen augenblicklich noch ein großer Handlungsbedarf herrscht.

Dies sind Anwendungsbereiche in denen augenblicklich ein großer Forschungsbedarf herrscht. Beide Situationen liegen außerhalb der Möglichkeiten von den hier angegeben Methoden. Zwar stimmen asymptotisch die Aussagen, aber im Grenzbereich, den man überhaupt erst einmal rechnen möchte, ist diese Asymptotik noch nicht wirksam. Hierbei liegen Die Gitterweiten in der Größenordnung der Gebietsparameter oder der Wellenlänge.

Teilprojekt A8

2.1 Teilprojekt A8

Parallele numerische Lösung von Optimalsteuerungsproblemen für partielle Differentialgleichungen

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Volker Mehrmann
Fachbereich 3 / Mathematik
Sekretariat MA 4–5
Technische Universität Berlin
Straße des 17. Juni 136
D–10623 Berlin

Tel. (030) 314-25736 (21264)
Fax (030) 313-79706
email: mehrmann@math.tu–berlin.de

Prof. Dr. Fredi Tröltzsch
Fachbereich 3 / Mathematik
Sekretariat MA 4–5
Technische Universität Berlin
Straße des 17. Juni 136
D–10623 Berlin

Tel. (030) 314-79688 (21264)
Fax (030) 314-79706
email: troeltz@math.tu-berlin.de

2.1.2 Projektbearbeiter

Projektbearbeiter (Ergänzungsausstattung):

Dr. T. Penzl (Lehrstuhl Numerische Algebra)
Dr. N. Arada (Lehrstuhl Optimale Steuerung)

Mitarbeiter (Grundausstattung):

Dr. A. Rösch (Lehrstuhl Optimale Steuerung).

2.2 Zwischenbericht

Ein ausführlicher Bericht wird bis zum 30.09.2001 vorgelegt. Es folgt ein Zwischenbericht.

Ziel dieses Teilprojekts war die Entwicklung effizienter numerischer Methoden zur Lösung einer Klasse von Optimalsteuerproblemen bei partiellen Differentialgleichungen auf modernen Rechnerarchitekturen. Grundlage für diese neuen Methoden sollte die explizite Lösung des aus den notwendigen Optimalitätsbedingungen resultierenden strukturierten Zweipunkt–Randwertproblems der ortsdiskretisierten Euler-Lagrange Gleichungen sein. Diese Randwertprobleme sollen mit Hilfe von Methoden gelöst werden, die einerseits auf die zugrunde liegenden Differentialgleichungstypen aber andererseits auch auf die besondere algebraische Struktur der Euler-Lagrange Gleichungen zugeschnitten sind.

Als Modelle sollten dabei zunächst linear–quadratische optimale Randsteuerprobleme bei parabolischen Differentialgleichungen in Ortsgebieten einfacher Geometrie behandelt werden, wie sie unter vereinfachenden Annahmen bei gesteuerten Aufheizungs- und Abkühlungsprozessen auftreten.

Die gesteckten Ziele im Rahmen dieses Projektes wurden erreicht und zum Teil weit übertroffen. Leider musste gegen Mitte des Projektes die Zielrichtung der Forschungen etwas verändert werden, da Herr Dr. Thilo Penzl als Mitarbeiter der Grundausstattung das Projekt wesentlich geprägt hat, Ende 1999 bei einem Forschungsaufenthalt in Kanada tödlich verunglückt ist.

Wesentliche Ergebnisse sind Fortschritte bei der Behandlung grosser linear–quadratischer Optimalsteuerungsprobleme. Hier konnte sowohl für die direkte Lösung des Steuerungsproblems mittels des Newtonverfahrens für die entsprechende Riccati Gleichung [6, 10, 12, 14] als auch des zweiten betrachteten Ansatzes mittels Modellreduktion [9, 10, 11] erfolgreich gezeigt werden, dass diese Methoden für die betrachtete Problemklasse sehr erfolgreich arbeiten.

Bei der Modellreduktion wird zuerst das durch eine Orts-Semidiskretisierung entstehende Input-Output System mittels Modellreduktion durch ein System mit kleiner Systemdimension approximiert, für dieses die Optimalsteuerung berechnet und dann diese für das urpsrüngliche System verwendet [10, 13, 14]

Diese Methoden und auch die Methoden zur direkten Lösung der grossen Riccatigleichungen sind bereits im Paket LYAPACK implementiert und mit grossem Erfolg an der betrachteten Problemklasse getestet worden [14]. Eine FORTRAN Version ist in Vorbereitung.

Eine der derzeit besten Methoden zur Lösung von Optimalsteuerungsproblemen bei semilinearen partiellen Differentialgleichungen ist die Methode der Sequentiellen Quadratischen Programmierung (SQP). Als Verfahren vom Newton-Typ ist diese Methode lokal quadratisch konvergent, bedarf jedoch einer gewissen Globalisierung. Im Projekt wurde deshalb die *verallgemeinerte (augmented) Lagrange-Newton-SQP-Methode* sowohl theoretisch als auch numerisch untersucht [3].

Bei Vorgabe von Zustandsbeschränkungen wird die numerische Analysis wesentlich schwieriger. Hier entstanden Resultate zu aktive-Mengen-Strategien, welche auf die Lösung der quadratischen Unterprobleme des SQP-Verfahrens angewendet werden können. Die entwickelte Technik ist sehr schnell und hat auch in schwierigen Problemen zuverlässig die Lösung ermittelt, [8].

Verfahren höherer Konvergenzordnung wurden auch bei der Identifikation von nichtlinearen Wärmeübergangsgesetzen verwendet. Hier eignen sich SQP-Verfahren aus verschiedenen Gründen weniger. Gauss-Newton-Techniken liefern bessere Ergebnisse, [15]. Sie sind wesentlich schneller als die vorher verwendeten Gradientenmethoden und auch robust gegenüber Störungen in den gegebenen Messdaten.

Weiterhin wurden Verfahren der linearen bzw. quadratischen Optimierung zur numerischen Lösung einer Klasse von Steuerungsproblemen bei linearen elliptischen Differentialgleichungen untersucht, bei denen ein Maximum-Norm-Zielfunktional gegeben ist. In [7] wurden Aufgaben dieser Art mit a priori gegebenen Zustandsbeschränkungen sowohl analytisch als auch numerisch behandelt, wozu verschiedene innere-Punkt-Methoden sowie alternativ das Simplexverfahren zum Einsatz kamen.

In [2] werden Fehlerabschätzungen in der L^2- sowie L^∞-Norm für Steuerungsprobleme bei semilinearen elliptischen Gleichungen in polygonal berandeten Ortsgebieten bei einer FEM-Diskretisierung mit Standard-Dreieckselementen bewiesen. Die erhaltenen Fehlerabschätzungen, sind möglicherweise noch nicht optimal, verbessern aber die bekannten wesentlich. Weitere Ergebnisse zu dieser Thematik wurden in [4] publiziert. Theoretische Untersuchungen zur Behandlung von Optimalsteuerungsproblemen, welche diesen Komplex abrunden, enthalten die Arbeiten [5] sowie [1].

Literaturverzeichnis

[1] N. Arada. Relaxation of optimal control problems in L^p-spaces. *Control Optimization and Calculus of Variations (COCV)* 6 (2000), 73–96.

[2] N. Arada, E. Casas and F. Tröltzsch. Error estimates for a semilinear elliptic control problem. *Preprint SFB 393/00–32, TU Chemnitz*, 2000 .

[3] N. Arada, J.-P. Raymond, and F. Tröltzsch. On an Augmented Lagrangian SQP method for a class of optimal control problems in Banach spaces. *Preprint SFB 393/00–19, TU Chemnitz, 2000 Eingereicht bei Computational Optimization and Applications.*

[4] N. Arada and J. P. Raymond. Approximation of optimal control problems with state constraints. *Numerical Functional Analysis and Optimization*, 21 (2000), 601–621.

[5] N. Arada and J. P. Raymond. Optimal control problems with mixed control-state constraints. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 39 (2000), 1391–1407.

[6] P. Benner, J. Li and T. Penzl *Numerical solution of large Lyapunov equations, Riccati equations, and linear-quadratic optimal control problems*, in preparation, Zentrum f. Technomathematik, Fb. Mathematik und Informatik, Univ. Bremen, 28334 Bremen, Germany, 2000.

[7] T. Grund and A. Rösch. Optimal control of a linear elliptic equation with a supremum-norm functional. Eingereicht bei Optimization Methods and Software.

[8] K. Kunisch and A. Rösch. Primal-dual strategy for constrained optimal control problems. Eingereicht bei SIAM Journal Control Optimization.

[9] V. Mehrmann, T. Penzl, and F. Tröltzsch. Control of heterogeneous systems of partial differential equations and differential algebraic equations. *Invited presentation: 9th Seminar on Numerical Solution of Differential and Differential-Algebraic Equations, Halle*, 4.9.–8.9.2000.

[10] T. Penzl. Numerische Lösung großer Lyapunov-Gleichungen.
Logos Verlag, Berlin, 1998.

[11] T. Penzl. Algorithms for model reduction of large dynamical systems. *Preprint SFB 393/99-39, TU Chemnitz eingereicht zur Veröffentlichung*, 2000.

[12] T. Penzl. A cyclic low rank Smith method for large sparse Lyapunov equations. *SIAM J. Sci. Comput. (21)*, pages 1401–1418, 2000.

[13] T. Penzl. Eigenvalue decay bounds for solutions of Lyapunov equations: the symmetric case. *Preprint SFB 393/99-39, TU Chemnitz; Systems and Control Letters, (40)*, pages 139–144, 2000.

[14] T. Penzl. LYAPACK - users guide. *Preprint SFB 393/00-33, TU Chemnitz*, 2000.

[15] A. Rösch. A Gauss-Newton Method for the Identification of Nonlinear Heat Transfer Laws. Eingereicht.

[16] T. Stykel. On a criterion for asymptotic stability of differential-algebraic equations. *Preprint SFB 393/99-17, TU Chemnitz; eingereicht zur Veröffentlichung bei Zeitschr. f. Angew. Math. und Mech.*, 2000.

[17] T. Stykel. Generalized Lyapunov equations for descriptor systems: Stability and inertia theorems.

Projektbereich

B

Teilprojekt B6

2.1 Teilprojekt B6

Anwendungsoptimierte Kommunikation auf Clusterarchitekturen

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Ing. Wolfgang Rehm	Dr. Matthias Pester
27.09.1950	29.04.1954
Professur Rechnerarchitektur und Mikroprogrammierung	Professur Numerische Algebra
Fakultät für Informatik	Fakultät für Mathematik
Technische Universität Chemnitz	Technische Universität Chemnitz
09107 Chemnitz	09107 Chemnitz
Tel.: (0371) 531-1420	(0371) 531-2656
Fax: (0371) 531-1806	(0371) 531-2657
rehm@informatik.tu-chemnitz.de	pester@mathematik.tu-chemnitz.de

2.1.2 Projektbearbeiter

Dipl.-Inf.(FH) M.Meyer
Dipl.-Inf. S.Schindler
Dipl.-Inf.(FH) C.Dinkelmann
Dipl.-Inf. M.Trams
MSc. D.Balkanski
Dipl.-Inf. S.Seifert
Technische Universität Chemnitz, Fakultät für Informatik

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Ziel des Teilprojektes war eine Optimierung der Kommunikation für SFB–relevante Applikationen innerhalb eines Clusters. Dabei sollte diese Problemstellung auf verschiedenen Ebenen bearbeitet werden — Von algorithmischer Sicht über die Kommunikationsbibliothek bis hin zur Kommunikationshardware. Entsprechend wurde Teilprojekt B6 in vier einzelne Teilaufgaben aufgeteilt:

A: Effiziente Kommunikationsalgorithmen in parallelen FEM–Systemen

B: MPI–Infrastrukturen zur effizienten Anpassung an heterogene Kommunikationssysteme

C: VIA–konformer PCI–SCI Adapter für optimiertes Message Passing

D: Entwicklung einer objektorientierten Schnittstelle zu MPI

In der Realisierung wurde der Schwerpunkt auf Teilaufgaben B: *MPI–Infrastrukturen zur effizienten Anpassung an heterogene Kommunikationssysteme* sowie C: *VIA–konformer PCI–SCI Adapter für optimiertes Message Passing* gelegt.

Einerseits hat sich gezeigt, dass diese beiden Themen die beiden bewilligten halben Personalstellen vollkommen in Anspruch nehmen und andererseits sind durch Weggang geplanter ergänzender Bearbeiter (aus der Grundausstattung) für die Teilthemen A: *Effiziente Kommunikationsalgorithmen in parallelen FEM–Systemen* und D: *Entwicklung einer objektorientierten Schnittstelle zu MPI* die Grundlagen für eine effiziente Bearbeitung dieser geschwächt worden.

Im folgenden detaillierten Bericht wird daher nur auf die Teilaufgaben B und C eingegangen.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

2.3.1 Teilaufgabe B: MPI–Infrastrukturen zur effizienten Anpassung an heterogene Kommunikationssysteme

Es war absehbar, dass sich MPI [MPI95] in der letzten Zeit gegenüber PVM und anderen als führende Message–Passing Bibliothek durchgesetzen würde [GLS94]. Es waren sowohl freie (z.B. MPICH vom Argonne National Lab/ Mississippi State University [GLS96] oder LAM vom Ohio Supercomputer Center [LAM96]) als auch kommerzielle Implementierungen (z.B. ScaMPI [Scali] von der norwegischen Firma Scali speziell für SCI–Technologie) erhältlich.

Die bereits erwähnte MPICH–Implementierung ermöglicht auf Grund der internen Schnittstelle ADI–2 eine effiziente und schnelle Realisierung eines angepassten MPI–Systems. LAM bietet dagegen interessante Ansätze zu dynamischen Prozessen in MPI. Kommerzielle Angebote (z.B. Scali) zeichnen sich oft durch sehr hohe Leistungen, allerdings meist nur für ein Kommunikationsmedium, aus.

Als Weiterentwicklung des MPI–Standards stand zu Beginn des Antragszeitraumes der damals neue MPI–2 Standard [MPI97] zur Verfügung, welcher neben der bisherigen Message–Passing Funktionalität auch neue Elemente, wie z.B. eine dynamische Prozeßverwaltung oder Remote Memory Access, vorsah.

Am Lehrstuhl Rechnerarchitektur der TU Chemnitz wurde sich schon seit einigen Jahren vor der Antragstellung mit der Entwicklung von Kommunikationsbibliotheken auf der Basis des MPI–Standards beschäftigt. So wurde mit der Entwicklung eines Shared Memory Devices in [LAN96] erstmals eine effiziente Abbildung von messagebasierter Kommunikation der API–Schnittstelle auf ein physisch unterliegendes Shared–Memory–System erreicht.

Mit SCI–MPI [WGR97] wurden erstmals verschiedene Kommunikationsmedien innerhalb eines angepassten MPI–Systems kombiniert. Hier wurden auch erste Untersuchungen zu globalen Operationen innerhalb heterogener Systeme durchgeführt. Das dabei entwickelte System stellt allerdings nur eine Teilimplementierung des MPI–Standards dar. Die bei der Entwicklung gewonnen Erkenntnisse sollen im Antragszeitraum auf Grundlage der MPICH–Implementierung in ein neues, vollständiges MPI–System umgesetzt werden. Dazu wurden mit [BEY97], [RAD97] und [SCH97] Vorarbeiten im Bereich der Deviceentwicklung geleistet. In [SCH97] wurden erste Ansätze zur Realisierung einer Verknüpfung verschiedener Kommunikationsmedien mittels eines sogenannten Multidevices vorgestellt.

Ziel der Arbeiten im Teilthema B war die Entwicklung einer leistungsfähigen Kommunikationsbibliothek für offene, skalierbare, heterogene Systeme.

In einem solchen System wurde vor allem ein Mechanismus zur Verbindung verschiedener Kommunikationsmedien benötigt. Dieser sollte durch ein sog. Multidevice auf der Basis von MPICH realisiert werden, welches die interne ADI-2 Schnittstelle von MPICH benutzt. MPICH wurde gerade wegen dieser Schnittstelle als Grundlage zur Realisierung des Gesamtsystems ausgewählt. Sie ermöglicht durch ihren im Vergleich zum MPI-Standard minimierten Funktionsumfang eine schnelle Realisierung eines eigenen MPI-Systems. So muss allgemeine, hardwareunabhängige Funktionalität, wie z.B. virtuelle Topologien oder Prozessgruppen, nicht mehr selbst implementiert werden, sondern es kann hierbei auf eine vorgegebene Realisierung zurückgegriffen werden. MPICH ermöglicht außerdem eine Portabilität auf verschiedene Architekturen.

Zum konkreten Zugriff auf die Hardware benutzt das Multidevice seinerseits sog. Subdevices (z.B. Multi–Threaded oder SCI Device), welche die zugrundeliegende Hardware optimal nutzen können. Bei der Entwicklung des VIA/SCI–Subdevices erfolgt dabei eine enge Zusammenarbeit mit dem Teilthema C.

In der Umsetzung der Aufgabenstellung haben sich relativ schnell unvorhergesehene Probleme bzgl. der ADI-2 Schnittstelle ergeben. Zwar wurde zunächst ein Multidevice basierend auf dieser Schnittstelle erfolgreich entwickelt, jedoch traten mit neueren MPICH–Releases diverse Inkompatibilitäten an dieser Schnittstelle auf. Auch sind konzeptionelle Probleme bei MPICH aufgetreten, welche eine effiziente Realisierung eines VIA/SCI–Subdevices für MPICH verhinderte.

Aus diesen Gründen wurde beschlossen, mit der Konzeptionierung einer eigenen MPI–Bibliothek zu beginnen und diese umzusetzen. Ein Hauptkriterium stand bei der Entwicklung auch darin, in erster Linie SFB–relevante MPI–Funktionalität zu implementieren. So konnte in relativ kurzer Zeit ein, wenn auch nicht optimaler, Prototyp geschaffen werden, auf dem eine im Rahmen von Teilprojekt D2 entwickelte Applikation (MISTRAL — numerische Simulation von dispersen Mehrphasenströmungen) zum Laufen gebracht werden konnte.

Ein weiterer Schwerpunkt der MPI–Entwicklung lag in der Fortführung des Multidevice–Konzeptes. So wurde das Design der Kommunikationsbibliothek so gestaltet, dass ein Multidevice in diesem Sinne nicht mehr benötigt wird. Vielmehr wird eine solche Funktionalität schon vom Kern selbst realisiert.

2.3.2 Teilaufgabe C: VIA–konformer PCI–SCI Adapter für optimiertes Message Passing

Während die physisch mögliche Kommunikationgeschwindigkeit stetig anwuchs, hat sich dieses Wachstum nicht mehr in gleicher Weise auf die Applikationen ausgewirkt. Dies betraf insbesondere die Latenzzeiten. Am Beispiel des TCP/IP Protokollstacks wurde dies in [VIA1] besonders eindrucksvoll aufgezeigt. Während der Anteil der Latenzzeit, der durch die eigentliche physische Übertragung der Daten anfällt, auch schon bei relativ langsamen Technologien wie Fast Ethernet sehr klein geworden war, hat sich der Anteil des Protokollstacks nur unwesentlich verringert.

Die wichtigste Schlussfolgerung daraus war, dass ein noch schnelleres Medium damit für kurze Nachrichten keine signifikante Verbesserungen bringt.

Als Lösung dieses Problem haben sich mehrere Ansätze herauskristallisiert. Zum einen muss der Protokollstack verkleinert und besser an die Anforderungen der Applikation angepasst werden. Zum anderen muss versucht werden, das Betriebssystem weitestgehend zu umgehen (jeder Einsprung in den Kernel kostet Zeit). Ferner muss jedes Umkopieren von Daten vermieden werden (*zero–copy–protocol* wird angestrebt).

Prinzipiell wurde mit SCI eine Umgehung des Betriebssystems durch die Realisierung von Distributed Shared Memory (DSM) ermöglicht. Damit werden jedoch lediglich Shared Memory Applikationen besser unterstützt. Message Passing Operationen, wie sie von unseren mathematischen und physikalischen Anwendungen (Projekte in A, C und D) verwendet werden, müssen hier auf Shared Memory abgebildet werden. Das kostet mindestens zwei zusätzliche Kopieroperationen beim Versenden von Daten. Performance–Untersuchungen am PCI Bus [PCI97], [HPVM] haben damals auch gezeigt, dass die Datenübertragungsrate im Shared Memory Modus (d.h. programmed IO) selbst bei modernen PCI Chipsätzen nicht an die maximale Bandbreite des PCI Bus herankommt. Die volle Leistung war nur dadurch zu erreichen, indem die Kommunikationshardware direkt auf die Daten im Hauptspeicher zugreift (DMA). Obwohl sich dieses Problem im Laufe des Antragszeitraumes etwas verbessert hat, besteht bei programmed IO nach wie vor das Problem, dass die CPU bei größeren Detentransfers zu stark in Anspruch genommen wird.

Es hat sich jedoch herausgestellt [WGR97], dass die Verwendung des Shared Memory beim Versenden von sehr kurzen Nachrichten, die zum Beispiel zur Synchronisation verwendet werden, aufgrund der sehr kleinen Latenzzeit bessere Ergebnisse als ein DMA–Modus liefert. Aus diesem Grund sollten einer Kommunikationsbibliothek beide Übertragungsmodi zur Verfügung gestellt werden.

Im Hinblick auf DMA Transfers unter Umgehung des Betriebssystems hat sich der Begriff *Protected User Level DMA* etabliert. Im internationalen Umfeld gab es zur Antragstellung eine Reihe von Projekten in dieser Richtung. Dazu zählen unter anderem das SHRIMP Projekt [SHRIMP1, SHRIMP2], das FLASH Projekt [FLASH] sowie das U–NET [UNET]. Weitere Arbeiten wurden in [HPCA] aufgezeigt. Weiterhin wurde eine neue Spezifikation, die sogenannte Virtual Interface Architecture (VIA) [VIA2] entwickelt, welche eine einheitliche Schnittstelle für Protected User Level DMA bzw. Message Passing Hardware/Systemsoftware allgemein definiert.

Damalige PCI–SCI Implementationen von Dolphin [Dolphin], der TU–München [SMiLE] sowie des CERN [CERN] boten noch keine Realisierungen derartiger architektonischer Merkmale auch für SCI. Die PCI–SCI Bridge des CERN war ursprünglich für reinen Datentransfer entworfen worden, bei dem Aspekte wie Speicherschutz keine Rolle spielen. Im Falle des Projektes an der TU–München stand eine allgemeine Untersuchung von SCI–Traffic bei Shared Memory Applikationen im Vordergrund. Dolphins Implementierung hat lediglich einen Shared Memory Modus angeboten.

Vorbereitend auf Teilthema C waren zur Antragstellung eine Diplom– sowie eine Studienarbeit in Bearbeitung. Die Diplomarbeit beschäftigte sich mit der Konzeption einer PCI–SCI Adapterkarte. Hauptschwerpunkte dieser Diplomarbeit waren eine bessere Unterstützung von SMP–Systemen im Shared Memory Modus (Trennung von Transaktionen verschiedener Prozesse um Transaction Ordering besser auflösen zu können), sowie eine grundlegende Einbettung von Protected User Level DMA. Die Studienarbeit befaßte sich mit der Aufgabe, die Hardware in das Betriebssystem Linux einzubinden. Dazu war einerseits ein Treiber zur Verwaltung der Hardware und zum Exportieren und Importieren von Speicherbereichen zu entwickeln, und andererseits das Memory Management von Linux um die Unterstützung für Shared Memory über SCI zu erweitern.

Innerhalb der Teilaufgabe C sollte sich mit dem Entwurf eines Hardwaremodells beschäftigt werden, welches Message Passing Applikationen schon auf der Hardwareebene möglichst gut unterstützt. Dies umfasste die Entwicklung einer entsprechenden PCI–SCI Adapterkarte sowie deren Einbindung in das Betriebssystem. Bezüglich der Hardware sollten dabei die Schwerpunkte auf einer Unterscheidung in Prozesse auch in der Kommunikationshardware sowie die damit verbundene Möglichkeit für Protected User Level DMA liegen. Ein wichtiger Schritt in diese Richtung ist die Einführung einer zweiten Address Translation Table, um auch Adressen von Upstream Transactions (sprich Zugriffe der Kommunikationshardware auf den Hauptspeicher) übersetzen zu können. Bisherige PCI–SCI Implementationen beinhalteten lediglich eine Downstream Address Translation Table.

Für den konkreten Aufbau der Hardware war dabei im Rahmen eines unabhängigen Projektes eine Zusammenarbeit mit der Chemnitzer Firma TBZ–PARIV GmbH geplant und ist auch zustande gekommen.

Mit Blick auf die Systemsoftware müssen diverse Erweiterungen des Betriebssystems (Linux) vorgenommen werden. Dies betrifft sowohl Treiberentwicklungen, als auch Änderungen am Linux–Kernel selbst.

Die Änderungen am Kernel selbst betrafen hauptsächlich das Memory Management System. Speziell musste die Verwaltung der Page–Tabellen modifiziert werden.

Während des Antragszeitraumes konnten wesentliche Ziele erreicht werden. So wurde ein PCI–SCI Adapter entwickelt, welcher prinzipiell in der Lage ist die Anforderungen eines zero–copy Protokolls für Message–Passing Bibliotheken zu erfüllen. Obwohl diese Hardware derzeit die geplante Funktionalität noch nicht in vollem Umfang zur Verfügung stellt, hat sich gezeigt, dass sie im Hinblick auf die reinen Leistungsparameter doch recht gut mit denen kommerzieller Entwicklungen (im besonderen von Dolphin) mithalten kann.

Parallel zur Hardware wurde auch ein entsprechender Linux–Treiber sowie eine Vielzahl von Dienstprogrammen entwickelt, welche zum Betrieb, zum Testen und zur Weiterentwicklung erforderlich sind.

Eine weitere wichtige Entwicklung war die eines sog. Emulators der Hardware. Mit Hilfe dieses Emulators war es beispielsweise möglich, die in Teilaufgabe B erwähnte Anwendung aus SFB Teilprojekt D2 (MISTRAL) zusammen mit der MPI–Eigenentwicklung sowie einem rudimentären VIA/SCI Device auf dem Forschungscluster zu testen, um damit die Funktionsfähigkeit der MPI–Implementation zu überprüfen.

Literaturverzeichnis

[BEY97] Uwe Beyer. *Optimierung einer multithreaded MPI–Implementierung*. Diplomarbeit. TU Chemnitz, Fakultät für Informatik, Professur Rechnerarchitektur, 1997.

[CERN] *Application of the Scalable Coherent Interface to Data Acquisition at LHC.* `http://www.cern.ch/RD24`

[Dolphin] Dolphin Interconnect Solutions `http://www.dolphinics.com`

[FLASH] J. Heinlein, K. Characholoo, S. Dresser, and A. Gupta. *Integration of Message Passing and Shared Memory in the Stanford FLASH Multiprocessor*. In Proc. of the 6th International Conference on Architectural Support for Programming Languages and Operating Systems, pages 38–50, 1994.

[GLS94] Gropp, Lusk, Skjellum. *Using MPI* . MIT Press, 1994.

[GLS96] Gropp, Lusk, Skjellum. *A High–Performance, Portable Implementation of the MPI Message Passing Standard.* `http://www.mcs.anl.gov/mpi/mpicharticle/paper.html`

[HPCA] E. P. Markatos and M. G. H. Katevenis. *User–Level DMA without System Kernel Modification*. Proceedings to The Third International Symposium on High–Performance Computer Architecture. p. 322ff.

[HPVM] *SYSTEM BANDWIDTH TESTS AND FM PERFORMANCE TESTS RESULTS.* `http://www-csag.cs.uiuc.edu/projects/comm/hcl.html`

[LAM96] *MPI Primer / Developing with LAM.* `http://www.osc.edu/lam.html`

[LAN96] Oliver Langer. *An Implementation of MPI – The Shared Memory Device*. Computer Architecture Technical Report RA–TR–96–08. TU Chemnitz, 1996.

[MPI95] *A Message–Passing Interface Standard.* `http://www.mcs.anl.gov/Projects/mpi/index.html`, Juni 1995.

[MPI97] Message Passing Interface Forum. *MPI–2: Extensions to the Message–Passing Interface.* `http://www.mpi-forum.org/docs/docs.html`

[PCI97] M. Trams, F. Seifert, W. Rehm. *PCI Performance Messungen mit dem HP PCI Exercizer/Analyzer*. Computer Architecture Technical Report RA-TR-97-05. TU Chemnitz, 1997. `http://www.tu-chemnitz.de/informatik/RA/papers/p97/papers.html`

[RAD97] Thomas Radke. *More Message Passing Performance with the Multithreaded MPICH Device*. Computer Architecture Technical Report RA–TR–97–04. TU Chemnitz, 1997.

[Scali] *ScaMPI.* `http://www.scali.com/html/scampi.html`

[SCH97] Sven Schindler. *Weiterentwicklung der MPICH–Implementation für SCI–Cluster*. Studienarbeit. TU Chemnitz, Fakultät für Informatik, Professur Rechnerarchitektur, 1997.

[SHRIMP1] *The Scalable High-performance Really Inexpensive Multi-Processor (SHRIMP) Project.*
`http://www.cs.princeton.edu/shrimp`

[SHRIMP2] M.A.Blumrich, C.Dubnicki, E.W.Felten and Kai Li. *Prodected, User–Level DMA for the SHRIMP Network Interface.* Dept. of Computer Science, Princeton University, 1996.
`http://www.cs.princeton.edu/shrimp/html/papers_stack_18.html`

[SMiLE] *Shared Memory in a LAN-like Environment.* Projekt am Lehrstuhl für Rechnertechnik und Rechnerorganisation der TU-München.
`http://wwwbode.informatik.tu-muenchen.de/Par/arch/smile`

[UNET] M. Welsh, A. Basu, T.v. Eicken. *Incorporating Memory Management into User–Level Network Interfaces.* Dept. of Computer Science, Cornell University, 1997.
`http://www2.cs.cornell.edu/U-Net`

[VIA1] Intel Corporation. *Intel and the VI initiative.*
`http://www.intel.com/procs/SERVERS/isv/vi/vi2/index.htm`

[VIA2] Virtual Interface Architecture Homepage.
`http://www.viarch.org`

[WGR97] Jörg Werner, Lothar Grabowsky, Thomas Radke. *SCI–MPI An optimized implementation of a MPI Subset for SCI connected SMP–systems.* Computer Architecture Technical Report RA–TR–97– 03. TU Chemnitz, 1997.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe B: MPI–Infrastrukturen zur effizienten Anpassung an heterogene Kommunikationssysteme

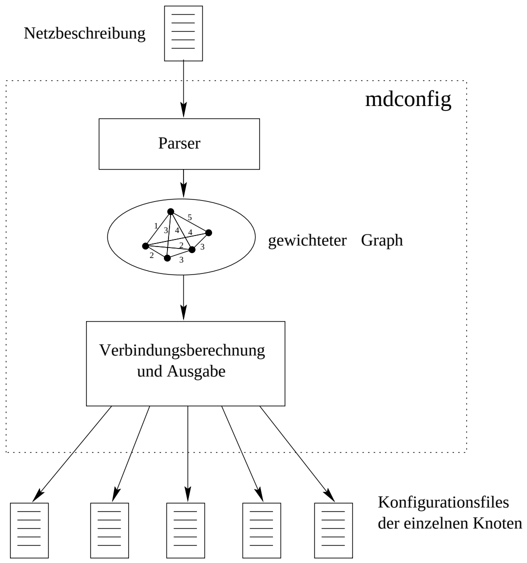
2.4.1.1 Das MPICH Multidevice

Zunächst wurde planmäßig mit der Entwicklung des Multidevices begonnen. Es wurde ein Multidevice für MPICH geschaffen, welches als Subdevices zunächst ein sog. Multi-Threaded Device (für Kommunikation innerhalb eines SMP–Systems) und ein SCI Device (für Kommunikation innerhalb eines Clusters via handelsüblicher SCI Hardware) enthielt. Entsprechende Arbeiten sind in [SCH99D] und [SR99] dokumentiert und veröffentlicht.

Neben dem eigentlichen Multidevice wurde auch ein entsprechendes Konfigurationstool namens mdconfig entwickelt, welches zum Einstellen des Multidevices verwendet wird. Abb. 2.1 stellt die prinziplelle Arbeitsweise von mdconfig dar.

Mit Hilfe von mdconfig wird demnach die zugrunde liegende Architektur (Kommunikationsmöglichkeiten und Eigenschaften) ausgewertet. Die ermittelten Ergebnisse

Abbildung 2.1: Arbeitsweise von mdconfig



werden später vom Multidevice selbst benutzt, um eine Entscheidung über das im konkreten Fall zu benutzende Subdevice zu fällen.

Bei der Gegenüberstellung des Multidevices mit einem "natürlichen" ADI-2 Devices konnte gezeigt werden, dass das Multidevice selbst trotz der zusätzlichen Schicht nicht zu größeren Leistungsverlusten führt. Tabelle 2.1 zeigt dies am Beispiel des Multi–Threaded Devices (Auszug aus [SR99]).

Tabelle 2.1: Leistungsvergleich von Multidevice und normalem ADI–2 Device (Multi–Threaded)

Message Größe in Byte	Multidevice Transfer Zeit in ns	ADI–2 Device Transfer Zeit in ns
1	51.8	50.8
16	52.0	51.3
64	52.2	51.5
256	52.7	51.8
1024	54.6	55.7
32768	208	199
524289	6184	6159

Obwohl ursprünglich für weitere Entwicklungen und Optimierungen der MPI Kommunikationsbibliothek MPICH als Basisimplementation dienen sollte (insbesondere in Hinsicht auf die in Teilaufgabe C zu entwickelnde VIA/SCI Hardware), hat sich dies aus verschiedenen Gründen als unpraktikabel erwießen. Zum einen wurden Entwicklungen auf Basis der ADI-2 Schnittstelle durch ständige Weiterentwicklung von MPICH selbst erschwert (Kompatibilitätsprobleme), und zum anderen haben sich prinzipielle Design–Probleme ergeben, welche die Integration wichtiger innovativer Merkmale (insbesondere Zero-Copy) äußerst schwierig gestalteten.

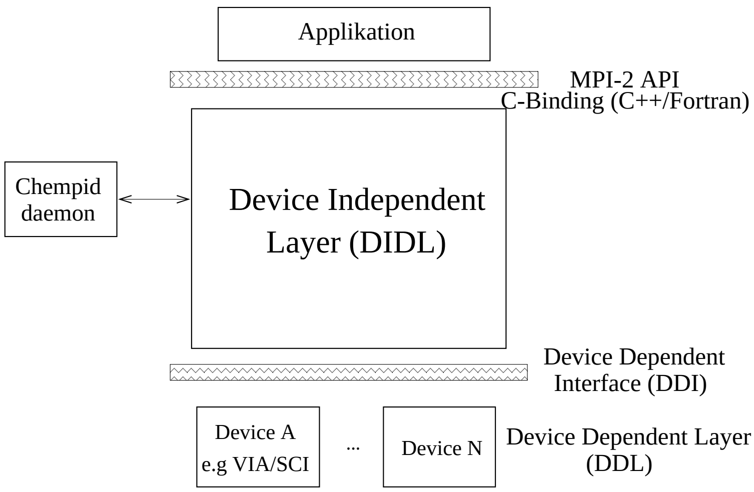
Aus diesen Gründen wurde beschlossen, mit der Entwicklung einer eigenen MPI–Implementation zu beginnen (CHEMPI — CHEmnitz MPI).

2.4.1.2 CHEMPI

Ziel von CHEMPI war und ist die Entwicklung eines Subsets der MPI–2 Funktionalität, welcher ausreichend für die in anderen Teilprojekten innerhalb des Sonderforschungsbereiches entwickelten MPI–Applikationen ist. Auch wurde von vorn herein großer Wert auf ein möglichst effizientes Zusammenspiel zwischen der MPI–Bibliothek und der in Teilaufgabe C entwickelten Kommunikationshardware gelegt. Damit sollten die prinzipiellen Hürden umgangen werden, die sich bei der Benutzung von MPICH für diesen Zweck ergeben hatten.

Der prinzipielle Aufbau von CHEMPI wurde dabei ähnlich zu MPICH gestaltet. D.h. die grundlegende allgemeine MPI Funktionalität wird in einer komplexeren Schicht (*Device Independent Layer*) realisiert, während die Anbindung an konkrete Hardware im sog. *Device Dependent Layer* umgesetzt wird. Abbildung 2.2 veranschaulicht diesen Zusammenhang.

Abbildung 2.2: Struktureller Aufbau von CHEMPI



Damit wird auch bei CHEMPI die prinzipielle Möglichkeit gegeben, verschiedene Hardwarearchitekturen als Kommunikationsmedium einzusetzen. Dabei sind die Erfahrungen, die mit dem Multidevice für MPICH gemacht worden [SCH99D, SR99] in das Design von CHEMPI eingeflossen. D.h. CHEMPI unterstützt ein solches Multidevice schon von Haus aus, bzw. es ist nicht erforderlich ein solches Device für CHEMPI zu entwickeln, da die entsprechende Funktionalität schon im *Device Independent Layer* integriert ist.

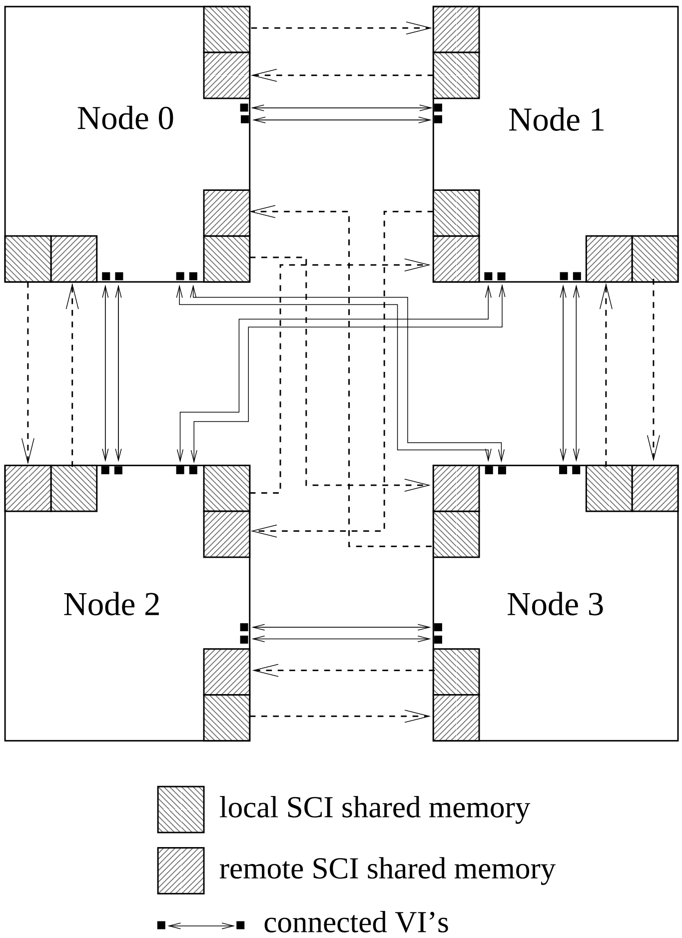
Obwohl mehrere Devices im Sinne eines Multidevices unterstützt werden, liegt das Hauptaugenmerk aber auf der Kombination von Scalable Coherent Interface und Virtual Interface Architecture (Teilaufgabe C). Die Möglichkeit für verschiedene Kommunikationsmedien ist aber nach wie vor von großer Bedeutung für das Gesamtkonzept. Zum einen lassen sich dadurch zu Test– und Entwicklungszwecken einfachere Devices (z.B. TCP/IP) anbinden, zum anderen kann andere Hardware angebunden werden, um die Güte der in Teilaufgabe C realisierten Kommunikationshardware zu bestimmen.

2.4.1.3 Das VIA/SCI Device

Wie oben erwähnt, ist das VIA/SCI Device von großer Bedeutung für das Gesamtkonzept von CHEMPI, da nur durch dieses Device aufgrund seiner Architektur bestmögliche Leistungen erreicht werden können. Nähere Hardware– und Betriebssystemspezifische Eigenschaften der dem VIA/SCI Device zugrundeliegenden Architektur werden im Rahmen von Teilaufgabe C beschrieben.

Abbildung 2.3 zeigt die Art und Weise in der VIA/SCI Devices verschiedener Knoten logisch miteinander verbunden sind.

Abbildung 2.3: Verbindungsrelationen des CHEMPI VIA/SCI Devices



Das besondere hierbei ist die Verbindung über Message–Passing ähnliche Kanäle (verbundene Virtual Interfaces — VIs) und über Distributed Shared Memory. Ziel dieser Kombination ist eine gute Leistungsausbeute für kleine und auch größere Messages.

So sollen kleine Messages bevorzugt via Distributed Shared Memory (insbesondere durch Schreiboperationen in entfernten Speicher) übertragen werden, während größere Messages über den Protected User Level DMA Mechanismus der Virtual Interface Architecture versendet werden.

2.4.1.4 Potential eines VIA/SCI Devices

Um das Leistungspotential eines VIA/SCI Devices abschätzen zu können, wurde eine Testimplementierung auf Basis kommerzieller SCI (Dolphin) und VIA (GigaNet) Hardware vorgenommen. Bei kleinen Messages wurden diese dabei über den Distributed Shared Memory von SCI übertragen, und bei größeren Messages wurde auf die Remote DMA der VIA Hardware zurückgegriffen.

Abbildungen 2.4 und 2.5 zeigen den Vergleich dieser Testimplementierung mit ScaMPI, einer kommerziellen MPI–Implementation für SCI von Scali, und mit MPI/Pro, einer kommerziellen MPI–Implementation für GigaNet's VIA Hardware von MPI Software Technology.

Unabhängig davon wurden SCI und VIA (GigaNet cLAN) MPI Implementationen bezüglich ihrer Leistunsfähigkeit betrachtet [SBR00]. Abbildung 2.6 zeigt das Verhältnis der mittels eines einfachen Benchmarkes (NetPipe) aufgenommenen MPI–Kommunikationsleistung von SCI (ScaMPI) und VIA (GigaNet cLAN mit MPI/Pro).

2.4.1.5 VIA/SCI Device mit Zero–Copy Möglichkeit

Um richtig zero–copy auf Basis einer kombinierten VIA/SCI Hardware betreiben zu können, sind spezielle Vorkehrungen nötig. Obwohl die Hardware dabei wesentliche Mechanismen zur Verfügung stellt (z.B. jede beliebige Speicherstelle eines Anwendungsprozesses kann der Hardware zur Verfügung gestellt und/oder von einem entfernten Prozess importiert werden [TRBS00]) sind die Ressourcen doch beschränkt. D.h. exportierbarer und importierbarer Speicher sind begrenzt. Hinzu kommt noch, daß es sich bei solchen sog. Memory–Registration Operations um relativ zeitaufwendige Operationen handelt [SR00].

Das bedeutet, dass derartige Registrierungen nicht jedesmal durchgeführt werden können wenn die MPI Applikation kommunizieren möchte, und unmittelbar danach wieder entfernt werden, um Hardwareressourcen freizugeben. Schließlich würde dies auch dem angestrebten Paradigma eines *User–Level Hardware Access* widersprechen.

Um dem zu begegnen wurde in [JOR00] ein Mechanismus entwickelt, welcher es ermöglicht diese Ressourcen dynamisch zu verwalten.

Vereinfacht gesagt bedeudet dies beispielsweise, dass wenn Speicher in der Hardware registriert werden soll (z.B. um ihn zu exportieren, sprich entfernten Prozessen zugänglich machen), dies zunächst durch entsprechend zeitaufwendige Systemrufe realisiert wird. Da die Wahrscheinlichkeit groß ist, dass dieser Speicherbereich in naher Zukunft wieder für den selben Zweck benutzt wird (es kann sich z.B. um ein Ergebnisfeld einer MPI–Applikation handeln), bleibt diese Registrierung für einen unbestimmten Zeitraum erhalten. Damit kommt eine weitere Nutzung dieses

Abbildung 2.4: Vergleich des VIA/SCI Testdevices mit ScaMPI und MPI/Pro (Bandbreite)

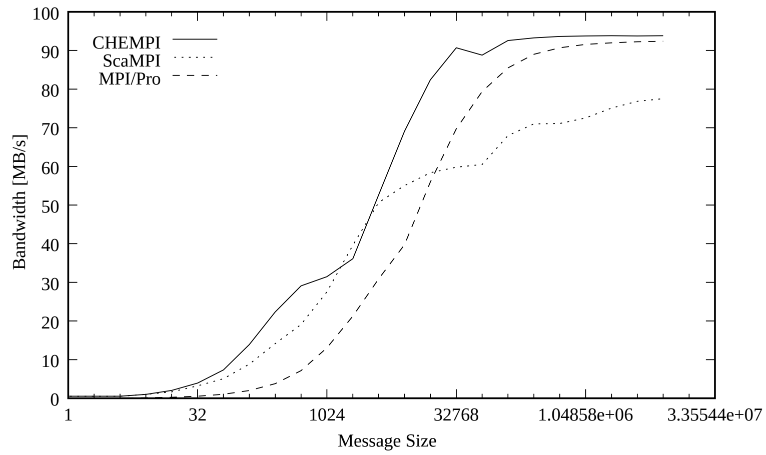
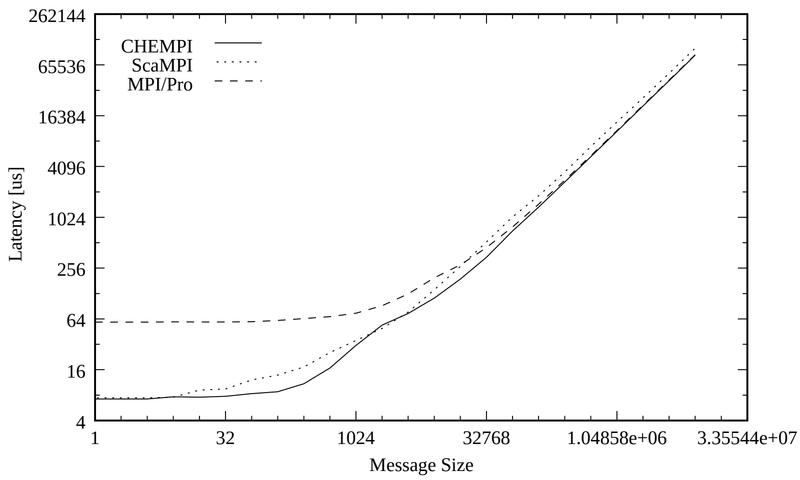


Abbildung 2.5: Vergleich des VIA/SCI Testdevices mit ScaMPI und MPI/Pro (Latenzzeit)



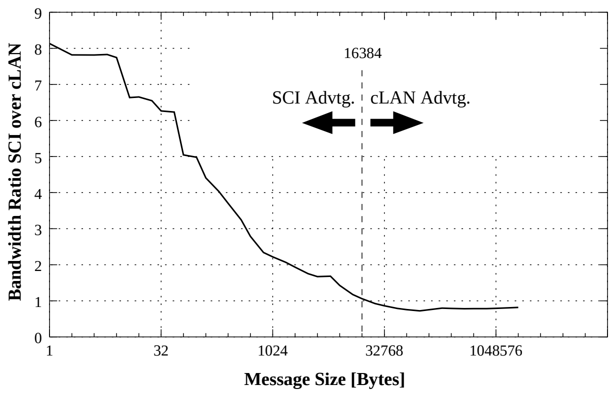
Bereiches ohne neuerliche Registrierung aus und die Hardwareressourcen können sofort ohne weitere Systemrufe genutzt werden.

Neigen sich dabei verfügbare Ressourcen dem Ende zu, so werden diese automatisch entzogen und neu verteilt.

Dieser Mechanismus setzt dabei unmittelbar auf der *ExtVIPL* (siehe Abschnitt 2.4.2.4 auf Seite 114) auf und fungiert als eine Art Wrapper dieser Library. Für die darüberliegende MPI bzw. CHEMPI Device Schicht ist diese Funktionalität weitestgehend transparent.

Bezüglich der Implementation des eigentlichen VIA/SCI Devices mit Zero–Copy Fähigkeit für CHEMPI ist momentan eine Diplomarbeit in Bearbeitung [JOR01].

Abbildung 2.6: Verhältnis von SCI Bandbreite (über ScaMPI) zu VIA cLAN Bandbreite (über MPI/Pro)

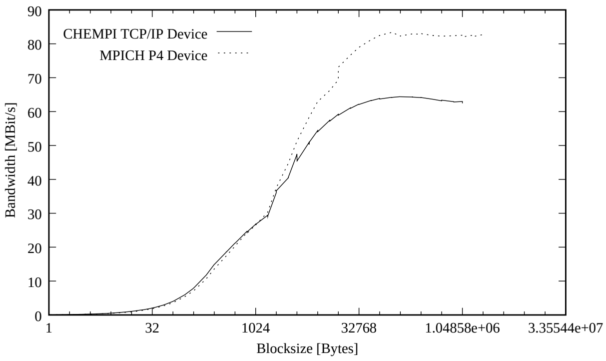


2.4.1.6 TCP/IP Device

Um CHEMPI auch mit Standard–Hardware (z.B. einfache FastEthernet Karten) betreiben zu können, wurde zunächst ein TCP/IP Device auf Basis des p4–Devices von MPICH entwickelt [SCHM00].

Ein Leistungsvergleich zum p4–Device von MPICH hat dabei zumindest im Bereich der kleineren Messages nicht schlecht abgeschnitten, wie aus Abbildung 2.7 ersichtlich wird.

Abbildung 2.7: Vergleich des CHEMPI TCP/IP Devices mit dem MPICH p4 Device



Bei größeren Messages liegt die Leistung des CHEMPI TCP/IP Devices lediglich bei etwa 75% des p4–Devices. Hier besteht jedoch noch die Möglichkeit zu Verbesserungen.

Hierzu wird voraussichtlich in Kürze eine Diplomarbeit bearbeitet werden, in der komplett vom p4–Device Abstand genommen werden soll.

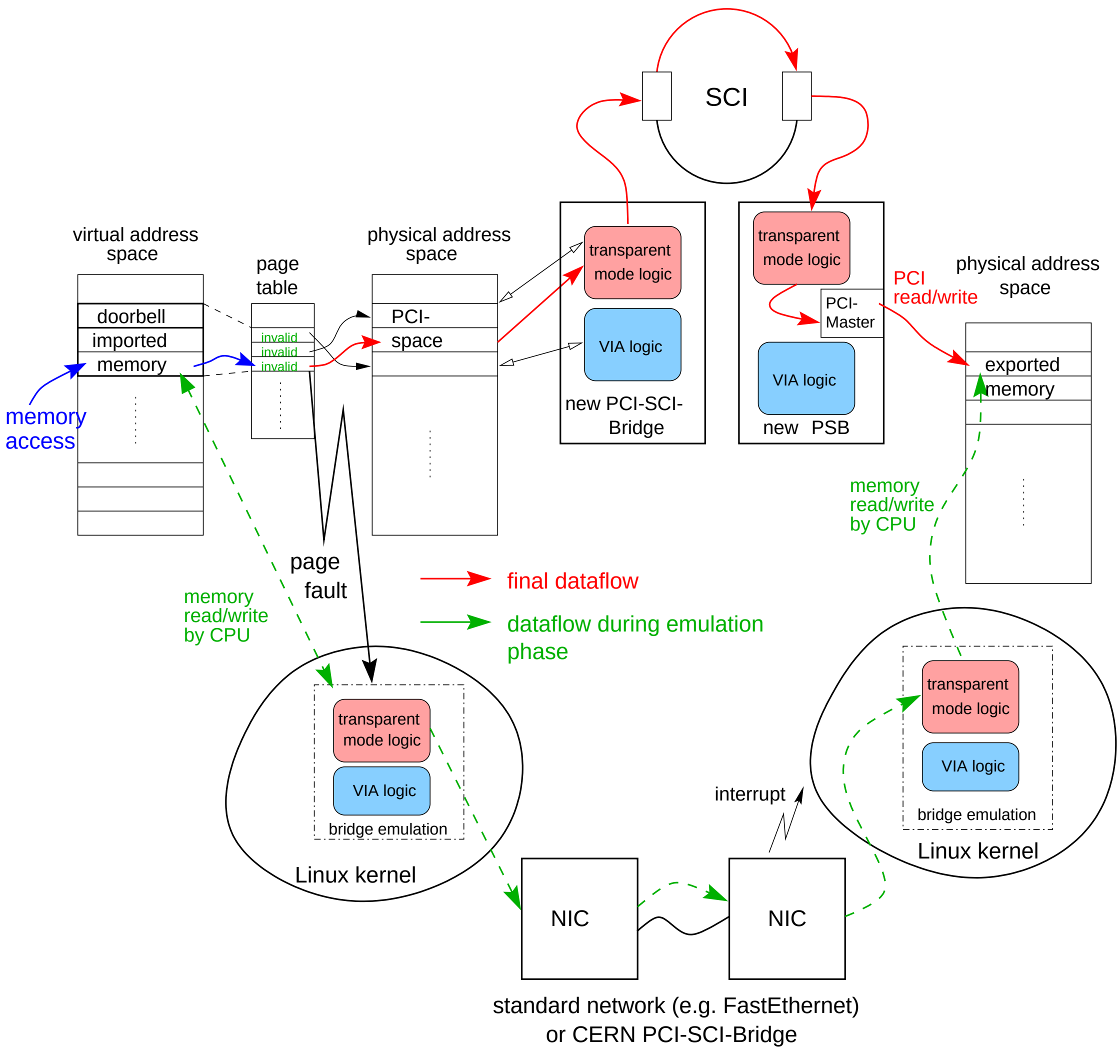
2.4.2 Teilaufgabe C: VIA–konformer PCI–SCI Adapter für optimiertes Message Passing

Wie vorgesehen wurde mit der Konzeption [TRA98] einer Hardware begonnen, welche die Vorzüge eines Distributed Shared Memory von SCI mit Protected User Level DMA der Virtual Interface Architecture verbindet. Danach wurde mit der konkreten Umsetzung des Konzeptes begonnen.

2.4.2.1 Hardware Emulation

Parallel zur Realisierung der Hardware wurde der Hardware–Emulator entwickelt [SEI99]. Abbildung 2.8 zeigt die prinzipielle Arbeitsweise des Emulators.

Abbildung 2.8: Prinzip der Hardware–Emulation

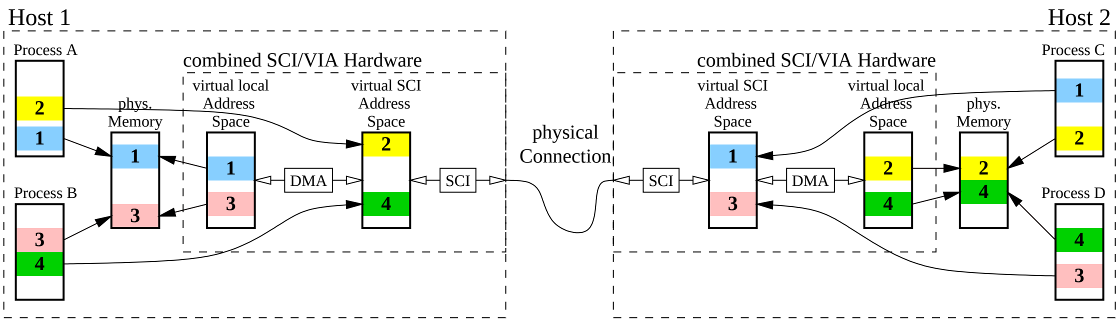


Der Haupteingriffspunkt des Emulators in das System ist dabei das Paging bzw. die Memory Management Unit des Prozessors. Da die Hardware selbst ausschließlich per Memory–Mapped IO gesteuert wird, kann diese daher vollständig emuliert werden. Die über den Emulator erreichbare Leistung ist zwar extrem gering (hier wurden 120kB/s bei Schreiboperationen auf entfernten Speicher gemessen [SEI99D]), jedoch reicht dies für prinzipielle Tests und Entwicklungen an höheren Softwareschichten (z.B. MPI Bibliothek) aus.

2.4.2.2 Logische Hardwarearchitektur

Das Prinzip der Kommunikationshardware beruht auf einer für Message Passing ausgelegten Kombination von SCI und VIA [TRS99, TRBS00, RTBS00]. Dabei wurde im wesentlichen die in der VIA vorgesehene virtuelle Sicht auf den lokalen Speicher in eine herkömmliche SCI Architektur integriert. Abbildung 2.9 zeigt diesen Sachverhalt anhand eines einfachen Beispiels mit 4 Prozessen auf 2 Knoten. Die

Abbildung 2.9: Prinzipbeispiel der Verschmelzung von VIA mit SCI



einzelnen Prozesse können dabei Speicher von anderen Prozessen im Sinne eines Distributed Shared Memory von SCI importieren und direkt darauf arbeiten, oder sie können Gebrauch von der DMA Engine machen, um größere Datenblöcke zu verschieben. DMA Transfers können direkt von den Anwendungsprozessen angestoßen werden (ohne Betriebssystemaufrufe), da die Hardware eventuelle Schutzverletzungen nicht zulässt (Protected User Level DMA).

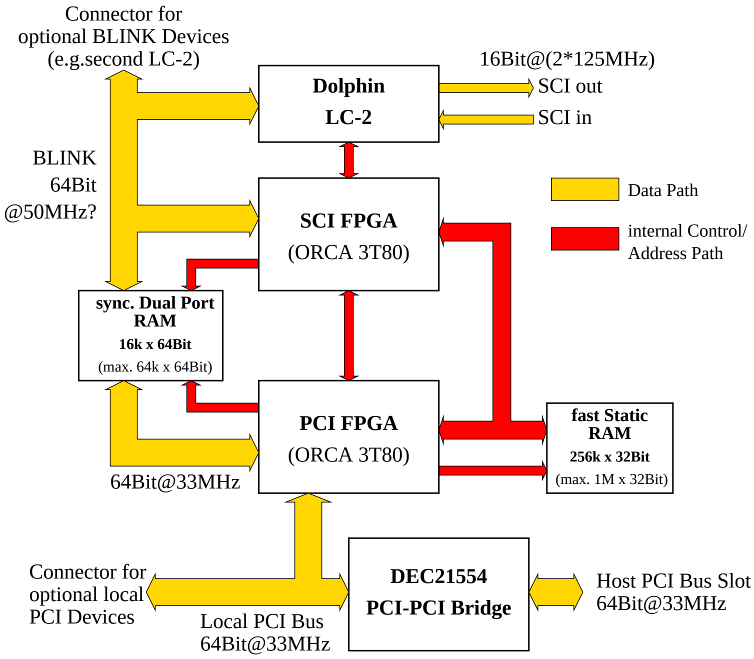
2.4.2.3 PCI–SCI Hardware

Es wurde erfolgreich eine auf FPGAs (Field Programmable Gate Arrays, programmierbare Schaltkreise) und einem kommerziell erhältlichen SCI Link Controller der Firma Dolphin entwickelt und aufgebaut [TR99, TSR00C]. Abbildung 2.10 zeigt die physische Architektur dieser Karte. Aufgrund der Programmierbarkeit der Hardware wurde diese Karte Generic PCI–SCI Bridge, oder kurz GPSB genannt.

Stand der Entwicklung dieser Hardware ist dabei die Möglichkeit Speicher zu exportieren als auch zu importieren, sowie auf entfernten Speicher zu schreiben. Ein einfacher Paket Transfer Modus, welcher zum Datenaustausch der Systemsoftware vorgesehen ist, wurde ebenfalls implementiert.

Erste Messungen der Latenzzeit von Schreiboperationen auf entfernten Speicher ergaben einen Wert von ca. 4μs. Obwohl diese Latenzzeit um einiges höher ist als

Abbildung 2.10: Blockschaltbild der PCI–SCI Bridge



bei kommerzieller Hardware von Dolphin (ca. $2\mu s$), ist dies doch besser als erwartet. Schließlich handelt es sich hierbei mehr um ein Proof–of–Concept mit relativ langsamen FPGAs im Gegensatz zu der ASIC–Lösung in Dolphins Hardware.

2.4.2.4 Die erweiterte Virtual Interface Provider Library

Einhergehend mit der architekturellen Verschmelzung von SCI und VIA wurde die ursprüngliche Virtual Interface Provider Library (VIPL) erweitert, so dass es mit der sog. *ExtVIPL* nicht nur möglich ist bestimmte Hardwarefunktionen im Sinne der konventionellen VIA anzusprechen, sondern ebenfalls lokalen Speicher zu exportieren (entfernten Knoten/Prozessen zu Verfügung stellen) und entfernten Speicher zu importieren.

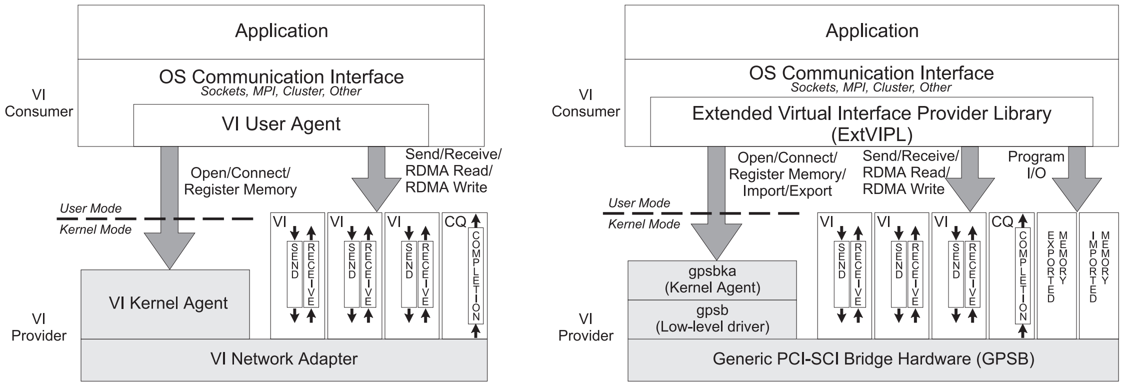
Abbildung 2.11 stellt diesen Sachverhalt an einer Gegenüberstellung des ursprünglichen VIA–Schichtenmodells mit dem erweiterten Modell dar. Dieses erweiterte Modell spiegelt dabei deutlich die zugrundeliegende Hardwarearchitektur wider.

2.4.3 Hardware–Treiber und Dienstprogramme

Obwohl dies nicht unmittelbar zu konzeptionell neuen Ergebnissen führt, ist mit der Entwicklung neuer Hardware die Entwicklung entsprechender Treibersoftware etc. notwendig.

Derzeit unterstützt der Treiber die neueste Linux–Kernel Version (2.4.x) und ist sowohl auf Systemen mit Intel–Architektur (AMD eingeschlossen) als auch auf Alpha–Systemen lauffähig. Eine Unterstützung der Alpha–Architektur war dabei nicht trivial, da es hier doch erhebliche architekturelle Unterschiede gibt.

Abbildung 2.11: Vergleich der herkömmlichen VI Architektur (links) mit der erweiterten (rechts)



Die Unterstützung der Alpha–Architektur war jedoch sehr wichtig, da diese Systeme derzeit mit zu den führenden im Hinblick auf Rechen– und Kommunikationsleistung zählen. Aus diesem Grund wurde auch im Jahr 2000 im Rahmen des Sonderforschungsbereiches ein kleinerer Alpha–Cluster angeschafft, welcher zum einem als Rechencluster dem SFB zur Verfügung steht, und zum anderen als Testplattform für die hier entwickelte Hardware genutzt wird.

Abgesehen von der üblichen Treiberfunktionalität selbst (Initialisierung, Interruptbearbeitung, Bereitstellung von Systemrufen etc.) integriert dieser Treiber einen einfachen Messaging–Mechanismus, welcher wiederum von der Hardware selbst als einfachster Transfer–Modus unterstützt wird (der sog. Manuelle Pakettransfer Modus). Dieser Mechanismus soll als eine Art Verbindungsaufbaumedium dienen, den sich die SCI/VIA–Systemsoftware zu Nutze macht, um z.B. globale Speichermappings aufzubauen. Entsprechende Arbeiten dazu laufen zur Zeit.

Neben dem Treiber selbst wurde eine Vielzahl von Konfigurations– und Testprogrammen entwickelt. Um nur einige zu nennen:

- Programmierung des Flash–ROMs zur FPGA–Initialisierung
- Programmierung diverser Konfigurations–EEPROMs
- Test der Hardwarekomponenten
- Abfrage von Statusregistern
- ...

Literaturverzeichnis

Begutachete Literatur

[RSTB00] Wolfgang Rehm, Stanislav Simeonov, Mario Trams und Daniel Balkanski: *Message Passing on PCI-SCI Interfaces*, Proceedings of Bulgarian Academy of Sciences, vol.8, 2000, Publisher: Academic Publishing "Acad. M. Drinow"

[RTBS00] Wolfgang Rehm, Mario Trams, Daniel Balkanski und Stanislav Simeonov: *A New Architectural Concept for Highly Efficient Message-Passing on PCI–SCI Network Interfaces*, 14th International Conference "System for Automation of Engineering and Research"SAER'2000, 18.–20. September 2000, St. Konstantin (Varna), Bulgarien

[SBR00] Friedrich Seifert, Daniel Balkanski und Wolfgang Rehm: *Comparing MPI Performance of SCI and VIA*, Proceedings of the SCI-Europe 2000, 29.–30. August 2000, München, im Rahmen der Euro-Par 2000.

[SR00] Friedrich Seifert und Wolfgang Rehm: *Proposing a Mechanism for Reliably Locking VIA Communication Memory in Linux* Proceedings of the CLUSTER2000 — IEEE International Conference on Cluster Computing, 28.Nov.–1.Dez. 2000, Chemnitz, ISBN 0-7695-0896-0, Seiten 225–232.

[SR99] Sven Schindler und Wolfgang Rehm: *Multiple Devices Under MPICH* , PASA'99 5. Workshop Parallele Systeme und Algorithmen, 7. Oktober 1999, Jena, im Rahmen der ARCS'99 — 15. GI/ITG-Fachtagung Architektur von Rechensystemen.

[SRD00] Sven Schindler, Wolfgang Rehm und Carsten Dinkelmann: *An optimized MPI library for VIA/SCI cards* , Proceedings of the Asia-Pacific International Symposium on Cluster Computing (APSCC'2000) im Rahmen der Fourth International Conference/Exhibition on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPCAsia2000), 14.–17. Mai 2000, Beijing/China, Volume II, Seiten 895–903.

[TRS99] Mario Trams, Wolfgang Rehm und Friedrich Seifert: *An Advanced PCI-SCI Bridge With VIA Support*, 2.Workshop Cluster Computing, 25./26. März 1999, Universität Karlsruhe. Chemnitzer Informatik-Berichte CSR-99-02 (157 S.). ISSN 0947-5125

[TR99] Mario Trams und Wolfgang Rehm: *A New Generic and Reconfigurable PCI-SCI Bridge*, Proceedings of the SCI-Europe'99, 2.–3. September 1999, Toulouse/Frankreich, im Rahmen der Euro-PAR'99.

[TRBS00] Mario Trams, Wolfgang Rehm, Daniel Balkanski und Stanislav Simeonov: *Memory Management in a combined VIA/SCI Hardware*, Proceedings of the PC-NOW 2000, International Workshop on Personal Computer based Networks of Workstations im Rahmen des International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS 2000), 1.–5. Mai 2000, Cancun/Mexico. Springer LNCS Series, ISSN 0302-9743, ISBN 3-540-67442-X, Seiten 4–15.

[TSR00C] Mario Trams, Ralph Schlosser und Wolfgang Rehm: *Design Choices and First Results of Our VIA-Capable PCI-SCI Bridge*, Proceedings of the CLUSTER2000 — IEEE International Conference on Cluster Computing, 28.Nov.–1.Dez. 2000, Chemnitz, ISBN 0-7695-0896-0, Seiten 349–350.

Sonstige Arbeiten (Diplomarbeiten, Technical Reports etc.)

[JOR00] Lars Jordan *Entwicklung eines effizienten Speichermanagementes für das CHEMPI VIA/SCI Device*, Studienarbeit, TU Chemnitz, Fakultät für Informatik, Oktober 2000

[JOR01] Lars Jordan *Entwicklung eines VIA/SCI Devices fr CHEMPI*, Diplomarbeit (in Bearbeitung), TU Chemnitz, Fakultät für Informatik

[SCH99D] Sven Schindler: *Entwurf und Implementierung eines ADI–2 Multidevices*, Diplomarbeit, TU Chemnitz, Fakultät für Informatik, März 1999

[SCHM00] Ralf Schmidt *Entwicklung eines TCP/IP Devices für CHEMPI*, Studienarbeit, TU Chemnitz, Fakultät für Informatik, Oktober 2000

[SEI99] Friedrich Seifert: *Design and Implementation of System Software for Transparent Mode Communication over SCI*, Studienarbeit, TU Chemnitz, Fakultät für Informatik, Februar 1999

[SEI99D] Friedrich Seifert: *Development of system software to integrate the Virtual Interface Architecture (VIA) into the Linux operating system kernel for optimized message passing*, Diplomarbeit, TU Chemnitz, Fakultät für Informatik, Oktober 1999

[TRA98] Mario Trams: *Design of a system-friendly PCI-SCI bridge with an optimized user-interface*, Diplomarbeit, TU Chemnitz, Fakultät für Informatik, September 1998

Projektseiten im Internet

[CHEMPI] Projektseite von CHEMPI:
`http://www.tu-chemnitz.de/informatik/RA/projects/chempi-html`

[HARD] Projektseite der Hardwareentwicklung:
`http://www.tu-chemnitz.de/~mtr/VIA_SCI`

[SYSSOFT] Projektseite der VIA/SCI Systemsoftware:
`http://www.tu-chemnitz.de/~sfri/ra/via_linux`

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Bezüglich der MPI Implementation CHEMPI gilt es, insbesondere das VIA/SCI Device konsequent zu vervollständigen, um das Potential der Hardware voll ausschöpfen zu können. Desweiteren muss die Funktionalität von CHEMPI weiter vervollständigt werden, wobei hier der Schwerpunkt auf der wirklich benötigten MPI bzw. MPI–2 Funktionalität liegt.

Die im Rahmen von Teilaufgabe C erarbeiteten Hard– und Systemsoftwarelösungen müssen noch weiter vervollständigt werden. Bei der Hardware betrifft dies insbesondere die DMA Engine, welche zur Entlastung des Prozessors und zur Steigerung der Bandbreite benötigt wird.

Ferner müssen folgende Dinge näher untersucht werden:

- Inwiefern lässt sich CHEMPI bzw. die Message Passing Bibliothek allgemein noch besser durch die Hardware unterstützen?
- Wie lassen sich Message Passing Applikationen durch die Systemsoft– und Hardware im Hinblick auf Ressourcenausnutzung besser unterstützen?

- Wie kann man den (gegenüber der Hardware so großen) Software–Overhead im Kommunikationsinterface minimal halten, um effiziente Kommunikation, insbesondere eff. globale Operationen erzeugen zu können?
- Wie ist die obige Fragestellung in heterogenen Clustersystemen zu beantworten?

Teilprojekt B7

2.1 Teilprojekt B7

Management von Cluster–Systemen

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Ing. Wolfgang Rehm
27.09.1950
Professur Rechnerarchitektur
und Mikroprogrammierung
Fakultät für Informatik
Technische Universität Chemnitz
09107 Chemnitz
Tel.: (0371) 531-1420
Fax: (0371) 531-1806
rehm@informatik.tu-chemnitz.de

2.1.2 Projektbearbeiter

Dipl.-Inf.(FH) C.Dinkelmann
Technische Universität Chemnitz, Fakultät für Informatik

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Cluster-Computing wird allgemein als Lösungsansatz für preiswerte Parallelverarbeitung angesehen. Aus diesem Grund wurden an der Professur Rechnerarchitektur drei Cluster-Prototypen realisiert und teilweise im Rahmen des SFB genutzt. Mit zunehmender Knotenanzahl rückt hierbei das Problem der Administration des Clusters in den Vordergrund. Zu lösen sind insbesondere folgende Aufgaben:

- *Systemverwaltung.* Notwendig ist eine Lösung zur weitgehend automatischen Inbetriebnahme, Konfiguration und Wartung von Knoten des Clusters. Dies schließt ein Recovery im Fehlerfall ein.

- *Software-Konfigurationsmanagement.* Im Gegensatz zu verschiedenen Parallelrechnern erlauben Cluster in der Regel den direkten Nutzerzugriff auf einzelne Knoten des Systems. Dies erfordert die Bereitstellung einer einheitlichen Softwareumgebung auf allen Knoten sowie die Organisation von deren Wartung.

- *Nutzerverwaltung.* Bei der Zuweisung von Resourcen an Nutzer (Menschen und Programme) müssen neben sequentiellen auch kooperierende Prozesse unterstützt werden.

Aus der im Gegensatz zu Rechnernetzen unterschiedlichen Knotenausstattung sowie unterschiedlichen Zugangsmechanismen ergeben sich spezifische Anforderungen, aber auch neue Möglichkeiten, beispielsweise beim Vorhandensein eines lokalen Kommunikationsnetzes.

Aufgrund der Tatsache, dass für Teilprojekt B6 für den Antragszeitraum von 1999–2001 eine halbe Stelle weniger bewilligt wurde als beantragt, und dass es einen unvorhergesehenen Weggang eines Mitarbeiters aus der Grundausstattung für Teilprojekt B6 gab, konnte Teilprojekt B7 nicht im vollen Maße wie ursprünglich vorgesehen durchgeführt werden. Aufgrund dessen wurde die für Teilprojekt B7 beantragte und bewilligte halbe Stelle nach Ablauf der halben Projektzeit mehr auf Teilprojekt B6 konzentriert.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

Mit zunehmender Akzeptanz des Cluster–Computings für wissenschaftliches Rechnen und zunehmender Größe solcher Systeme spielt deren Administration eine wachsende Rolle. Dies schlägt sich sowohl in der Komplexität der zu lösenden Aufgaben als auch im hierzu nötigenden Zeitaufwand nieder.

Voraussetzung für die Verringerung des administrativen Aufwandes durch nachnutzbare Konfigurationen und Automatisierung ist zunächst die Systematisierung der Management–Aktivitäten in Zusammenhang mit Cluster–Systemen. Diese umfassen:

- *Systemverwaltung.* Der Administrator benötigt Methoden und Werkzeuge zur weitgehend automatischen Inbetriebnahme, Konfiguration und Wartung von Knoten.

- *Software–Konfigurationsmanagement.* Auf Knoten von Cluster–Systemen wird im Gegensatz zu verschiedenen Parallelrechnern in der Regel eine vollwertige Softwareumgebung bereitgestellt. Hier sind Werkzeuge erforderlich, die die Organisation und Wartung von nahezu identischen Softwareumgebungen auf allen Knoten effizient ermöglichen.

- *Nutzerverwaltung.* Notwendig ist die Zuweisung von Resourcen wie Prozessorzeit, Partition und Hauptspeicher an Anwender oder von ihnen gestartete parallele oder sequentielle Programme. Die Lastverteilung muß berücksichtigen, daß sich die Lastanforderungen paralleler Anwendungen zur Laufzeit dynamisch ändern können.

Dabei sollten folgende Teilaufgaben gelöst werden:

1. Analyse der beim Betrieb des Clusters anfallenden Aufgaben mit dem Ziel der Formalisierung des Aufgabenspektrums. Das Ergebnis wird anschließend hinsichtlich von Kriterien wie Häufigkeit des Auftretens, Arbeitsaufwand, Automatisierbarkeit usw. klassifiziert.

2. Analyse bereits verfügbarer Managementlösungen und Konzepte und Beurteilung von deren Einsetzbarkeit für das Management von Clustersystemen anhand des erarbeiteten Aufgabenkatalogs.
3. Auswahl eines Ansatzes und Erstellung eines Managementkonzeptes unter Nutzung der Ergebnisse aus (1) und (2).
4. Prototypische Realisierung der Managementlösung und deren Bewertung anhand des am Lehrstuhl vorhandenen und im Rahmen des SFB genutzten Clustersystems.

Wie Eingangs beschrieben, konnten diese Aufgaben nicht wie geplant in dem Maße durchgeführt werden.

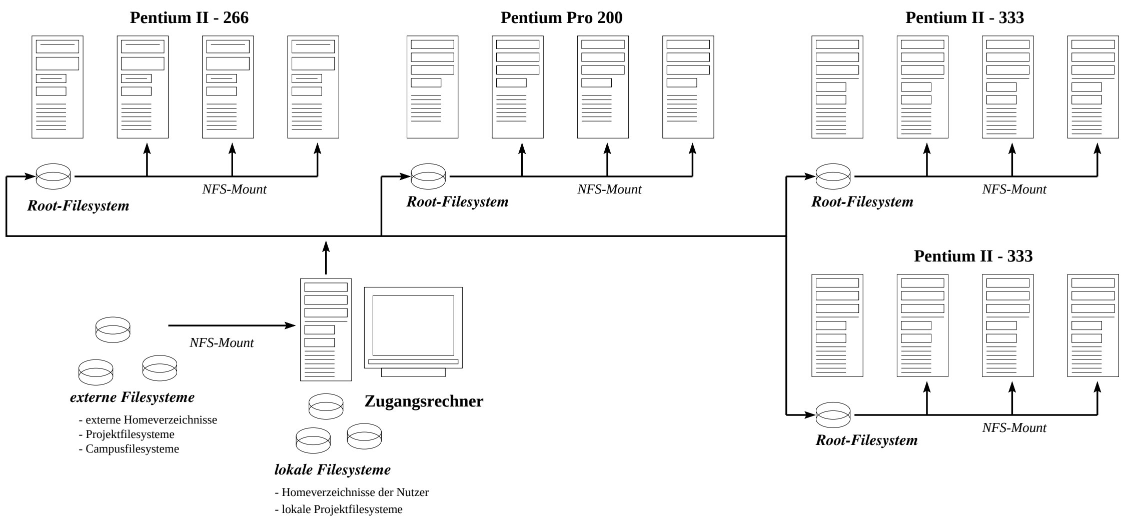
2.4 Ergebnisse

2.4.1 Cluster Infrastrukturen

Um das Management von mittelgroßen Clustern (um die 16 Knoten) zu erleichtern, wurde ein sog. *Submaster*–Konzept eingeführt und erprobt [DRM99]. Die Motivation für dieses Konzepte war dabei zum einen die Reduzierung des Wartungsaufwandes eines Clusters und zum anderen die Erhöhung der Zuverlässigkeit durch Reduzierung von Festplatten, welche sich oft als Schwachpunkt erweisen (mechanische Bauelemente, hohe Beanspruchung, ...).

Abbildung 2.1 zeigt die prinzipielle Cluster–Infrastruktur, wie sie Anfang 1999 in der Ausbaustufe "OSCAR–IV"realisiert wurde.

Abbildung 2.1: Infrastruktur des OSCAR–IV Clusters



Das Submaster–Konzept stellt sich hierbei dadurch dar, dass lediglich ein kleiner Teil der Rechenknoten mit Festplattem ausgerüstet ist (hier jeder vierte). Konkret bedeutet das in diesem Fall, dass sich mehrere Rechner eine Festplatte teilen. D.h.

das Root–Filesystem von mehreren Rechenknoten befindet sich physisch auf einem der Rechenknoten.

Bis dahin existierende Lösungen sahen entweder für keinen der Rechner oder für alle Knoten eine Festplatte vor. Vor– und Nachteile dieser Lösungen liegen dabei auf der Hand.

Während ein vollkommen plattenloser Cluster, bei dem alle Rechenknoten ihr Root–Filesystem von einem einzigen Rechner (in der Regel dem Zugangsrechner) beziehen, den Installations– und Wartungsaufwand auf ein Minimum reduziert, konzentriert sich die NFS Last (Netzwerk Filesystem) auf einen Rechner, wodurch sich die Skalierbarkeit des Systems stark verschlechtert.

Im Gegensatz dazu ist die Skalierbarkeit bzgl. dieses Problems sehr gut, wenn alle Rechenknoten ihre eigene Festplatte besitzen. Jedoch steigt damit auch der Administrationsaufwand und die Ausfallwahrscheinlichkeit des Clusters an.

Das Submaster–Konzept sollte dabei eine Zwischenlösung darstellen, welche einen Kompromiss aus beiden konventionellen Lösungen darstellt.

In der Praxis hat sich dieser Kompromiss zumindest bei dem Forschunscluster "OSCAR" bewährt.

Im Jahr 2000 wurde der Forschungscluster wie geplant im Rahmen des SFB 393 erweitert. Dabei wurden 7 auf Alpha–Prozessoren basierende Knoten hinzugefügt. Diese Knoten wurden in der Art in den Cluster engebettet, dass sie ihr Root–Filesystem direkt vom Zugangsrechner beziehen.

Für die Zukunft ist hier angedacht, alle Rechenknoten des Clusters ohne Festplatten zu betreiben, jedoch eine bestimmte Anzahl dedizierter Root–Filesystem–Server einzuführen, deren einzige Aufgabe die Bereitstellung von Root–Filesystemen für eine bestimmte Anzahl von Rechenknoten ist.

2.4.2 Cluster Management durch Nutzer

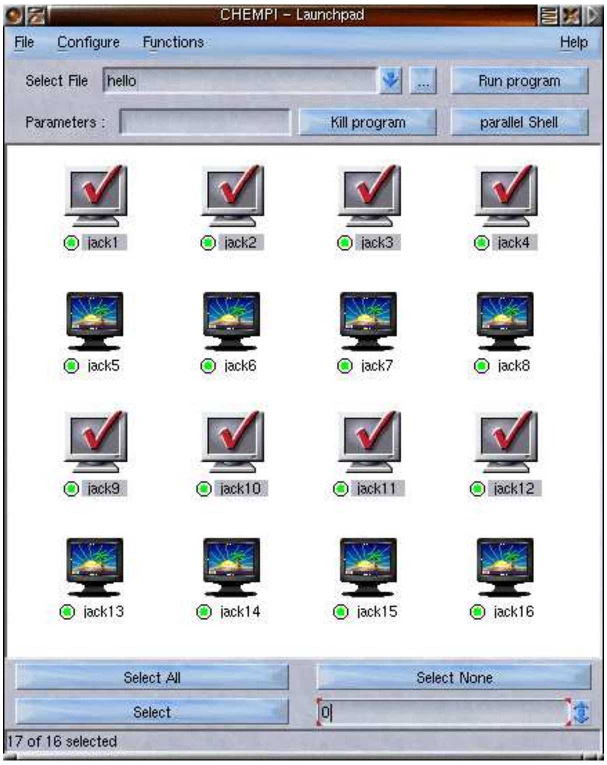
In engem Zusammenhang mit Teilprojekt B6 wurde mit der Entwicklung eines grafischen FrontEnds zum Starten von verteilten Message–Passing Applikationen auf einem Cluster begonnen [DUE00]. Dieses Tool wurde *CHEMPI LaunchPad* genannt, ist jedoch auch für andere MPI Implementationen (insbesondere MPICH) einsetzbar.

Abbildung 2.2 zeigt beispielhaft das Hauptfenster dieses Tools.

Hauptziel dieser Entwicklung war es zunächst, dem Anwender ein Tool zu geben, mit dem er intuitiv verschiedene Rechner eines Clusters für seine verteilte Anwendung auswählen kann, ohne dabei manuell diverse Konfigurationsdateien editieren zu müssen.

Dieses grafische FrontEnd ist jedoch momentan noch nicht für große Clustersysteme geeignet.

Abbildung 2.2: Screenshot des CHEMPI LaunchPads



Literaturverzeichnis

Begutachete Literatur

[DRM99] Carsten Dinkelmann, Wolfgang Rehm und Marko Meyer: *Eine Konfigurations- und Managementlösung für ein dediziertes Linux-Cluster*, 2.Workshop Cluster Computing, 25./26. März 1999, Universität Karlsruhe. Chemnitzer Informatik-Berichte CSR-99-02 (157 S.). ISSN 0947-5125

Sonstige Arbeiten (Diplomarbeiten, Technical Reports etc.)

[DUE00] Jörg Dümmler: *Entwicklung eines grafischen Front-Ends für CHEMPI*, Studienarbeit, Technische Universität Chemnitz, Fakultät für Informatik, August 2000

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Das Management von Clustern ist und bleibt ohne Frage ein wichtiger Aspekt. Dies betrifft beide Arten das Managements, wie sie auch hier besprochen wurden:

1. Wie lässt sich ein Cluster aus Sicht des Administrators verwalten?
   D.h. wie wird NFS–Last verteilt, wie wird Software verwaltet etc.

2. Wie benutzt ein Anwender den Cluster?
   D.h. wie und auf welchen Knoten startet er seine Applikation, inwiefern sieht

er den Cluster als “Single System Image”

Dies sind interessante Fragestellungen, welche für eine Verbesserung von Cluster–Systemen nach wie vor von Bedeutung sind.

In der Zukunft sollen diese Dinge jedoch nicht vordergründiges Forschungsthema der Arbeitsgruppe des Antragstellers sein. Nichtsdestotrotz sollen diese Fragestellungen nicht ganz vernachlässigt werden, da sie essentiell zum Betrieb eines Clusters sind — Auch, wenn es sich dabei um einen Forschungscluster handelt.

2.6 Cluster–Konferenzen

Obwohl dies nicht in unmittelbarem Zusammenhang mit dem konkreten Forschungsinhalt von Teilprojekt B7 steht, soll hier kurz auf die vom Antragsteller im Antragszeitraum durchgeführten Workshops bzw. Konferenzen eingegangen werden.

2.6.1 2. Workshop Cluster–Computing

Die im November 1997 vom Antragsteller initiierte deutschlandweite Workshop Serie *Cluster–Computing* wurde im März 1999 erfolgreich mit dem 2. Workshop Cluster–Computing als wichtigstes Austauschsforum auf diesem Arbeitsgebiet innerhalb Deutschlands weitergeführt [CC99, RUCC99, RUCC99+]. Der Workshop wurde dabei in Zusammenarbeit mit der Universität Karlsruhe organisiert, welche gleichzeitig als Tagungsort diente.

2.6.2 CLUSTER2000 — IEEE International Conference on Cluster Computing

Im November/Dezember 2000 konnte die Bedeutung der Technischen Universität Chemnitz auf dem Gebiet des Cluster Computing noch weiter hervorgehoben werden, in dem eine neue Konferenz von internationalem Rang — die *IEEE International Conference on Cluster Computing* organisiert und auch veranstaltet wurde [CC2000, BR2000].

Mit über 160 Teilnehmern aus 22 Ländern und 62 wissenschaftlichen Beiträgen war die CLUSTER2000 dabei eine der wichtigsten internationalen Konferenzen in diesem Themenbereich.

Literaturverzeichnis

[BR2000] Mark Baker* und Wolfgang Rehm**: *Proceedings of the CLUSTER2000 — IEEE International Conference on Cluster Computing*, 28.Nov.–1.Dez. 2000, Chemnitz, ISBN 0-7695-0896-0
Publication chair, **Co-Editor (General chair)

[CC2000] Homepage der *CLUSTER2000 — IEEE International Conference on Cluster Computing*:
`http://www.tu-chemnitz.de/cluster2000`

[CC99] Homepage des *2. Workshop Cluster–Computing*:
`http://www.tu-chemnitz.de/informatik/RA/CC99/`

[RUCC99] Wolfgang Rehm und Theo Ungerer (Ed.): *Tagungsband zum 2. Workshop Cluster–Computing*, 25./26. März 1999, Universität Karlsruhe. Chemnitzer Informatik-Berichte CSR-99-02 (157 S.). ISSN 0947-5125

[RUCC99+] Wolfgang Rehm und Theo Ungerer (Ed.): *Ausgewählte Beiträge zum 2. Workshop Cluster–Computing*, 25./26. März 1999, Universität Karlsruhe. Preprint-Reihe SFB 393/97-22 (117 S.).

Projektbereich

C

Teilprojekt C1

2.1 Teilprojekt C1

Lokalisierung elektronischer Zustände in amorphen Materialien

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Michael Schreiber

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

2.1.2 Projektbearbeiter

Dipl.-Phys. Philipp Cain
Dr. Frank Milde
M.Sc. Macleans L. Ndawana
PD Dr. Rudolf A. Römer
F.M. Ville Uski (C6)
M.Sc. Cristine Villagonzalo

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Die computergestützte Untersuchung des durch Unordnung induzierten Metall-Isolator-Übergangs (MIÜ) in ungeordneten und amorphen Materialien ist der Gegenstand dieses Teilprojekts. Dabei wird das Auftreten des Übergangs und das kritische Verhalten in seiner Nähe durch höchstpräzise numerische Methoden beschrieben und charakterisiert. Folgende physikalische Fragestellungen wurden untersucht: Gibt es schon bei geringfügiger Veränderung der Modelle Abweichungen vom universellen Verhalten für ungeordnete Systeme? Welche Änderungen der universellen Vorhersagen der Theorie der Zufallsmatrizen ergeben sich, wenn man sich dem MIÜ nähert? Wie wirkt sich Vielteilchenwechselwirkung auf die Lokalisierungseigenschaften in ungeordneten Systemen aus? Wie lassen sich im Anderson-Modell thermische Transportgrößen numerisch berechnen?

Die numerische Beschreibung der Elektronenzustände erfolgt über die Bestimmung der Lokalisierungslängen und des kritischen Exponenten durch die Transfer-Matrix-Methode (TMM) und Finite-Size-Scaling, über Untersuchungen zum multifraktalen und statistischen Verhalten von Wellenfunktionen sowie durch Analyse von Energieniveaustatistiken (ENS), wofür die Eigenwerte und Eigenzustände mit dem Lanczos-Algorithmus in der Cullum-Willoughby-Implementation (CWI) bestimmt werden. Der Einfluss von Wechselwirkung wird mit Hilfe exakter Diagonalisierung, einer speziellen Dezimationsmethode und der Dichtematrix-Renormierungsgruppen-Methode behandelt. Vollständig neue Herangehensweisen — basierend auf der linearen Antwort-Theorie — wurden für die Fragen bzgl. des thermischen Transports entwickelt.

Eine große Zahl dieser Untersuchungen beruht auf dem Anderson-Modell der Lokalisierung [1], in dem sich unkorrelierte Elektronen auf einem regelmäßigen Gitter bewegen, aber potentialenergetischer Unordnung, d.h. zufällig gewählten potentiellen Energien $\epsilon_i \in [-W/2, +W/2]$ an den Gitterplätzen i, ausgesetzt sind. Der Hamiltonoperator ist [1]

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} t_{ij} |i\rangle\langle j| \quad , \tag{2.1}$$

wobei die Transferintegrale t_{ij} das „Hüpfen" der Elektronen von i nach j beschreiben und zumeist auf nächste Nachbarplätze beschränkt sind.

Die im Teilprojekt gestellten Fragen verlangen ganz allgemein ein hohes Maß an Rechenleistung und Speicherkapazität, um die notwendige Genauigkeit und Verlässlichkeit der Forschungsarbeiten zu garantieren. Die im Antragszeitraum 1996-1998 entwickelten parallelen Algorithmen der TMM und der CWI [2] wurden deshalb im aktuellen Berichtszeitraum intensiv für Produktionsläufe genutzt. Ein sehr wichtiger Teil des Projekts ist auch die Anpassung dieser und der neu hinzugekommenen Algorithmen an die jetzt vorhandene Rechnerarchitektur im SFB 393. Sehr einflussreich und hilfreich war dabei der intensive und rege Kontakt mit den Teilprojekten A3 (Jung/Meyer) und A4 (Mehrmann). Mit den Teilprojekten A7 (Schneider), C2 (Vojta), und C6 (Schreiber/Mehlig) bestand aufgrund gemeinsamer methodischer und physikalischer Fragestellungen ebenso wie auf der numerischen Seite eine rege Zusammenarbeit.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

2.3.1 Teilaufgabe „Test und Entwicklung von Algorithmen"

Der Hamiltonoperator (2.1) des Anderson-Modells der Lokalisierung lässt sich durch den Lanczos-Algorithmus in der CWI [3] sehr effektiv diagonalisieren. Zur Parallelisierung bieten sich insbesondere die Matrix-Vektor-Multiplikation bei der Lanczos-Iteration und die Bisektionsroutinen der erzeugten Tridiagonalmatrix an und darauf beruhte die gewählte Grundstrategie für die Weiterentwicklung der parallelisierten CWI. Desweiteren stellte sich die Frage, ob der Lanczos-Algorithmus für das Anderson-Modell die effektivste Methode unter Verwendung massiv paralleler Rechner darstellt, oder ob es andere, besser parallelisierbare Algorithmen — basierend z.B. auf Konvergenzbeschleunigern, iterativen Gleichungssystemlösern [4], Präkonditionierern [5] — gibt. Insbesondere der Test von Mehrgitterverfahren [4] war ein Hauptschwerpunkt dieser Teilaufgabe. Für die TMM sollte die parallele Version weiterentwickelt und der neuen Rechnerarchitektur angepasst werden, um für die benötigten Größen der quasi-eindimensionalen (1D) Streifen und Balken eine entsprechende Genauigkeit erzielen zu können. Dabei sollte der verwendete

Algorithmus für den im SFB verfügbaren Dual-PC-Cluster “Roulette“ mit verteiltem Speicher durch MPI parallelisiert werden. Auch musste getestet werden, ob die geteilte Nutzung des Speichers für beide Prozessoren auf einem PC-Knoten evt. zu einer Leistungssteigerung genutzt werden kann.

2.3.2 Teilaufgabe „Lokalisierung bei Anisotropie und topologischer Unordnung”

Im Anderson-Modell (2.1) wird üblicherweise den Transferintegralen t_{ij} ein konstanter Wert zugewiesen [6]. Das Abweichen vom kristallinen, perfekt geordneten System wird demnach nur durch die zufällige Wahl der potentiellen Energien an den Gitterplätzen repräsentiert. Im Rahmen dieser Teilaufgabe wollten wir untersuchen, inwieweit sich die Lokalisierungseigenschaften ändern, wenn wir weitere, physikalisch mindestens genauso relevante Arten von Unordnung oder Störungen der t_{ij} im System berücksichtigen. Aufbauend auf den Resultaten und Erkenntnissen aus den Teilaufgaben C1.1 und C1.2 im ersten Förderungszeitraum [2] betrachten wir den Einfluss von (i) anisotroper, und (ii) zufälliger Wahl der t_{ij} auf periodischen Gittern, sowie (iii) konstantem t_{ij} auf räumlich nicht periodischen Gittern.

Für den Fall einer Anisotropie der t_{ij} [7] behandeln wir schwach gekoppelte Ebenen ($t_x = t_y = 1, t_z < 1$) und schwach gekoppelte Ketten ($t_x = t_y < 1, t_z = 1$). Dies ist von experimenteller Relevanz, da eine Reihe von Messungen zum kritischen Verhalten uniaxiale Druckveränderungen — also anisotrope Änderungen der Überlappintegrale t_{ij} — nutzen [8]. Zur Bestimmung der kritischen Eigenschaften am MIÜ verwenden wir neben dem parallelen TMM-Algorithmus [9] zur Berechnung der Lokalisierungslänge die parallelisierte CWI-Version des Lanczos-Algorithmus [3] zur Eigenwertberechnung. Durch die ENS haben wir damit eine weitere Methode, um die Resultate der TMM zu überprüfen. Für die Skalenanalyse nutzen wir eine nichtlineare Fitprozedur [10], die es ermöglicht, systematische Abweichungen zu berücksichtigen, die infolge der betrachteten endlichen Systemgrößen entstehen.

Das Anderson-Modell mit zufälligem Hüpfen [11] modelliert sehr gut die unterschiedlichen Werte der Überlappintegrale aufgrund variabler Atomabstände in amorphen Substanzen [12]. In Abwandlung von (2.1) werden jetzt die $t_{ij} \in [c-w/2, c+w/2]$ zufällig gewählt. Im 2D Modell ohne Potentialunordnung ist die Lokalisierungslänge im thermodynamischen Limes wesentlich größer als im Fall reiner Potentialunordnung und es wurde ein kritischer Zustand in der Bandmitte gefunden, der bereits bei geringer zusätzlicher Potentialunordnung lokalisierte [2]. Ein MIÜ existiert demnach nicht. Wir betrachteten nun die 3D Variante des Modells und benutzten die TMM zur Bestimmung der kritischen Eigenschaften des MIÜ. Desweiteren war mittels eines Focker-Planck-Ansatzes analytisch gezeigt worden [13], dass das funktionelle Verhalten der Divergenz der Zustandsdichte in 2D davon abhängt, ob die betrachtete Systemgröße gerade oder ungerade, d.h. das entsprechende Gitter bipartit bzw. nicht bipartit, ist. Wir untersuchten deshalb auch den Einfluß der Bipartitheit des Gitters auf die Divergenz der Lokalisierungslänge in der Nähe der Bandmitte.

Eine weitere Aufgabenstellung im Berichtszeitraum war die Beschreibung der Lokalisierungseigenschaften auf topologisch ungeordneten Gittern. Mit Hilfe der ENS und der Multifraktalanalyse wurden dabei zahlreiche Fragestellungen in Erweiterung der in [2] vorgelegten Arbeiten behandelt. Insbesondere untersuchten wir, ob das Energiespektrum universelle Eigenschaften hat.

2.3.3 Teilaufgabe „Einfluß von Wechselwirkung auf lokalisierte Zustände"

Konträr zu den Aussagen der Skalentheorie [14] für nicht-wechselwirkende 2D Systeme zeigen neuere Resultate experimentell einen MIÜ selbst bei Magnetfeld $B = 0$ für 2D Elektronensysteme mit hoher Ladungsträgerbeweglichkeit [15]. Eine einfache Abschätzung der relevanten Energieskalen ergibt, dass die charakteristische Coulombenergie wesentlich größer ist als die Fermienergie. Deshalb geht man davon aus, daß der beobachtete MIÜ durch die Coulomb-Wechselwirkung induziert wird [15].

Aufbauend auf Arbeiten von Dorokhov [16] hat Shepelyansky [17] gezeigt, daß eine lokale Wechselwirkung U von zwei mit Lokalisierungslänge λ_1 lokalisierten Teilchen in 1D zu Zuständen mit stark erhöhter Zwei-Teilchen-Lokalisierungslänge $\lambda_2 \sim (U/t)^2\lambda_1^2$ führt. Die analytischen Argumente Shepelyansky's benutzen Vereinfachungen wie z.B. Vernachlässigungen der Phasenbeziehungen und sind deshalb von vielen Gruppen numerisch untersucht worden [18]. Diese Arbeiten konnten die qualitative Tendenz zur Delokalisierung durch Wechselwirkung bestätigen, ergaben aber untereinander abweichende Resultate bezüglich der experimentell relevanten Stärke der Delokalisierung. Im Rahmen dieser Teilaufgabe wurden deshalb hochpräzise Rechnungen zur Klärung der gefundenen Diskrepanzen durchgeführt.

Der von Shepelyansky vorhergesagte Effekt ist natürlich in Hinblick auf die obengenannten experimentellen Befunde eines MIÜ in 2D sehr suggestiv. Jedoch ist eine numerische Überprüfung in 2D sehr schwierig, da das ungeordnete Zwei-Teilchen-Problem äquivalent zu einem nicht-wechselwirkenden Problem in 4D mit starkkorrelierter Unordnung ist [RLS99b]. Die schon in [2] erwähnten Probleme mit Überschätzungen von λ_2 in endlichen Systemen [19] sind deshalb hier von besonderer Bedeutung und neue numerische Methoden müssen entwickelt werden. Desweiteren ist die naive Extrapolation des Zwei-Teilchen-Problems hin zum experimentall relevanten Fall endlicher Dichte [20] äußert problematisch und muss durch fundierte Untersuchungen unterstützt werden.

Wir haben deshalb mit verschiedenen numerischen Methoden den Einfluß von Hubbard- und langreichweitiger Wechselwirkung für zwei Teilchen und bei endlicher Dichte studiert. Um den Einfluß der Wechselwirkung am MIÜ zu analysieren, haben wir desweiteren ein spezielles Modell benutzt, dass auch in 1D einen MIÜ zeigt.

Das Problem zweier wechselwirkender Teilchen ist für den Fall anziehender Wechselwirkung in der Festkörperphysik natürlich eng mit Exzitonen verbunden. In der ersten Antragsperiode wurde dazu der Einfluss von Unordnung auf die Transporteigenschaften der Exzitonen betrachtet [21]. Hier behandeln wir nun das Problem eines Exzitons auf Nano-Ringen bei endlichem Aharonov-Bohm-Magnetfluss.

Diese Untersuchungen wurden durch neueste experimentelle Arbeiten zu selbstorganisierten InAs/GaAs Nano-Ringen angestoßen [22].

2.3.4 Teilaufgabe „Thermischer Transport in ungeordneten Systemen"

Die Thermokraft S ist ein Beispiel einer Transportgröße, deren Verhalten am Anderson-Übergang und bei endlichen Temperaturen T theoretisch noch nicht gut verstanden ist, obwohl zahlreiche experimentelle Resultate vorliegen. S ist dabei die Proportionalität zwischen Temperaturgradient in einem offenen Stromkreis und dem dadurch induzierten elektrischen Feld, $\vec{E} = S\vec{\nabla}T$. Im Metall gilt $S \propto T$ nach der Sommerfeld'schen Theorie [23]. In theoretischen Arbeiten wird kontrovers diskutiert, wie sich S bei $T \to 0$ in der Nähe des Anderson-MIÜ verhält. Es wurde z.B. vorhergesagt, daß S divergiert [24], während andere Arbeiten zeigten, dass S konstant [26, 27] bleibt. Messungen der Thermokraft, die an dotierten Halbleitern [28] und an amorphen Legierungen [29, 30] durchgeführt wurden, erbrachten Werte, die mindestens eine Größenordnung höher sind als die Vorhersagen der Theorie [26]. Weiterhin haben die Experimente gezeigt, dass die Thermokraft auch positive Werte annehmen kann. Das ist überraschend, da die Thermokraft vom Vorzeichen der Ladung der wärmetransportierenden Teilchen abhängt und demnach in Metallen, mit Elektronen als Ladungsträgern, negativ sein sollte.

Die Temperaturabhängigkeit von S und auch von der Leitfähigkeit σ, der thermischen Leitfähigkeit K, der Lorenzzahl L_0 und der dimensionslosen Gütezahl $ZT = S^2\sigma T/K$ im 3D Anderson-Modell der Lokalisierung kann im Rahmen der linearen Antwort-Theorie nach Chester, Thellung, Kubo und Greenwood [31] beschrieben werden. Die Anwendung der Theorie basiert auf der Annahme eines universellen Gesetzes $\sigma \sim |E - E_c|^\nu$ am MIÜ, sowie der Kenntnis des Temperaturverhaltens des chemischen Potentials $\mu(T)$. Im vorliegenden Falle nicht-wechselwirkender Teilchen ist $\mu(T)$ eindeutig durch die mittlere Teilchenzahl/Zustandsdichte gegeben, kann also für jede Fermienergie E berechnet werden. Damit erhalten wir die Temperaturabhängigkeit von S, K, L_0 und ZT sowohl am als auch in der Nähe des MIÜ.

2.3.5 Teilaufgabe „Statistik von Wahrscheinlichkeitsamplituden in ungeordneten Systemen im Magnetfeld"

Die Fluktuationen der Wellenfunktionen im metallischen Bereich des Anderson-Modells sind approximativ durch die Porter-Thomas-Verteilung gegeben [32]. Diese Verteilung folgt aus der Annahme, dass die Quantenlokalisierung, die mit verstärkter Unordnung W schließlich zum MIÜ führt, vernachlässigbar ist. Weil diese Annahme nur im Limes $W \to 0$ gilt, gibt es für endliche W immer kleine Abweichungen von der Porter-Thomas-Verteilung auch im metallischen Bereich [33]. Zusätzlich gibt es sogenannte anomal lokalisierte Zustände [34, 35], die sich stark von den typischen ausgedehnten Wellenfunktionen unterscheiden und große relative Abweichungen in den Ausläufern der Verteilungsfunktionen verursachen [36, 37]. Wir haben dieses statistische Verhalten numerisch im Anderson-Modell untersucht.

Das Ziel ist, die mikroskopische Elektronbewegung in ungeordneten Metallen besser zu verstehen. Das ist möglich durch Vergleich der numerischen Daten mit den analytischen Vorhersagen, die insbesondere auf dem nichtlinearen Sigma-Modell basieren [38, 39]. Das Sigma-Modell beschreibt den semiklassischen Elektrontransport, wo die Elektronen sich *lokal* diffusiv bewegen, aber der Quantenlokalisierung unterliegen.

Ein sehr interessanter Fall von Transport und Lokalisierung in ungeordneten Systemen ist das Quanten-Hall-Szenario [40]. Hier behandelten wir die Statistik von Transmissionsamplituden am Übergang mit Hilfe eines Renormierungsgruppenansatzes [41] für das Chalker-Coddington-Netzwerkmodell [42]. Die Motivation unserer Untersuchung basiert auf neueren experimentellen Arbeiten [43], in denen ein Abweichen vom erwarteten Skalenverhalten [44] gefunden wurde. Wir betrachten dabei die Möglichkeit, dass dieses Abweichen durch makroskopische Inhomogenitäten innerhalb der Quanten-Hall-Probe hervorgerufen wird.

Literaturverzeichnis

[1] P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).

[2] Arbeitsbericht zum Teilprojekt C1 des SFB 393, Förderungszeitraum 1996–1998.

[3] J. Cullum, R. A. Willoughby, *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations, Volume 1 & Volume 2*, Birkhäuser, Boston (1985).

[4] Y. Saad, *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems: Theory and Algorithms*, Wiley, New York, 1992; G. H. Golub, C. F. v. Loan, *Matrix Computations*, Johns Hopkins University Press, Baltimore and London, 3rd ed., 1996.

[5] R. Barrett, M. Berry, T. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, H. van der Vorst, *Templates for the solution of linear systems*, SIAM Publications, Philadelphia, 1994.

[6] B. Kramer, A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993).

[7] Q. Li, C. Soukoulis, E. N. Economou, G. Grest, Phys. Rev. B **40**, 2825 (1989); I. Zambetaki, Q. Li, E. N. Economou, C. Soukoulis, Phys. Rev. Lett. **76**, 3614 (1996); N. Panagiotides, S. Evangelou, Phys. Rev. B **49**, 14122 (1994).

[8] S. Waffenschmidt, C. Pfleiderer, H. v. Löhneysen, Phys. Rev. Lett. **83**, 3005 (1999), ArXiv: cond-mat/9905297.

[9] A. MacKinnon, B. Kramer, Phys. Rev. Lett. **47**, 1546 (1981).

[10] K. Slevin, T. Othsuki, Phys. Rev. Lett., **82**, 382 (1999).

[11] C. Soukoulis, I. Webman, G. S. Grest, E. N. Economou, Phys. Rev. B **26**, 1838 (1982); T. A. L. Ziman, Phys. Rev. B **26**, 7066 (1982); M. Inui, S. A. Trugman, E. Abrahams, Phys. Rev. B **49**, 3190 (1994).

[12] P. Häussler, Phys. Rep. **222**, 65 (1992).

[13] P. W. Brouwer, C. Mudry, A. Furusaki, Phys. Rev. Lett. **84**, 2913 (2000); Nucl. Phys. B **565**, 653 (2000).

[14] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).

[15] S. V. Kravchenko *et al.*, Phys. Rev. Lett. **77**, 4938 (1996).

[16] O. N. Dorokhov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **98**, 646 (1990), [Sov. Phys. JETP **71**, 360 (1990)].

[17] D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **73**, 2607 (1994); D. L. Shepelyansky, in *Correlated fermions and transport in mesoscopic systems*, edited by T. Martin, G. Montambaux, J. T. T. Vân (Editions Frontieres, Proc. XXXI Moriond Workshop, Gif-sur-Yvette, 1996), S. 201.

[18] P. H. Song, F. v. Oppen, Phys. Rev. B **59**, 46 (1999); D. Weinmann, J.-L. Pichard, Phys. Rev. Lett. **77**, 1556 (1996); P. H. Song, D. Kim, Phys. Rev. B **56**, 12217 (1997); E. Akkermans, J.-L. Pichard, Eur. Phys. J. B **1**, 223 (1997); D. Brinkmann *et al.*, Eur. Phys. J. B **10**, 145 (1998); O. Halfpap, T. Kawarabayashi, B. Kramer, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 483 (1998); X. Waintal, J.-L. Pichard, Eur. Phys. J. B **6**, 117 (1998); X. Waintal, D. Weinmann, J.-L. Pichard, Eur. Phys. J. B **7**, 451 (1999); O. Halfpap, B. Kramer, Ann. Phys. (Leipzig) **8**, 85 (1999); K. Frahm, Eur. Phys. J. B **10**, 371 (1999).

[19] K. Frahm, A. Müller-Groeling, J. L. Pichard, D. Weinmann, Europhys. Lett. **31**, 169 (1995); R. A. Römer, M. Schreiber, Phys. Rev. Lett. **78**, 515 (1997).

[20] P. Schmitteckert, R. Jalabert, D. Weinmann, J.-L. Pichard, Phys. Rev. Lett. **81**, 2308 (1998); T. Giamarchi, B. S. Shastry, Phys. Rev. B **51**, 10915 (1995); C. L. Kane, M. P. A. Fisher, Phys. Rev. Lett. **68**, 1220 (1992); R. Shankar, Int. J. Mod. Phys. B **4**, 2371 (1990).

[21] M. Leadbeater, R. A. Römer, M. Schreiber, in *Excitonic Processes in Condensed Matter*, R. T. Williams, W. M. Yen, Hrsg., S. 349–354, The Electrochemical Society, Pennington, NJ (1998)

[22] R. J. Warburton *et al.*, Nature **405**, 926 (2000).

[23] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics, Saunders College, New York (1976).

[24] C. Castellani, C. Di Castro, M. Gilli, G. Strinati, Phys. Rev. B **37**, 6663 (1988).

[25] D. Belitz, T. R. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys. **66**, 261 (1994).

[26] J. E. Enderby, A. C. Barnes, Phys. Rev. B **49**, 5062 (1994).

[27] U. Sivan, Y. Imry, Phys. Rev. B **33**, 551 (1986).

[28] M. Lakner, H. v. Löhneysen, Phys. Rev. Lett. **70**, 3475 (1993).

[29] C. Lauinger, F. Baumann, J. Phys. Condens. Matter **7**, 1305 (1995).

[30] G. Sherwood, M. A. Howson, G. J. Morgan, J. Phys. Condens. Matter **3**, 9395 (1991).

[31] G.V. Chester, A. Thellung, Proc. Phys. Soc. **77**, 1005 (1961); R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan, **12**, 570 (1957); D. A. Greenwood, Proc. Phys. Soc., **71**, 585 (1958).

[32] C. E. Porter, R. G. Thomas, Phys. Rev. **104**, 483 (1956); T. A. Brody *et al.*, Rev. Mod. Phys. **53**, 385 (1981).

[33] Y. V. Fyodorov, A. D. Mirlin, Phys. Rev. B **51**, 13403 (1995).

[34] A. D. Mirlin, J. Math. Phys. **38**, 1888 (1997).

[35] B. Muzykanstkii, D. E. Khmelnitskii, Phys. Rev. B **51**, 5480 (1995).

[36] V. I. Fal'ko, K. B. Efetov, Phys. Rev. B **50**, 11267 (1994).

[37] I. E. Smolyarenko, B. L. Altshuler, Phys. Rev. B **55**, 10451 (1997).

[38] K. B. Efetov, Adv. Phys. **32**, 53 (1983).

[39] A. D. Mirlin, Phys. Rep. **326**, 259 (2000).

[40] T. Chakraborty, P. Pietiläinen, *The Quantum Hall effects* (Springer, Berlin, 1995).

[41] A. G. Galstyan, M. E. Raikh, Phys. Rev. B **56**, 1422 (1997).

[42] J. T. Chalker, P. D. Coddington, J. Phys. C **21**, 2665 (1988).

[43] D. Shahar, M. Hilke, C. C. Li, D. C. Tsui, S. L. Sondhi, M. Razeghi, Solid State Commun. **107**, 19 (1998); N. Q. Balaban, U. Meirav, I. Bar-Jospeh, Phys. Rev. Lett. **81**, 4967 (1998).

[44] B. Huckestein, Rev. Mod. Phys. **67**, 357 (1995).
[45] A. MacKinnon, J. Phys. C **13**, L1031 (1980); Z. Phys. B **53**, 1 (1983).
[46] S. Waffenschmidt, C. Pfleiderer, H. v. Löhneysen, Phys. Rev. Lett. **83**, 3005 (1999).
[47] F. Wegner, Z. Phys. B **25**, 327 (1976).
[48] G. Wiedemann, R. Franz, Ann. Phys. (Leipzig) **89**, 497 (1853); (Pogg. Ann. Bd. **89**, 497 (1853)).
[49] G. Haase, T. Hommel, A. Meyer, M. Pester, *Bibliotheken zur Entwicklung paralleler Algorithmen*, SPC 95-20, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, (1995).

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe „Test und Entwicklung paralleler Algorithmen"

Mitarbeiter: Cain, Milde, Ndawana, Römer, Schreiber, Elsner (A4), Jung (A3), Mehrmann (A4)
Stichworte: Lanczos, TMM, Parallelisierung, Mehrgitterverfahren

Wir hatten in enger Zusammenarbeit mit V. Mehrmann (A4) in einer Vergleichsstudie verschiedenste moderne Eigenproblemlöser mit der 1985er CWI des Lanczos-Algorithmus im Hinblick auf ihre Anwendbarkeit für das Anderson-Modell getestet [EMMRS99]. Zielstellung des Vergleichs war es, eine Methode zu finden, die in der Rechenzeit wesentlich schneller sein sollte als die CWI, jedoch nicht mehr oder nur wenig mehr Speicherplatz verbrauchen durfte. Wir fanden aber keine Methode, die diese Bedingungen erfüllt. Wir haben deshalb die CWI mit den uns vorliegenden Bibliotheken paralleler Routinen für den GCC 128 [49] und die mittlerweile im Rahmen des SFB und im Rechenzentrum der TU Chemnitz vorhandene Rechnerarchitektur parallelisiert. Dabei wurde besonderes Augenmerk auf die Skalierbarkeit des resultierenden Programmes gelegt. Die entstandenen Routinen eignen sich gut für die Diagonalisierung großer Anderson-Systeme und so konnten wir z.B. die Wellenfunktionen für die größten je berechneten Systeme mit 1367631 Gitterplätzen (siehe Abb. 2.1) für eine Multifraktalanalyse zur Charakterisierung des MIÜ nutzen [M00]. Die schon im Antragszeitraum 1996–1998 [2] entwickelte parallele Version der TMM wurde der neuen Rechnerarchitektur angepasst und für die Produktionsläufe in Kapitel 2.4.2 verwendet [R99, SMREM99].

Während der Projektlaufzeit haben wir intensive Anstrengungen in Hinblick auf die Entwicklung eines Mehrgitterverfahrens für das Anderson-Modell unternommen. In Zusammenarbeit mit M. Jung und A. Meyer (A3) sowie V. Mehrmann (A4) ergab sich aber, dass keines der üblichen Mehrgitterverfahren zu konsistenten, konvergenten Resultaten führte. Der Einfachheit halber betrachteten wir nicht die Eigenwertproblematik, sondern das Gleichungssystem

$$Ax = b \quad . \tag{2.2}$$

Die Systemmatrix $A \equiv H$ hat die Struktur $A = A_{\mathrm{L}} + D$. Dabei ist A_{L} z.B. in 2D

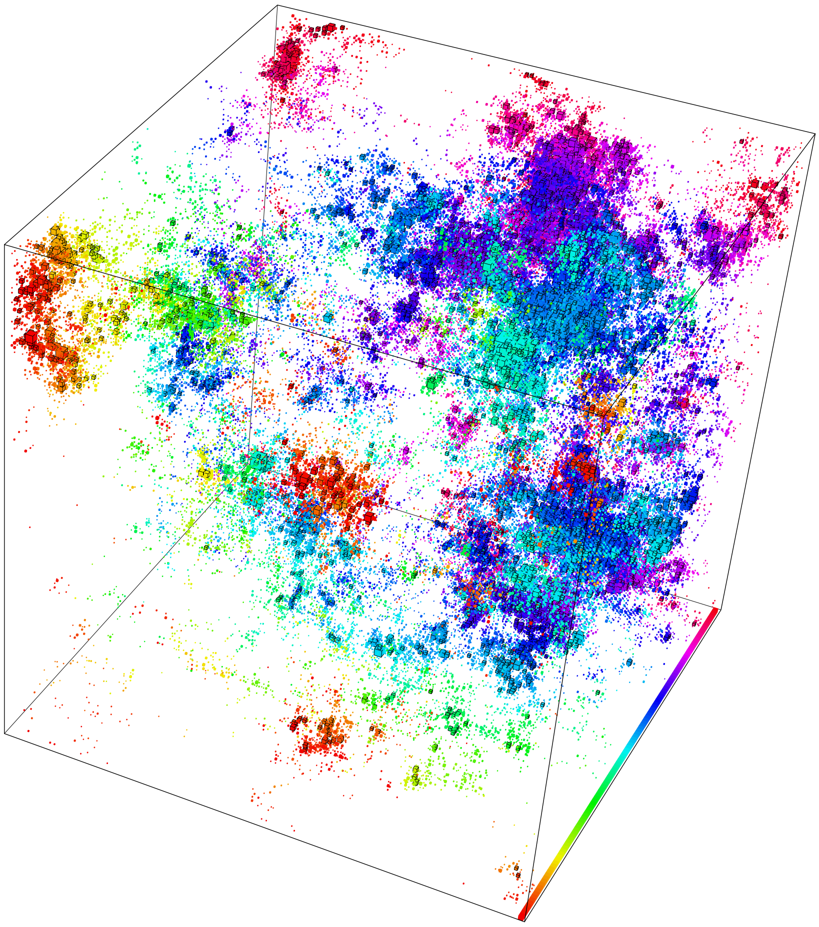


Abbildung 2.1: Räumliche Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\Psi|^2$ eines Teilchens in einem Anderson-Modell mit 111^3 Gitterplätzen bei $E = 0$. Der Wert von $|\Psi(\vec{x})|^2$ am Platz $\vec{x}$ wird durch Würfel verschiedener Größe parametrisiert, wenn $|\Psi(\vec{x})|^2$ über dem Durchschnittswert liegt. Andernfalls bleibt die Stelle leer. Die Grauskala dient der räumlichen Orientierung.

durch den üblichen Fünf-Punkte-Stern

$$\begin{bmatrix} & -1 & \\ -1 & 4 & -1 \\ & -1 & \end{bmatrix}$$

definiert und D ist eine Diagonalmatrix, deren Einträge zufällig verteilte Zahlen aus dem Intervall $[-1, 1]$ sind. Zur Auflösung des Gleichungssystems (2.2) wurde folgende Strategie verfolgt. Anstelle des Gleichungssystems (2.2) wurde das äquivalente Gleichungssystem $A^2x = Ab$ betrachtet. Dieses Gleichungssystem wurde z.B. mittels des vorkonditionierten Verfahrens der konjugierten Gradienten (PCG-Verfahren) mit der a-priori Vorkonditionierungsmatrix A^2 gelöst. In jedem Iterationsschritt des PCG-Verfahrens ist dann ein Gleichungssystem der Gestalt $A^2w = d$

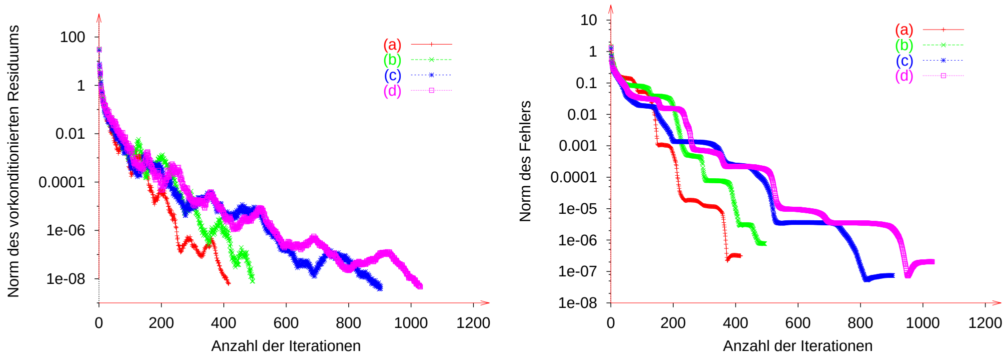


Abbildung 2.2: Euklidische Norm des vorkonditionierten Residuums und des Fehlers $z^{(j)} = x - x^{(j)}$ ($x^{(j)}$ die j-te Iterierte) im Verlaufe des PCG-Verfahrens bei $N = 961$ Unbekannten für (a) $n = 30$ Glättungsschritte und Dämpfungsparameter $\omega_q = 0.4$, (b) $n = 20$, $\omega_q = 0.4$, (c) $n = 10$, $\omega_q = 0.4$, (d) $n = 10$, $\omega_q = 0.5$.

zu behandeln. Dies erfolgte in den beiden Teilschritten $Ay = d$ und $Aw = y$, wobei jedes dieser Gleichungssysteme näherungsweise mittels eines Iterationsschrittes eines Mehrgitter-Verfahrens gelöst wurde. Die Komponenten im Mehrgitter-Verfahren waren:

- V-Zyklus,
- gedämpftes Jacobi-Verfahren als Glätter, wobei dies mit der Matrix A^2 durchgeführt wurde,
- lineare Interpolation I_q^{q+1},
- durch $I_{q+1}^q = (I_q^{q+1})^T$ definierte Restriktion,
- Grobgittermatrizen gemäß des Galerkin-Zugangs $A_q = I_{q+1}^q A_{q+1} I_q^{q+1}$, $q = \ell - 1, \ell - 2, \ldots, 1$, $A_\ell = A$.

In den numerischen Experimenten wurde die Anzahl der Glättungsschritte variiert, und es wurden verschiedene Dämpfungsparameter getestet. Um das Konvergenzverhalten des PCG-Verfahrens gut verfolgen zu können, wurde $b = 0$ gewählt, so dass die exakte Lösung des Gleichungssystems (2.2), der Nullvektor, bekannt ist. Als Startvektor des PCG-Verfahrens diente der Vektor, dessen Komponenten identisch Eins sind. Die Iteration wurde beim Erreichen eines relativen vorkonditionierten Residuums von 10^{-10} abgebrochen. Wie Abb. 2.2 zeigt, ist die Konvergenzgeschwindigkeit des PCG-Verfahrens völlig unbefriedigend. Bei der Lösung von Gleichungssystemen mit einer größeren Anzahl von Unbekannten wurde eine wesentlich langsamere Konvergenz bzw. sogar Divergenz beobachtet. Ein wesentliches offenes Problem bei der Anwendung der Mehrgitter-Verfahren ist die Definition eines geeigneten Glättungsverfahrens. Außerdem ist noch nicht geklärt, ob ein anderer Weg als der Galerkin-Zugang zur Definition der Grobgittermatrizen genutzt werden sollte. Experimente mit anderen Mittelungstechniken und anderen Mehrgitterverfahren führten zu keiner Konvergenzverbesserung.

Unsere Untersuchungen zeigten, dass das Kernproblem auf die schlechten Glättungseigenschaften der gängigen Verfahren zurückzuführen ist. Da aber geeignete Strategien zur Entwicklung eines Glätters für zufällige Systeme nicht existieren, mussten wir die Entwicklung eines Anderson-Mehrgitterverfahrens leider zurückstellen.

2.4.2 Teilaufgabe „Lokalisierung bei Anisotropie und topologischer Unordnung"

Mitarbeiter: Cain, Milde, Römer, Schreiber, Biswas (Calcutta), Eilmes (Kraków)
Stichworte: Hüpfunordnung, Parallelisierung, TMM, Universalität

Im Anderson-Modell der Lokalisierung mit anisotropen Transferintegralen t_{ij} wurden schwach gekoppelte Ebenen und Ketten untersucht. Der MIÜ wurde durch TMM und ENS identifiziert und charakerisiert [D99mrs, M99mrs, M00, MR98, MRSU00, MRS00, O01mrs, R00mrs]. Durch eine Verbesserung der von uns parallelisierten Algorithmen für TMM und CWI konnten wir größere Systeme mit erhöhter Genauigkeit berechnen. Abb. 2.3 zeigt ein Beispiel für die Bestimmung der Lokalisierungslänge und die anschliessende Skalenanalyse. Aufgrund der hohen Rechengenauigkeit war es möglich, eine systemgrößenabhängige systematische Verschiebung des Schnittpunktes der Kurven zu identifizieren. Wir benutzten bei der Skalenanalyse deshalb eine nichtlineare Fitprozedur, die Korrekturen aufgrund dieser im unendlichen System irrelevanten Störungen berücksichtigt. Diese Methode [10] führte im Berichtszeitraum zu einer Korrektur des universellen Wertes des kritischen Exponenten ν, mit dem die Lokalisierungslänge am MIÜ divergiert, von 1.35 auf 1.57, sowie zu einer verlässlicheren Fehlerangabe. Die numerische Verbesserung unserer Skalenanalyse erwies sich auch bei der Auswertung der ENS als hilfreich. Das Ergebnis für die kritische Unordnung W_c ist konsistent mit Resultaten aus unseren früheren Arbeiten, in denen TMM oder Multifraktalanalyse der Wellenfunktion genutzt wurden. Der Wert von W_c verringert sich algebraisch mit steigender Anisotropie ausgehend vom Wert des isotropen Modells. Der kritische Exponent der Lokalisierungslänge λ wurde mit $\nu = 1.45 \pm 0.2$ ermittelt und stimmt mit dem Wert für den isotropen Fall sowie für andere Modelle aus der orthogonalen Universalitätsklasse überein. Die kritische ENS, die unabhängig von der Systemgröße ist, verändert sich mit steigender Anisotropie von ihrer isotropen Gestalt hin zu einer Poisson-Verteilung.

Zur Berechnung von λ im 3D Anderson-Modell mit zufälligem Hüpfen wurde die TMM eingesetzt [B98crs, BCRS00, C98, CRS99, D99crs, H99crs, M99crs, Mu99crs]. Wir konnten zeigen, dass reine Hüpfunordnung mit Transferintegralen $t_{ij} \in [c - w/2, c + w/2]$ nicht ausreicht, um alle Zustände des Systems zu lokalisieren. Wir betrachteten deshalb den MIÜ als Funktion der Energie E sowie der Stärke der Potentialunordnung W. Zur Skalenanalyse unserer Daten verwendeten wir wieder die nichtlineare Fitprozedur, die es ermöglichte, neben den kritischen Werten E_c bzw. W_c auch den kritischen Exponenten sehr genau zu bestimmen. Die erhaltenen Werte für den Exponenten des Übergangs bei Variation der Energie, $\nu_E = 1.61 \pm 0.07$, und den Exponenten des Übergangs bei konstantem E, $\nu_W = 1.54 \pm 0.03$, stimmen innerhalb ihrer Fehler mit Ergebnissen für das

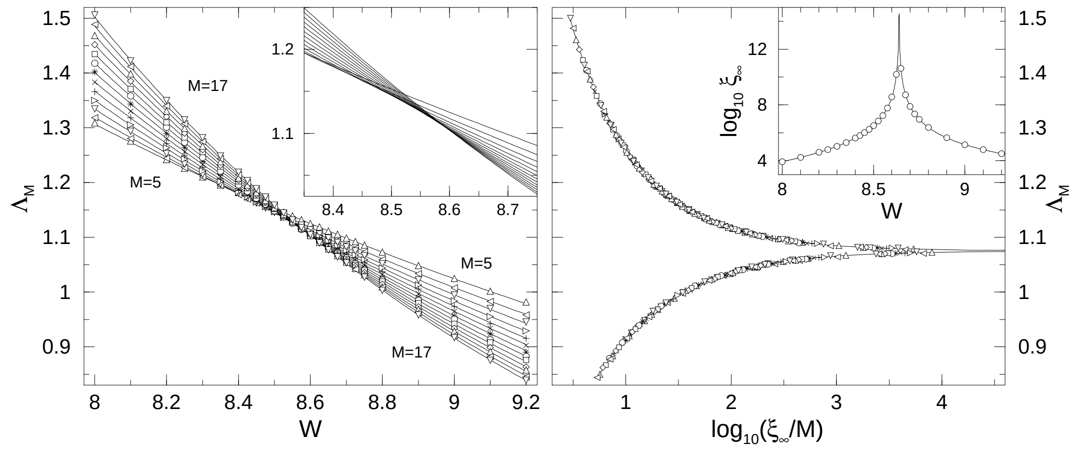


Abbildung 2.3: Skalenanalyse der reduzierten Lokalisierungslänge $\Lambda_M = \lambda/M$ für schwach gekoppelte Ebenen ($t_z = 0.1$). Links: TMM Ergebnisse für Systemgrößen $M = 5, \ldots, 17$. Linien kennzeichnen nichtlineare Fits an die Daten. In der vergrößerten Ansicht (Inset) ist eine systematische Verschiebung des Schnittpunktes erkennbar. Rechts: Skalenfunktion für die Daten aus dem linken Diagramm. Im Inset wird die entsprechende Divergenz des Skalenparameters gezeigt.

Anderson-Modell mit reiner Potentialunordung überein [BCRS00, C98, CRS99]. Das Anderson-Modell mit Hüpfunordnung gehört demnach auch der orthogonalen Universalitätsklasse an.

Im 2D Anderson-Modell mit zufälligem Hüpfen wurde der Einfluß der Bipartitheit des Gitters auf die Divergenz von λ for $M \to \infty$ in der Bandmitte $E = 0$ analysiert [BCRS00]. Wir konnten zeigen, daß sich die Werte der reduzierten Lokalisierungslänge λ/M für gerade und ungerade Systembreiten M voneinander unterscheiden. Der Wert von λ/M bei $E = 0$ bleibt allerdings in allen Fällen jeweils nahezu konstant und deutet damit auf einen kritischen Zustand. Desweiteren untersuchten wir die funktionale Form der Divergenz und konnten in ersten Resultaten neue kritische Exponenten finden [ERS01].

Außerdem analysierten wir mit Hilfe der ENS die elektronischen Zustände in quasiperiodischen 2D Modellen. Hier konnten wir zeigen, dass, obwohl das Gitter deterministisch, also nicht ungeordnet, ist, die ENS trotzdem identisch zur ENS im metallischen Bereich des Anderson-Modells ist [SGRZ99b, ZGRS98]. Auch Korrelationen im Energiespektrum [SGRZ99a], sowie Statistiken jenseits der Nächste-Nachbar-ENS [GRSZ00] zeigen dieses Verhalten. Ein ähnliches Verhalten wurde von uns auch in zufälligen Netzwerken gefunden [GRS98].

2.4.3 Teilaufgabe „Einfluß von Wechselwirkung auf lokalisierte Zustände"

Mitarbeiter: Römer, Schreiber, Vojta (C2), Eilmes (Kraków), Leadbeater (Durham), Schuster (Augsburg)
Stichworte: Wechselwirkung, Delokalisierung, Parallelisierung

Zusammen mit M. Leadbeater berechneten wir mit Hilfe der Dezimations-Methode [LRS99] die Greenfunktion für das Zwei-Teilchen-Problem in 1D und konnten dann durch Finite-Size-Scaling eine Lokalisierungslänge ξ_2 für den Limes $M \to \infty$ angeben. Unsere Daten zeigen [RLS99a, RLS99b, RSV99], dass

$$\xi_2 \sim \lambda_1/2 + c\lambda_1^{\alpha(U)} \tag{2.3}$$

mit einem Exponenten $\alpha(U)$, der zwischen $\alpha(0) = 1$ und $\alpha(1) = 1.5$ variiert. Insbesondere ist wie erwartet $\xi_2(0) \approx \lambda_1/2$, was die numerische Stabilität der Dezimationsmethode zeigt [RLS99a]. Diese Rechnungen ergaben also eindeutig eine Delokalisierung, die nicht mehr durch zu kleine Systemgrößen vorgetäuscht wird [19], sondern durch Wechselwirkung verursacht wird. Unsere Resultate sind in guter Übereinstimmung mit Ergebnissen anderer Gruppen und Methoden [18, RSV01]. Als Erweiterung dieser Arbeiten betrachteten wir dann das Zwei-Teilchen-Problem in 2D [RLS99b]. Mit Hilfe der Dezimationsmethode erhielten wir eine so starke Delokalisierung, dass sich nach Finite-Size-Scaling sogar ein MIÜ für die relevanten Zwei-Teilchen-Zustände ergab. Dabei gelang es uns, das Unordnungs-Wechselwirkungs-Phasendiagramm und die zugehörigen kritischen Exponenten des Übergangs zu ermitteln.

Desweiteren wandten wir die TMM und die Dezimationsmethode auch auf das Zwei-Teilchen-Problem im Aubry-André-Modell an, das einen MIÜ in 1D aufweist [EGRS99]. Wir fanden, dass die kritischen Parameter des Übergangs auch für zwei Teilchen nicht gegenüber dem wechselwirkungsfreien Fall verändert werden. Diese Arbeit wurde dann mit Hilfe der Dichtematrixrenormierungsgruppe auf den Fall endlicher Teilchendichten ausgedehnt und wir stellten fest, dass die dann auftretenden Effekte die oben dargestellte Zwei-Teilchen-Delokalisierung stark überlagern, bzw. völlig verdrängen [ERSS01]. Das in Abb. 2.4 gezeigte Phasendiagramm hat z.B. lokalisierte Zustände für Wechselwirkungsstärken $V < -2$.

Als Erweiterung der Fragestellung zu zwei wechselwirkenden Teilchen haben wir in Zusammenarbeit mit Prof. M. E. Raikh (University of Utah) eine ähnliche Problemstellung auf einem 1D Ring anstelle eines 1D Drahtes untersucht [RR00a, RR00b]. Insbesondere studierten wir das Verhalten bei anziehender Wechselwirkung und einem endlichen Magnetfeld. Hier konnten wir zeigen, dass auch das *neutrale* Exziton — also der gebundene Zustand der zwei Teilchen — an den Aharonov-Bohm-Fluss ankoppelt, was zu charakteristischen Oszillationen der Spektrallinien und der Oszillatorstärken führt. Wichtig ist dabei, dass der Ringumfang nicht viel größer ist als der Bohrradius des Exzitons. Ringe in der dazu nötigen Nanometergröße sind in den letzten Jahren erfolgreich fabriziert worden und experimentelle Messungen zum vorhergesagten exzitonischen Aharonov-Bohm-Effekt werden zur Zeit vorgenommen. Zum Einfluss von Unordnung liegen erste Untersuchungen vor und zeigen, dass — wie auch schon für das Problem der Dauerströme in mesoskopischen Ringen — teilweise eine Verstärkung des Effektes durch die Wechselwirkung erreicht werden kann. Zur Zeit arbeiten wir an einer numerischen Modellierung des ungeordneten Systems mit Trionen und Biexzitonen.

Weitere Untersuchungen im Rahmen der Teilaufgabe wurden zu integrablen Störstellen durchgeführt. Hier konnten wir zeigen, dass auch bei einer Kopplung von rein rückwärtsstreuenden Rändern mit vorwärtsstreuenden Störstellen keine Loka-

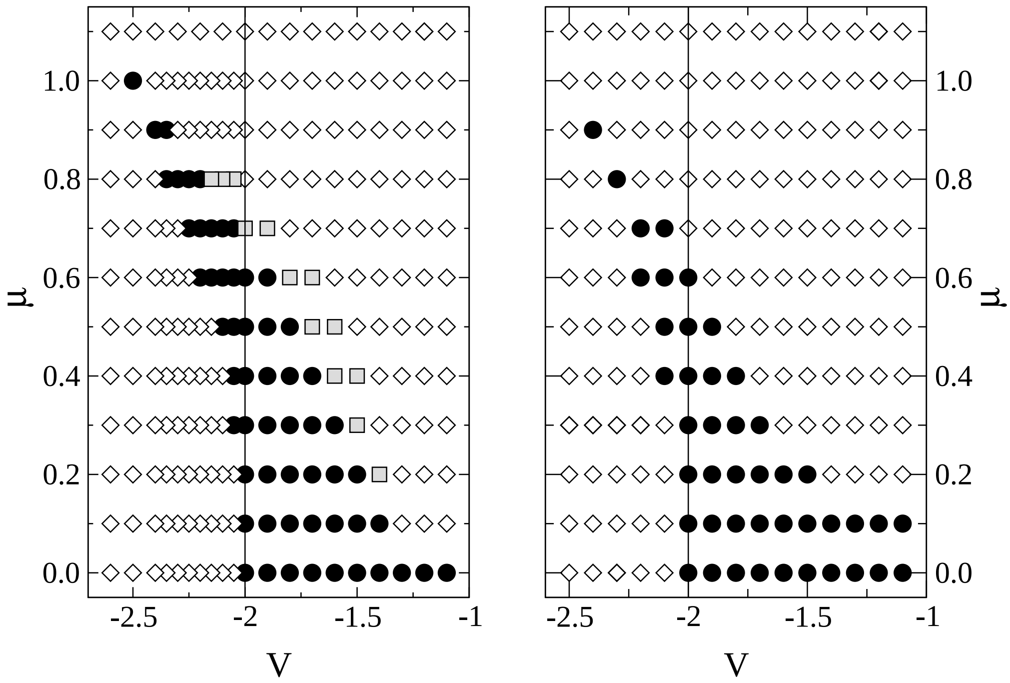


Abbildung 2.4: Phasendiagramm des wechselwirkenden Aubry-André-Modells [ERSS01] als Funktion der Potentialstärke μ und der Wechselwirkung V für Dichten 0.236 (links) und 0.146 (rechts). Eine ausgedehnte Grundzustandswellenfunktion wird durch • markiert, ein lokalisierter Zustand durch ⋄. Graue □ kennzeichnen die Übergangsregion, in der keine klare Systemgrößenabhängigkeit gesehen werden kann. Die durchgezogenen Linien zeigen den Phasenübergang erster Ordnung bei $V = -2$ und $\mu = 0$.

lisierung erreicht werden kann [GGR98, GGRS00]. Die Arbeiten sind z.B. relevant für Tunneleffekte in Quantendrähten. In weiteren Arbeiten zu integrablen Modellen haben wir einige Kriterien zur Definition von Korrelationsstärken entwickelt und getestet [RZ00, RZ01].

2.4.4 Teilaufgabe „Thermischer Transport in ungeordneten Systemen"

Mitarbeiter: Villagonzalo, Römer, Schreiber, MacKinnon (London)
Stichworte: Thermokraft, rekursive Green-Funktionsmethode

Unsere Resultate für das Anderson-Modell mit $\sigma \sim |E - E_c|^\nu$ ergeben (siehe Abb. 2.5), dass die Thermokraft S am MIÜ nicht divergiert [V99, B98vrs, E00vrs, M99vrs, Mu99vrs, VR98, VRS99a, VRS99b]. Im Gegenteil, S ist konstant und nur durch den Wert von ν bestimmt. Desweiteren berechneten wir das Temperaturverhalten und die Skalierungseigenschaften von K, L_0 und ZT, wie in Abb. 2.5 dargestellt. Gerade die Bestimmung von L_0 ist als Test unseres Ansatzes besonders wich-

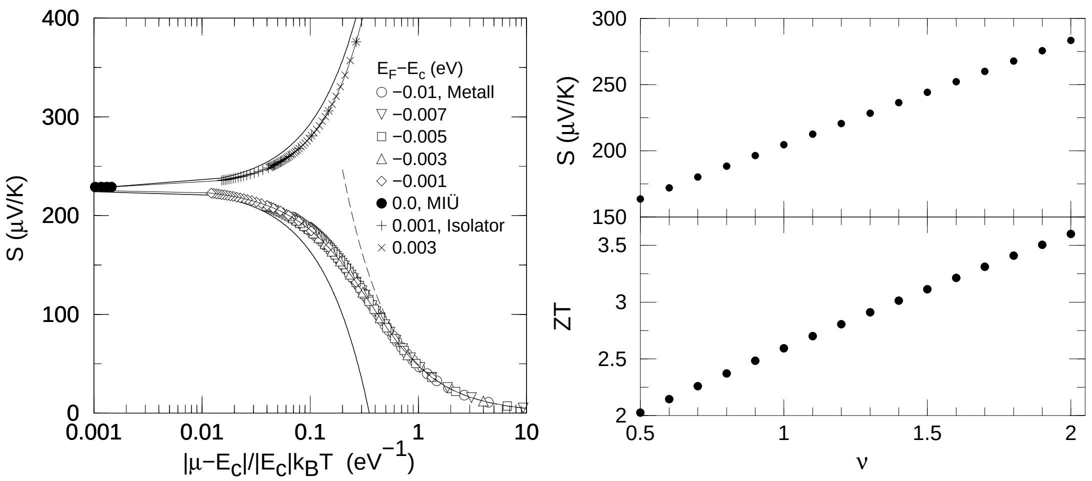


Abbildung 2.5: Links: Die Temperaturabhängigkeit von S skaliert als Funktion von $t = |\mu - E_c|/|E_c|$. Für $\nu = 1.3$ folgt daraus $z = 0.77$ und der Wert der Thermokraft am MIÜ ist $S = 224.8$ μV/K. Die breite durchgezogene Linie zeigt das Ergebnis einer Näherung für hohe Temperaturen, die gestrichelte Linie zeigt die Resultate der Sommerfeld-Näherung für niedrige Temperaturen. Rechts: Die Thermokraft und die dimensionslose Gütezahl am MIÜ als Funktion von ν.

tig, da hier das Verhalten im metallischen Bereich durch den Wiedemann-Franz-Wert $\pi^2/3$ [23, 48] gegeben ist. Unsere Daten zeigen die Existenz des MIÜ auch für S, K, und L_0 [E00vrs, M99vrs, Mu99vrs].

Die Leitfähigkeit $\sigma(t, T)$ sollte am MIÜ mit $t/T^{1/z\nu}$ skalieren. Hierbei ist t der dimensionslose Abstand zum MIÜ, z.B. $1 - E/E_c$, und z der sogenannte dynamische Exponent. Im Falle des Anderson-Modells erwartet man $z = 3$ [25, 47]. In den oben vorgestellten Theorien und auch in unseren Arbeiten [H99vrs, Mu99vrs, VRS99a, VRS99b] ist aber eine Skalierung mit $z = 0.77$ gefunden worden. Desweiteren zeigen unsere Arbeiten [VR98, VRS99a, VRS99b], dass auch die Größenordnung des Wertes von S am MIÜ nicht mit den experimentellen Resultaten [28, 29, 30, 46], z.B. in Si:P, übereinstimmt. Schließlich wird in den Experimenten noch ein Vorzeichenwechsel von S bei tiefen Temperaturen beobachtet, der auch nicht mit den vorliegenden Theorien verstanden werden kann.

Ein mögliche Erklärung dieser Abweichungen besteht in der vereinfachenden Annahme von nicht-wechselwirkenden Elektronen. Jedoch zeigen neueste experimentelle Messungen [25, 47] sehr gute Skalierungseigenschaften, die sich durch die Skalen-Hypothese nicht-wechselwirkender Teilchen mit $z = 2.94 \pm 0.3 \approx 3$ [46] erklären lassen.

Um diese Probleme zu untersuchen, haben wir die Chester-Thellung-Kubo-Greenwood-Formulierung im Rahmen eines phänomenologischen Modells benutzt. Anstelle von $\sigma \sim |E - E_c|^\nu$ verwenden wir dabei als Eingabedaten die experimentell erhaltenen Meßdaten [46] von $\sigma(t, T)$. Daraus haben wir die anderen Transportgrößen S, K, und L_0 berechnet. Schließlich konnten wir so den Einfluß variierender Zustandsdichten und chemischer Potentiale beschreiben. Ein sehr wichtiger Faktor war dabei die Erweiterung des Modells hin zu einer wirklichen Temperaturabhängigkeit von σ wie in den experimentellen Daten beobachtet. Da sich diese

Experimente [46] durch eine hohe Qualität insbesondere bezüglich der Skalierungseigenschaften der Daten auszeichnen, bot sich eine solche Vorgehensweise an.

Mit diesem phänomenologischen Modell erhielten wir am MIÜ Werte für S, die mit den Experimenten vergleichbar sind [O01crvm, VRSM01]. Das von uns berechnete Temperaturverhalten für S, K und L_0 ermöglicht auch eine gute Skalierung mit $z \approx 3.2$ und $\nu = 1$ [O01crvm, S01vrsm]. Für S, K und L_0 haben wir damit die erste Vorhersage von experimentell relevanter Skalierung vorgeschlagen. Desweiteren zeigen unsere Ergebnisse, dass der experimentell beobachtete Vorzeichenwechsel von S nur durch starke Eingriffe in die Theorie verstanden werden kann. Dies läßt darauf schliessen, dass der Vorzeichenwechsel durch physikalische Prozesse jenseits der verwendeten nicht-wechselwirkenden Theorie hervorgerufen wird [VRSM01].

In den vorgestellten Arbeiten zur Berechnung der thermischen Transportgrößen benutzten wir phänomenologische Annahmen z.B. über den funktionalen Verlauf von $\sigma(t, T)$. In einer Zusammenarbeit mit Prof. Angus MacKinnon am Imperial College in London haben wir ausgehend von einer mikroskopischen Beschreibung des Transports [45] eine neue Theorie zur Berechnung von S entwickelt. Die Theorie basiert auf einer rekursiven Green-Funktionsmethode und ist deshalb numerisch sehr effizient. Insbesondere sind keine der gewöhnlichen Größenbeschränkungen aufgrund von Speicherplatzproblemen zu erwarten. Unsere Voruntersuchungen in 1D zeigen, dass der Peltier-Koeffizient $= ST$ eine Lorentz-Verteilung hat. Im Gegensatz dazu ist σ Gauß-verteilt.

2.4.5 Teilaufgabe „Statistik von Wahrscheinlichkeitsamplituden in ungeordneten Systemen im Magnetfeld"

Mitarbeiter: Cain, Milde, Römer, Schreiber, Mehlig (C6), Uski (C6)
Stichworte: Wellenfunktionsstatistik, Quanten-Hall Effekt

In enger Zusammenarbeit mit dem Teilprojekt C6 haben wir die Verteilung von Wellenfunktionsamplituden in 1D, 2D, 3D und quasi-1D Anderson- und Zufallsbandmatrix-Modellen betrachtet [UMR98, UMRS99, UMRS00a, UMRS00b]. Unsere Resultate unterstützten die Vermutung, dass die Diskrepanz zwischen den analytischen Aussagen und den numerischen Ergebnissen für die Wellenfunktionsstatistik durch sogenannte ballistische Effekte verursacht wird. Eine detailierte Darstellung dieser Forschungsergebnisse wird im Teilprojekt C6 gegeben.

Neben der Wellenfunktionsstatistik untersuchten wir auch die Verteilung von Transmissionsamplituden in ungeordneten Systemen im Magnetfeld [E00crs, Ho01crrs, H01crrsb, R00crs, Ri00crrs]. Als Grundlage diente dabei nicht das Anderson-Modell der Lokalisierung sondern das Chalker-Coddington-Modell [42], das eine semiklassische 2D Quantenperkolation im starken Magnetfeld beschreibt [R01]. Mittels eines Ortsraum-Renormierungsgruppenansatzes bestimmten wir mit hoher Genauigkeit die kritische Leitwertverteilung und den kritischen Exponenten ν der Lokalisierungslänge am Quanten-Hall-Übergang. Weiterhin zeigten wir, dass eine langreichweitige Korrelation des Unordnungspotentials, die $\propto r^{-\alpha}$ mit dem Abstand r abfällt, zu einem größeren Wert von ν führt. Die Arbeit an diesem Thema wurde im SFB begonnen und nach erfolgreicher Antragstellung seit April 2000 im Rahmen des Schwerpunktprogrammes „Quanten-Hall-Systeme" der DFG fortgesetzt.

Literaturverzeichnis

Referierte Publikationen

[BCRS00] *Off-diagonal disorder in the Anderson model of localization*, P. Biswas, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, phys. stat. sol. (b) **218**, 205–209 (2000)

[CRS99] *Phase diagram of the three-dimensional Anderson model of localization with random hopping*, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Ann. Phys. (Leipzig) **8**, SI-33–36 (1999)

[EGRS99] *Two interacting particles at the metal-insulator transition*, A. Eilmes, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, Eur. Phys. J. B **8**, 547–554 (1999)

[EMMRS99] *The Anderson model of localization: a challenge for modern eigenvalue methods*, U. Elsner, V. Mehrmann, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, SIAM, J. Sci. Comp. **20**, 2089–2102 (1999)

[ERS01] *Exponents of the localization lengths in the bipartite Anderson model with off-diagonal disorder*, A. Eilmes, R. A. Römer, M. Schreiber, im Druck bei Physica B (2001)

[GGR98] *Lax pair formulation for a small-polaron chain with integrable boundaries*, X.-W. Guan, U. Grimm, R. A. Römer, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 518–522 (1998)

[GGRS00] *Integrable impurities for an open fermion chain*, X.-W. Guan, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, J. Phys. A: Math. Gen. **33**, 3863–3879 (2000)

[GRS98] *Electronic states in topologically disordered systems*, U. Grimm, R. A. Römer, G. Schliecker, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 389–393 (1998)

[GRSZ00] *Universal level-spacing statistics in quasiperiodic tight-binding models*, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, J.-X. Zhong, Materials Science & Engineering A **294–296**, 564–567 (2000)

[LRS99] *Interaction-dependent enhancement of the localisation length for two interacting particles in a one-dimensional random potential*, M. Leadbeater, R. A. Römer, M. Schreiber, Eur. Phys. J. B **8**, 643–652 (1999)

[MR98] *Energy level statistics at the metal-insulator transition in the Anderson model of localization with anisotropic hopping*, F. Milde, R. A. Römer, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 452–456 (1998)

[MRS00] *Energy level statistics at the metal-insulator transition in anisotropic systems*, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, Phys. Rev. B **61**, 6028–6035 (2000)

[MRSU00] *Critical properties of the metal-insulator transition in anisotropic systems*, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, V. Uski, Eur. Phys. J. B **15**, 685–690 (2000)

[R01] *Percolation, Renormalization and the Quantum-Hall Transition*, R. A. Römer, in *Computational Statistical Physics*, K. H. Hoffmann, M. Schreiber, Hrsg., im Druck bei Springer, Berlin (2001)

[RLS99a] *Scaling the localisation lengths for two interacting particles in one-dimensional random potentials*, R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber, Physica A **266**, 481–485 (1999)

[RLS99b] *Numerical results for two interacting particles in a random environment*, R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber, Ann. Phys. (Leipzig) **8**, 675–684 (1999)

[RR00a] *Aharonov-Bohm oscillations in the exciton luminescence from a semiconductor nanoring*, R. A. Römer, M. E. Raikh, phys. stat. sol. (b) **221**, 535–539 (2000)

[RR00b] *The Aharonov-Bohm effect for an exciton*, R. A. Römer, M. E. Raikh, Phys. Rev. B **62**, 7045–7049 (2000)

[RSV01] *Disorder and Two-Particle Interaction in Low-Dimensional Quantum Systems*, R. A. Römer, M. Schreiber, T. Vojta, Physica E **9**, 397–404 (2001)

[RSV99] *Two-interacting particles in a random potential: Numerical calculations of the interaction matrix elements*, R. A. Römer, M. Schreiber, T. Vojta, phys. stat. sol. (b) **211**, 681–691 (1999)

[RZ00] *Fluctuation-correlation analysis of the Calogero-Sutherland model*, R. A. Römer, P. Ziesche, Phys. Rev. B **62**, 15279–15282 (2000)

[RZ01] *Hellmann-Feynman Theorem and Correlation-Fluctuation Analysis of the Calogero-Sutherland Model*, R. A. Römer, P. Ziesche, J. Phys. A: Math. Gen. **34**, 1485–1506 (2001)

[SGRZ99a] *Application of random matrix theory to quasiperiodic systems*, M. Schreiber, U. Grimm, R. A. Römer, J. X. Zhong, Physica A **266**, 477–480 (1999)

[SGRZ99b] *Energy Levels of Quasiperiodic Hamiltonians, Spectral Unfolding, and Random Matrix Theory*, M. Schreiber, U. Grimm, R. A. Römer, J. X. Zhong, Comp. Phys. Comm. **121–122**, 499–501 (1999)

[SMREM99] *Electronic states in the Anderson model of localization: benchmarking eigenvalue algorithms*, M. Schreiber, F. Milde, R. A. Römer, U. Elsner, V. Mehrmann, Comp. Phys. Comm. **121–122**, 517–523 (1999)

[UMR98] *A numerical study of wave-function and matrix-element statistics in the Anderson model of localization*, V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 437–441 (1998)

[UMRS00a] *An exact-diagonalization study of rare events in disordered conductors*, V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, M. Schreiber, Phys. Rev. B **62**, R7699–R7702 (2000)

[UMRS00b] *Incipient localization in the Anderson model*, V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, M. Schreiber, Physica B **284–288**, 1934–1935 (2000)

[UMRS99] *Smoothed universal correlations in the two-dimensional Anderson model*, V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, M. Schreiber, Phys. Rev. B **59**, 4080–4090 (1999)

[VR98] *Low temperature behavior of the thermopower in disordered systems near the Anderson transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 394–399 (1998)

[VRS99a] *Transport properties near the Anderson transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Ann. Phys. (Leipzig) **8**, SI-269–272 (1999)

[VRS99b] *Thermoelectric transport properties in disordered systems near the Anderson transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Eur. Phys. J. B **12**, 179–189 (1999)

[VRSM01] *Behavior of the thermopower in amorphous materials at the metal-insulator transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber A. MacKinnon, Phys. Rev. B **62**, 16446–16452 (2000)

[ZGRS98] *Level Spacings Distributions of Planar Quasiperiodic Tight-Binding Models*, J. X. Zhong, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, Phys. Rev. Lett. **80**, 3996–3999 (1998)

Eingereichte Manuskripte

[ERSS01] *Two and more interacting particles at a metal-insulator transition*, A. Eilmes, R. A. Römer, C. Schuster, M. Schreiber, eingereicht bei Phys. Rev. B, (2001)

Diplom-, Doktor- und Habilitationsarbeiten

[C98] *Das Anderson-Modell der Lokalisierung mit nicht diagonaler Unordnung*, P. Cain, Diplomarbeit, TU Chemnitz (12/1998)

[M00] *Disorder-induced metal-insulator transition in anisotropic systems*, F. Milde, Doktorarbeit, TU Chemnitz (07/2000)

[R99] *From Localization to Delocalization in Disordered Systems: Numerical studies of the influence of disorder and many-body interactions on the electronic transport properties of solids*, R. A. Römer, Habilitationsschrift, TU Chemnitz, (08/1999)

[V99] *Thermal transport in the Anderson model of localization*, C. Villagonzalo, Doktorarbeit, TU Chemnitz (vorraussichtlich 05/2000)

Konferenzbeiträge

[B98crs] *The three-dimensional Anderson model of localization with random hopping* , P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, 210. WE-Heraeus Seminar PILS'98, Berlin (10/1998)

[B98memrs] *The Anderson model of localization: A challenge for modern eigenvalue methods*, F. Milde, U. Elsner, V. Mehrmann, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[B98rls] *Using decimation to study the localization properties of two interacting particles in random potentials*, R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[B98srg] *Level statistics in topologically disordered systems*, G. Schliecker, R. A. Römer, U. Grimm, Poster, *ibid.*

[B98vrs] *Low Temperature Behavior of the Thermoelectric Power in Disordered Systems near the Anderson Transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[Bo98slr] *Formation of Electron Hole Pairs in a One-Dimensional Random Environment*, M. Schreiber, M. Leadbeater, R.A. Römer, Vortrag, 3rd International Conference Excitonic Processes in Condensed Matter (EXCON'98), Boston (11/1998)

[C00crs] *Makroskopische Inhomogenitäten am Quanten-Hall-Übergang*, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, WE-Heraeus-Ferienkurs für Physik: Vom Billardtisch bis Monte Carlo — Spielfelder der Statistischen Physik, Chemnitz (09/2000)

[C00r] *Perkolation und Renormierung am Quanten-Hall-Übergang*, R. A. Römer, eingeladener Vortrag, *ibid.*

[C00rr] *Aharonov-Bohm oscillations in the exciton luminescence from a semiconductor nanoring*, R. A. Römer, M.E. Raikh, Poster, *ibid.*

[C00s] *Fraktale Elektronen im Anderson-Modell der Lokalisierung*, M. Schreiber, eingeladener Vortrag, *ibid.*

[D00ygrs] *Energy spectra, wavefunctions, and quantum diffusion for quasiperiodic tight-binding models*, H.Q. Yuan, U. Grimm, P. Repetowicz, M. Schreiber, DPG-Frühjahrstagung Fachverband Theoretische und Mathematische Grundlagen der Physik, Dresden (03/2000)

[D98r] *Wave function statistics in the Anderson model of localization close to the metal-insulator transition*, R. A. Römer, Poster, From mesoscopic to microscopic quantum transport: new trends in theory and experiment (TRANSP), MPI-PKS Dresden (11/1998)

[D99crs] *Off-diagonal disorder in the three-dimensional Anderson-model of localization*, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, *Dynamics of Complex Systems*, MPI-PKS Dresden (05/1999)

[D99mrs] *Anisotropic hopping in the Anderson model of localization*, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[D99rs] *Two interacting particles in two dimensional random potentials*, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[D99vrs] *Nondivergent Thermopower at the Anderson Transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[Dr99s] *Localisation of Electronic States in Disordered Materials*, M. Schreiber, eingeladener Vortrag, Int. Seminar *Beyond Quasiperiodicity: Complex Structures and Dynamics*, Dresden (01/1999)

[E00crs] *Renormierungsgruppenstudie zu makroskopischen Inhomogenitäten am Quanten-Hall-Übergang*, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Vortrag, *1. Symposium Schwerpunktprogramm "Quanten-Hall-Systeme"*, Bad Elster (04/2000)

[E00s] *Anderson Localisation — An Overview*, M. Schreiber, Vortrag, *ibid*

[E00vrs] *Thermoelectric transport properties in disordered systems near the Anderson transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Vortrag, *ibid*

[E98r] *Elektronen in ungeordneten Materialien*, R. A. Römer, eingeladener Vortrag, Symposium *Elektronen in Quasikristallen* des DFG-Schwerpunktes *Quasikristalle*, Bad Elster (11/1998)

[G98mrs] *Energy Level Statistics at the Metal-Insulator Transition in the Anderson Model of Localization with Anisotropic Hopping*, F. Milde, R.A. Römer M. Schreiber, Poster, Conf. Computational Physics, CCP-1998, Granada (09/1998)

[G98s] *Multifractal analysis of electronic states at the metal-insulator transition in disordered materials*, M. Schreiber, eingeladener Vortrag, *ibid.*

[G98semmr] *The Anderson Model of Localization: A Challenge for Modern Eigenvalue Methods*, M. Schreiber, U. Elsner, V. Mehrmann, F. Milde, R. A. Römer, Poster, *ibid.*

[G98sgrz] *Level-Spacing Distributions of Planar Quasiperiodic Tight-Binding Models*, M. Schreiber, U. Grimm, R. A. Römer, J.X. Zhong, Poster, *ibid.*

[Gr98mrs] *The Anderson Model of Localization with Anisotropic Hopping*, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, Vortrag, Conf. Condensed Matter Division EPS, Grenoble (08/1998)

[Gro98s] *Theorie des elektronischen Transports in Mikrostrukturen*, M. Schreiber, Vortrag, Klausurtagung Innovationskolleg *Methoden und Materialsysteme für den Nanometerbereich*, Großbothen (10/1998)

[H01crrsb] *Makroskopische Inhomogenitäten am Quanten-Hall-Übergang*, P. Cain, M. Raikh, R. A. Römer, M. Schreiber, Vortrag, HL 15.1, 65. Frühjahrstagung der DPG, Hamburg (03/2001)

[H01erss] *Two and more interacting particles at a metal-insulator transition*, A. Eilmes, R. A. Römer, C. Schuster, M. Schreiber, Poster, TT, *ibid.*

[H01nrs] *Finite-Size Scaling of the Level Compressibility at the Anderson Transition*, M. Ndawana, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, TT 25.64, *ibid.*

[H01rr] *Trion luminescence from a semiconductor nanoring*, R. A. Römer, M. Raikh, Vortrag, HL 16.4, *ibid.*

[Ho01crrs] *Makroskopische Inhomogenitäten am Quanten-Hall-Übergang*, P. Cain, M. E. Raikh, R. A. Römer, M. Schreiber, Vortrag, Kolloquium des DFG Schwerpunktprogramm "Quanten-Hall-Systeme", Bad Honnef (01/2001)

[H00semr] *New Results on Anderson Localization*, M. Schreiber, A. Eilmes, F. Milde, R. A. Römer, Int. Conf. Wave Propagation and Electronic Structure in Disordered Systems, Heraklion, Griechenland (06/2000)

[H99crs] *The three-dimensional Anderson model with random hopping*, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, Localization 1999: International Conference on Disorder and Interaction in Transport Phenomena, Hamburg (08/1999)

[H99r] *Numerical results for two interacting particles in a random environment*, R. A. Römer, eingeladener Vortrag,*ibid.*

[H99vrs] *Transport near the Anderson transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[I01sgr] *Lokalisierung elektronischer Zustände in quasiperiodischen Gittern*, M. Schreiber, U. Grimm, P. Repetowicz, Poster, SPP-Kolloquium Quasikristalle: Struktur und physikalische Eigenschaften, Irsee (03/2001)

[M00rls] *Numerical results for two interacting particles in a 2D random environment*, R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber, Poster, 11th International Winterschool on New Developments in Solid State Physics, Mauterndorf (02/2000)

[M00rr] *The Aharonov-Bohm effect for an exciton*, R. A. Römer, M. E. Raikh, Poster, *ibid.*

[M98s] *Interaction-dependent enhancement of the localization length for two interacting particles in a one-dimensional random potential*, M. Schreiber, eingeladener Vortrag, SFB 383, Miniworkshop *Two (or more) interacting particles in a disordered environment*, Marburg (07/1998)

[M99crs] *Das dreidimensionale Anderson-Modell der Lokalisierung mit nichtdiagonaler Unordnung*, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, HL 12.73, 63. Frühjahrstagung der DPG, Münster (03/1999)

[M99ggrs] *Integrable impurities for a small-polaron model with general open boundary conditions*, X. Guan, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, TT 21.64, *ibid.*

[M99grss] *Elektronenspektren in topologisch ungeordneten Systemen*, U. Grimm, R. A. Römer, G. Schliecker, M. Schreiber, Poster, DY 20.31, *ibid.*

[M99kgs] *Quantum transport and momentum conserving dephasing*, I. Knittel, F. Gagel, M. Schreiber, Poster, *ibid*

[M99mrs] *Metall-Isolator-Übergang im Anderson-Modell der Lokalisierung mit anisotropen Hüpfelementen*, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, HL 12.74, *ibid.*

[M99rls] *Two interacting particles in a two dimensional random environment*, R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber, Vortrag, HL 38.2, *ibid.*

[M99vrs] *The Thermoelectric Power of Disordered Systems near the Anderson Transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, TT 21.78, *ibid.*

[Ma00rr] *The Aharonov-Bohm Effect for an Exciton*, R. A. Römer, M. E. Raikh, Poster, Sixth International Workshop on Nonlinear Optics and Excitation Kinetics in Semiconductors, Marburg (04/2000)

[Mo00crrs] *Macroscopic Inhomogenities at the quantum Hall transition*, P. Cain, R. A. Römer, M. E. Raikh, M. Schreiber, Poster, 18th General Conf. Condensed Matter Division EPS, Montreux (03/2000)

[Mo00rls] *Numerical results for two interacting particles in a 2D random environment*, R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[Mu99crs] *Off-diagonal disorder in the three-dimensional Anderson model of localization with random hopping*, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, VIII International Conference on Hopping and Related Phenomena, Murcia, Spanien (09/1999)

[Mu99vrs] *Thermoelectric transport near the Anderson transition*, C.Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[O00s] *Aharonov-Bohm oscillations in the exciton luminescence from a semiconductor nanoring*, M. Schreiber, Vortrag, 25th International Conference on the Physics of Semiconductors, Osaka, Japan (09/2000)

[O01crvm] *Critical Behavior of the Thermoelectric Transport Properties in Amorphous Systems near the Metal-Insulator Transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, A. MacKinnon, Proceedingsbeitrag, im Druck bei Springer für die Proceedings der 25th International Conference on the Physics of Semiconductors, Osaka, Japan (2001)

[O01mrs] *Metal-insulator transition in anisotropic systems*, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, *ibid.*

[O01rr] *Trion in a semiconductor nanoring: Sensitivity to a magnetic flux*, R. A. Römer, M. E. Raikh, *ibid.*

[P98vrs] *Two interacting particles in a random potential: The random matrix model revisited*, T. Vojta, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, Statphys20: 20th International Conference on Statistical Physics, Paris (07/1998)

[P98zgrs] *Level-spacing distributions of planar quasiperiodic tight-binding models*, J.-X. Zhong, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, *ibid*

[R00crs] *Einfluss makroskopischer Inhomogenitäten auf den Quanten-Hall-Übergang*, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, HL 12.7, 64. Frühjahrstagung der DPG, Regensburg (03/2000)

[R00mrs] *Critical properties of the metal-insulator transition in anisotropic systems*, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, HL 12.74, *ibid.*

[R00rls] *Numerical results for two interacting-particles in a 2D random environment*, R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber, Poster, TT 22.60, *ibid.*

[R00rr] *The Aharonov-Bohm effect for an exciton*, R. A. Römer, M. E. Raikh, Vortrag, HL 14.8, *ibid.*

[R00vrs] *The behavior of the thermopower in amorphous materials at the metal-insulator transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, TT 22.61, *ibid.*

[R98rls] *Interaction-dependent enhancement of the localization length for two-interacting particles in a one-dimensional random potential*, R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber, Poster, Percolation98: International Conference on Percolation and Disordered Systems, Rauischholzhausen (07/1998)

[R98sgrz] *Application of random matrix theory to quasiperiodic systems*, M. Schreiber, U. Grimm, R. A. Römer, J.-X. Zhong, Poster, *ibid.*

[Ri00crrs] *Einfluss makroskopischer Inhomogenitäten auf den Integer-Quanten-Hall-Übergang*, P. Cain, M. Raikh, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, Symposium des Schwerpunktprogramms „Quanten-Hall-Systeme“, Schloß Ringberg (07/2000)

[S01rr] *Trion luminescence from a semiconductor nanoring*, R. A. Römer, M. Raikh, Vortrag, Q33.010, APS March meeting, Seattle, USA (03/2001)

[S01vrsm] *Behavior of the thermopower in amorphous materials at the metal-insulator transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, A. MacKinnon, Vortrag, V30.009, *ibid.*

[S99grsz] *Universal level-spacing statistics in quasiperiodic tight-binding models*, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, J. X. Zhong, Poster, Int. Conf. Quasicrystals ICQ7, Stuttgart (09/1999)

[Sc99s] *Electronic transport*, M. Schreiber, Vortrag, Symposium *Methods and materials for the nanometer regime*, Schöneck (10/1999)

[T00sv] *Solid State Physics on the Computer — Example: Anderson Localization*, M. Schreiber, T. Vojta, eingeladener Vortrag, Summerschool Teaching Computational Physics, Trest, Tschechien (09/2000)

[T98zgrs] *Level-spacing distributions of planar quasiperiodic tight-binding models* , J.-X. Zhong, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, Classical Chaos and its Quantum Manifestations, Toulouse, (07/1998)

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Das Anderson Modell der Lokalisierung wird seit vielen Jahren intensiv numerisch untersucht. Es kann deshalb als große Überraschung gewertet werden, dass sich in den letzten drei Jahren der Wert des kritischen Exponenten ν am MIÜ von 1.35 auf $1.57 - 1.62$ verschoben hat. Diese Untersuchungen basieren auf höchst präzisen Messungen mit Hilfe der TMM z.B. wie in 2.4.2. Ähnliche Rechnungen mit ENS geben aber bei der derzeitig verfügbaren Messgenauigkeit Werte von $\nu \approx 1.45$. Es ist deshalb eine offenen Frage, ob die ENS wirklich den universellen Bereich des MIÜ erreicht, und weitere systematische Untersuchungen sind erforderlich. Da die ENS eine der meistgenutzten Methoden im Bereich der ungeordneten, aber auch vieler anderer physikalischer Systeme darstellt, sind diese Untersuchungen von großem prinzipiellen Interesse.

Im Rahmen der Untersuchungen zu Effekten im Magnetfeld konnten wir zeigen, dass lang-reichweitige Korrelationen zu charakteristischen Änderungen am MIÜ in Quanten-Hall-Systemen führen sollten. Entsprechende Untersuchungen zum Übergang des 3D Anderson-Modells sind nicht bekannt und verlangen aufgrund ihrer Komplexität zwingend den Einsatz moderner paralleler Rechenmethoden. Insbesondere wollen wir testen, ob das im Falle der klassichen Perkolation bekannte erweiterte Harris-Kriterium angewandt werden kann.

Von großem Interesse ist die von uns im Berichtszeitraum entwickelte mikroskopische Greenfunktionsmethode zur Berechnung von Thermokraft und Peltierkoeffizient. Erste Rechnungen liegen, wie in 2.4.5 vorgestellt, für den 1D Fall vor und sollen auf die physikalisch interessanteren 2D und 3D Fälle ausgedehnt werden. Da hier in Erweiterung der bisherigen Methoden auch neue Parallelisierungsstrategien entwickelt werden müssen, sind neue algorithmische Fragestellungen z.B. bzgl. Matrizeninvertierung zu formulieren und zu bearbeiten.

Teilprojekt C2

2.1 Teilprojekt C2

Dynamisches Verhalten und Glaseigenschaften von ungeordneten korrelierten Vielteilchensystemen.

2.1.1 Antragsteller

Dr. Thomas Vojta
05.03.1966
Professur Theoretische Physik III (Theorie ungeordneter Systeme)
Institut für Physik
Technische Universität Chemnitz
09107 Chemnitz
Tel.: (0371) 531-3142
Fax: (0371) 531-3143
email: vojta@physik.tu-chemnitz.de

2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. Thomas Vojta
Prof. Dr. Michael Schreiber
Dr. Smaine Behkechi
Dr. Frank Epperlein
Dipl.-Phys. Svetlana Kilina
Sergej Uldanov

Die für das Projekt bewilligte Stelle (BAT IIa/2) war seit März 1998 mit Frank Epperlein besetzt. Herr Epperlein hat im Juli 1999 am Institut für Physik promoviert und war danach noch bis Oktober 1999 im SFB beschäftigt. Herr Epperlein hat sich vor allem mit der Simulation der Leitfähigkeit in ungeordneten Elektronensystemen beschäftigt. Nach dem Weggang von Herrn Epperlein hat Frau Kilina seine Arbeiten fortgeführt und daran gearbeitet, Spinfreiheitsgrade einzubeziehen. Sie hat die TU Chemnitz Ende 1999 aus familiären Gründen verlassen. An den Arbeiten zum Transport in ungeordneten Elektronensystemen war außerdem noch ein Austauschstudent, Sergej Uldanov, beteiligt. Seit Juli 2000 arbeitet Herr Dr. Bekhechi am vorliegenden Teilprojekt mit. Er beschäftigt sich vor allem mit magnetischen Phänomenen in ungeordneten Vielteilchensystemen.

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Das vorliegende Teilprojekt beschäftigt sich mit der numerischen Untersuchung von ungeordneten Systemen vieler wechselwirkender klassischer oder quantenmechanischer Teilchen. Aufgrund des gleichzeitigen Auftretens von Unordnung und wechselwirkungsbedingten Korrelationen zeigen diese Systeme ein sehr komplexes Verhalten. Die numerische Simulation von ungeordneten Vielteilchensystemen ist sehr aufwendig, weil einerseits die Größe des zugrunde liegenden Hilbertraumes exponentiell mit der Systemgröße wächst und andererseits die Existenz von Unordnung dazu zwingt, alle physikalischen Observablen über viele Realisierungen der Unordnung zu mitteln, um genügend geringe statistische Schwankungen zu erreichen. Aus diesen Gründen erfordert bereits die Simulation vergleichsweise kleiner Systeme den Einsatz von Höchstleistungsrechnern.

Im Berichtszeitraum stand die Untersuchung der Transporteigenschaften ungeordneter korrelierter Elektronen im Mittelpunkt. Daneben wurden auch thermodynamische Größen und ihr Ergodizitätsverhalten studiert. Weitere Arbeiten haben sich mit Quanten- und Nichtgleichgewichts-Phasenübergängen in solchen Systemen beschäftigt. Außerdem haben wir die in der ersten Förderperiode entwickelten Methoden zur Simulation von Quantensystemen auch auf korrelierte Elektronen in Quanten-Nanostrukturen angewandt.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

Die Arbeiten zu ungeordneten korrelierten Elektronen beruhten auf einer mikroskopischen Modellierung des Elektronensystems. Das zentrale Modell ist das Quanten-Coulomb-Glas [1, 2, 3]. Es beschreibt Elektronen auf einem regelmäßigen Gitter, die Unordnung wird durch ein zufälliges äußeres Potential modelliert. Die elektronische Wechselwirkung hat die Form eines Coulomb-Potentials, die Langreichweitgkeit ist dabei in der lokalisierten Phase von zentraler Bedeutung. Der vollständige Hamilton-Operator ist gegeben durch

$$\begin{aligned} H_{qm} = \quad & -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c^\dagger_{i\sigma} c_{i\sigma} + h.c.) + \sum_{i\sigma} \phi_i n_{i\sigma} \\ & + \sum_{i \neq j, \sigma} \frac{1}{r_{ij}} (n_{i\sigma} - K)(n_{i\sigma} - K) + U_H \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \ , \end{aligned} \tag{2.1}$$

wobei $c^\dagger_{i\sigma}$ und $c_{i\sigma}$ der Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperator eines Elektrons am Platz i mit Spin σ ist und $\langle ij \rangle$ alle Paare nächster Nachbarn bezeichnet. $n_{i\sigma}$ ist die Besetzungszahl des Spinzustandes σ am Gitterplatz i, ϕ_i das Zufallspotential an diesem Platz, r_{ij} der Abstand der Plätze i und j sowie K die Kompensationsladung, die für globale Ladungsneutralität sorgt. Im Limes starker Lokalisierung der Elektronen kann der kinetische Term im Quanten-Coulomb-Glas vernachlässigt werden. Damit werden aber auch die Spinfreiheitsgrade irrelevant. Das resultierende Modell ist das klassische Coulomb-Glas [5, 6, 7, 8],

$$H_{cl} = \sum_i \phi_i n_i + \sum_{i \neq j} \frac{1}{r_{ij}} (n_i - K)(n_j - K) \ , \tag{2.2}$$

das bereits seit langem zur Untersuchung der isolierenden Phase benutzt wird. Dieses Modell besitzt eine große Ähnlichkeit zu klassischen Spinmodellen wie dem Isingmodell im Zufallsmagnetfeld, von dem es sich durch die Form der Wechselwirkung unterscheidet. Für vergleichende Untersuchungen haben wir deshalb auch derartige Modelle studiert.

Im Berichtszeitraum haben wir drei separate numerische Methoden benutzt, um das physikalische Verhalten des klassischen und des Quanten-Coulomb-Glases zu untersuchen: Damage-Spreading-Simulationen, Optimierungsmethoden zur Bestimmung der Niederenergie-Zustände sowie die Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung. Neben den Arbeiten zum Verhalten ungeordneter korrelierter Elektronen, die den Hauptteil unserer Aktivitäten im Berichtszeitraum bildeten, haben wir auch begonnen, die entwickelten numerischen Methoden auf ähnlich gelagerte Probleme anzuwenden: korrelierte Elektronen in Quanten-Nanostrukturen sowie das Zusammenspiel zwischen Unordnung und itinerantem Antiferromagnetismus.

Die folgenden numerischen Probleme traten auf: Monte-Carlo-Simulationen in hochdimensionalen Räumen mit komplizierter Energielandschaft, Optimierungsverfahren in ebensolchen Räumen, Diagonalisierung großer Matrizen, und zwar sowohl schwach besetzter als auch voll besetzter. Zu den Monte-Carlo- und Optimierungsverfahren besteht eine enge Zusammenarbeit mit den Teilprojekten C3 und C4 sowie mit Dr. Möbius vom Institut für Werkstofforschung Dresden, mit dem wir auch über die physikalischen Eigenschaften klassischer ungeordneter Vielteilchensysteme kollaboriert haben. Zu den Eigenschaften ungeordneter Elektronensysteme besteht eine enge Zusammenarbeit mit den Teilprojekten C1 und C6. Außerdem haben wir von den Erfahrungen der Teilprojekte A3 und A4 bei der Lösung großer Gleichungssysteme und der Diagonalisierung großer Matrizen profitiert.

2.3.1 Teilaufgabe „Damage-Spreading-Simulationen“

Die Damage-Spreading-Methode [9, 10, 11] ist eine besondere Variante der Monte-Carlo-Simulation. Anstelle eines einzelnen Systems beobachtet man mehrere Systeme gleichzeitig, die sich unter dem Einfluß des gleichen thermischen Rauschens entwickeln, aber von verschiedenen Anfangsbedingungen gestartet sind. Aus den Unterschieden der Zustände der beiden Systeme kann man Schlüsse auf die dynamischen Eigenschaften ziehen [12, 13]. Die zentrale Observable in derartigen Simulationen ist der Hamming-Abstand D (Schaden), der den Unterschied zwischen den Besetzungszahlen $n_i^{(1)}$ und $n_i^{(2)}$ zweier Systeme mißt: $D = \frac{1}{N}\sum_i |n_i^{(1)} - n_i^{(2)}|$. (N bezeichnet die Zahl der Gitterplätze des Systems.) In Abhängigkeit vom Zeitverlauf von D ergeben sich zwei grundlegende Szenarien. Der Schaden kann ausheilen, $D \to 0$ für $t \to \infty$ oder er kann sich über das System ausbreiten, $D \to const$ für $t \to \infty$. In Abhängigkeit von den äußeren Parametern kommt es nun zu dynamischen Phasenübergängen zwischen regulärem und chaotischem Verhalten. Diese Phasenübergänge sind einerseits selbst interessante Nichtgleichgewichtsphänomene, andererseits möchte man aus ihrer Analyse Rückschlüsse auf das dynamische Verhalten des studierten Systems selbst treffen [14].

Wir hatten in der ersten Förderperiode eine parallele Implementation des Damage-Spreading für das klassische Coulomb-Glas und für Ising-Spinsysteme entwickelt [15] und damit die Eigenschaften von Damage-Spreading-Übergängen in verschiedenen Systemen untersucht. Gegen Ende der ersten Förderperiode und zu Beginn des Berichtszeitraumes stellte sich allerdings heraus, daß sich Damage-Spreading nur schlecht zur Charakterisierung der intrinsischen Dynamik des Vielteilchensystems eignet. Stattdessen wird es durch Details der jeweiligen Implementation der Dynamik beeinflußt. Aus diesem Grunde wurden im Berichtszeitraum nur noch einige abschließende Rechnungen zur Beschreibung der Damage-Spreading-Übergänge selbst durchgeführt. Danach wurde diese Teilaufgabe abgeschlossen.

2.3.2 Teilaufgabe „Niederenergetische Zustände klassischer Systeme“

Die Bestimmung eines vollständigen Satzes niederenergetischer Zustände des klassischen Coulomb-Glases ist ein kombinatorisches Optimierungsproblem, verwandt z.B. mit dem Handlungsreisenden-Problem. Die Eigenzustände selbst sind von vornherein bekannt, weil der Hamiltonoperator in der Basis der Platzzustände diagonal ist. Das kombinatorische Problem besteht im Finden der *nieder*energetischsten unter der sehr großen Zahl aller Zustände. Ist ein derartiger Satz niederenergetischer Zustände erst einmal gefunden, können daraus sämtliche Tieftemperatur-Eigenschaften des Systems berechnet werden.

Im Berichtszeitraum haben wir die in Zusammenarbeit mit Dr. Möbius vom Institut für Werkstofforschung Dresden und mit den Teilprojekten C3 und C4 die in der ersten Förderperiode entwickelten Optimierungsalgorithmen weiter verbessert. Diese Algorithmen haben wir benutzt, um die niederenergetischen Anregungen des klassischen Coulomb-Glases für Systeme mit bis zu 1000 Teilchen zu bestimmen. Dies erlaubte eine detailierte Untersuchung von Nichtergodizitätseffekten im klassischen Coulomb-Glas, um zu entscheiden, ob das glasartige Verhalten [18] im Coulomb-Glas-Modell ein Gleichgewichtsphänomen [19] ist, oder ähnlich zu strukturellen Gläsern ein rein kinetisches Phänomen [20].

2.3.3 Teilaufgabe „Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung“

Die Bestimmung der niederenergetischen Zustände ist in einem Quanten-Vielteilchensystem eine viel schwierigere Aufgabe als in einem klassischen Vielteilchensystem, da die Eigenzustände selbst unbekannt sind. Sie müssen vielmehr erst durch eine Diagonalisierung des Hamilton-Operators bestimmt werden. Da die Größe des zugrunde liegenden Hilbertraumes exponentiell mit der Zahl der Teilchen wächst, und die Matrizen nicht notwendig sehr schwach besetzt sind, können die üblichen Diagonalisierungsverfahren nur für extrem kleine Systeme eingesetzt werden. Am Ende der ersten Förderperiode hatten wir deshalb eine effektive Methode, die Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung (HFD), zur Bestimmung der niederenergetischen Eigenzustände eines ungeordneten Quanten-Vielteilchensystems entwickelt. Dieses Verfahren beruht auf einer Diagonalisierung des Hamiltonoperators in einem geeignet gewählten Unterraum des Hilbertraumes, der aus Hartree-Fock-Eigenzuständen aufgebaut wird. Es ist verwandt mit der quantenchemischen Methode der Konfigurationswechselwirkung.

Im Berichtszeitraum haben wir die Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung auf Elektronen im äußeren Magnetfeld verallgemeinert. Außerdem haben wir Spinfreiheitsgrade einbezogen und so die Voraussetzungen zum Studium magnetischer Phänomene geschaffen. Darüber hinaus haben wir die Implementation der Methode wesentlich verbessert.

Mit daraus resultierenden Programmen haben wir im Berichtszeitraum umfangreiche Simulationen des Quanten-Coulomb-Glases in ein, zwei und drei Raumdimensionen durchgeführt und dabei verschiedene Lokalisierungs- und Transporteigenschaften untersucht, insbesondere den Kubo-Leitwert, die Ladungssteifheit, die Rückkehrwahrscheinlichkeit von Einteilchen-Anregungen sowie Lokalisierungseigenschaften im Fock-Raum.

2.3.4 Teilaufgabe „Korrelierte Elektronen in Quanten-Nanostrukturen“

Neben den Arbeiten zum Verhalten ungeordneter korrelierter Elektronen, die den Hauptteil unserer Aktivitäten im Berichtszeitraum bildeten, haben wir auch begonnen, die entwickelten numerischen Methoden auf ähnlich gelagerte Probleme anzuwenden. Eines dieser Probleme ist das Verhalten von korrelierten Elektronen in Quanten-Nanostrukturen. Wir haben dabei die Geometrie der Nanostruktur durch ein räumliches Modellpotential beschrieben, im Falle eines Quantenpunktes durch ein parabolisches Potential. Die Elektronen in der Struktur werden dagegen voll quantenmechanisch behandelt, hierbei kommt wieder die Methode der Hartree-Fock-basierten Diagonalisierung zum Einsatz.

Im Berichtszeitraum haben wir zunächst die Methode zur Beschreibung von Quanten-Nanostrukturen angepaßt. Als erstes Beispiel haben wir das Spektrum und die Ladungsdichteverteilung von Elektronen in einem parabolischen Quantenpunkt untersucht. Dieses System ist auch physikalisch sehr interssant. In Experimenten [21] an derartigen Quantenpunkten findet man sogenanntes „bunching“ der Additionsenergien, d.h. das Auftreten von Regionen negativen chemischen Potentials. In solchen Regionen gehen die Elektronen nicht einzeln in den Quantenpunkt, wenn man die Gatespannung ändert, sondern paarweise oder sogar in größeren Gruppen. Analoge Resultate wurden auch für klassische Punktladungen gefunden [22]. Ziel unserer Rechnungen war es, zu bestimmen, unter welchen Umständen „bunching“ auftritt und den Mechanismus dafür zu verstehen.

2.3.5 Teilaufgabe „Quanten-Magnetismus ungeordneter Elektronen“

Um den Einfluß von Unordnung auf die magnetischen Eigenschaften korrelierter Elektronen zu untersuchen, haben wir neben mikroskopischen Modellen wie dem Quanten-Coulomb-Glas auch effektive Feldtheorien für die magnetischen Freiheitsgrade simuliert. Wir wollen dabei insbesondere die Frage beantworten, inwieweit die Unordnung eine antiferromagnetische Phase zerstört. Bhatt und Lee [23] haben gezeigt, daß genügend starke Unordnung im Falle *lokalisierter* Spins den Antiferromagneten immer zerstört und stattdessen zur Bildung einer Random-Singlet-Phase führt. Bhatt und Fisher [24] haben später argumentiert, daß die gleiche Überlegung auch auf itinerante Antiferromagnete zutrifft. Analytische Theorien auf der Basis der perturbativen [25] Renormierungsgruppe zeigen zwar, daß der konventionelle Phasenübergang zerstört wird, liefern aber keine Aussage über das Schicksal des Antiferromagnetismus.

Im Berichtszeitraum haben wir daher begonnen, das Problem von Unordnung in itineranten Antiferromagneten numerisch zu untersuchen. Die Beantwortung der obigen Fragen erfordet das Studium sehr großer Längenskalen. Aus diesem Grunde ist eine vollständig mikroskopische Simulation des antiferromagnetischen Quantenphasenüberganges ungeordneter itineranter Elektronen nicht möglich. Zur Zeit entwickeln und testen wir deshalb eine Quanten-Monte-Carlo-Simulationsmethode für eine effektive Feldtheorie der antiferromagnetischen Fluktuationen in einem itineranten Elektronensystem.

Literaturverzeichnis

[1] A. L. Efros, Sol. State Commun. **96**, 183 (1995).

[2] J. Talamantes, M. Pollak, and L. Elam, Europhys. Lett. **35**, 511 (1996).

[3] F. Epperlein, M. Schreiber und Th. Vojta: *Quantum Coulomb glass within the Hartree-Fock approximation*, Phys. Rev. B 56, 5890 (1997).

[4] P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985); D. Belitz and T. R. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys. **66**, 261 (1994).

[5] A. L. Efros and B. I. Shklovskii, J. Phys. C **8**, L49 (1975).

[6] A. L. Efros, J. Phys. C **9**, 2021 (1976).

[7] M. Pollak und M. Ortuño, in A. L. Efros und M. Pollak (Hrsg.): *Electron-Electron Interaction in Disordered Solids*, North-Holland, Amsterdam (1985), S. 287

[8] A. L. Efros und B. I. Shklovskii, in A. L. Efros und M. Pollak (Hrsg.): *Electron-Electron Interaction in Disordered Solids*, North-Holland, Amsterdam (1985), S. 409

[9] A. Kauffman, J. Theor. Biol. **22**, 437 (1969).

[10] B. Derrida and Y. Pomeau, Europhys. Lett. **1**, 45 (1986); B. Derrida and G. Weisbuch, Europhys. Lett. **4**, 657 (1987).

[11] H.E. Stanley, D. Stauffer, J. Kertesz, and H.J. Herrmann, Phys. Rev. Lett. **59**, 2326 (1987).

[12] A. Coniglio, L. de Arcangelis, H.J. Herrmann, and N. Jan, Europhys. Lett. **8**, 315 (1989).

[13] S.C. Glotzer, P.H. Poole, and N. Jan, J. Stat. Phys. **68**, 895 (1992).

[14] H. Hinrichsen, J. S. Weitz, and E. Domany, J. Stat. Phys. 88, 617 (1997)

[15] T. Wappler, T. Vojta und M. Schreiber, Phys. Rev. B 55, 6272 (1997).

[16] M. Mochena und M. Pollak, Phys. Rev. Lett. **67**, 109 (1991).

[17] M. Schreiber und K. Tenelsen, Europhys. Lett. **21**, 697 (1993).

[18] siehe z.B. M. Pollak, Phil. Mag. B **65**, 657 (1992) für mögliche „Glas-Szenarien“ im Coulomb-Glas.

[19] E. R. Grannan und C. C. Yu, Phys. Rev. Lett. **71**, 3335 (1993).

[20] J. H. Davies, P. A. Lee und T. M. Rice, Phys. Rev. B **29**, 4260 (1984).

[21] N.B. Zhitenev, R.C. Ashoori, L.N. Pfeiffer, and K.W. West, Phys. Rev. Lett. **9**, 2308 (1997).

[22] A.A. Koulakov and B.I. Shklovskii, Phys. Rev. B **57**, 2352 (1998).

[23] R.N. Bhatt und P.A. Lee, Phys. Rev. Lett. **48**, 344 (1982).

[24] R.N. Bhatt und D.S. Fisher, Phys. Rev. Lett. **68**, 3072 (1992).

[25] R. Narayanan, T. Vojta, D. Belitz und T.R. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. **82**, 5132 (1999).

[26] N. Rajewsky and M. Schreckenberg, Physica A **245**, 139 (1997).

[27] A. Möbius, A. Neklioudov, A. Diaz-Sanchez, K.H. Hoffmann, A. Fachat und M. Schreiber, Phys. Rev. Lett. **79**, 4297 (1997).

[28] G. Montambaux in *Quantum Fluctuations*, Les Houches, Session LXIII, hrsg. von E. Giacobino, S. Reynaud, and J. Zinn-Justin, Elsevier, Amsterdam (1995).

[29] D. Popovich, A. B. Fowler und S. Washburn, Phys. Rev. Lett. **79**, 1543 (1997); D. Simonian, S. V. Kravchenko und M. P. Sarachik, *ibid.* **79**, 2304 (1997).

[30] T. Vojta, F. Epperlein und M. Schreiber, phys. stat. sol. (b) **205**, 53 (1998).

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe „Damage-Spreading-Simulationen“

In der ersten Förderperiode hatten wir eine parallele Implementierung des Damage-Spreading-Algorithmus entwickelt und damit ausführliche Testrechnungen in Spinsystemen mit und ohne Unordnung durchgeführt. Im Mittelpunkt standen zunächst die Eigenschaften der dabei auftretenden dynamischen Damage-Spreading-Übergänge. Außerdem hatten wir begonnen, Damage-Spreading im klassischen Coulomb-Glas zu simulieren.

Gegen Ende der ersten Förderperiode und zu Beginn des Berichtszeitraumes haben wir uns verstärkt der Frage gewidmet, inwieweit man Damage-Spreading zur Charakterisierung der intrinsischen Dynamik eines kooperativen Systems benutzen kann. Dazu haben wir umfangreiche Simulationen mit verschiedenen Implementationen des Damage-Spreading-Algorithmus durchgeführt. Dabei zeigte sich, daß das Verhalten des Schadens sehr empfindlich von Details des gewählten Algorithmus abhängt und nicht nur von den lokalen Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen zwei Zuständen. In [VS98, VS99] haben wir beispielsweise gezeigt, daß die Ausbreitung des Schadens von der Reihenfolge der Gitterplätze innerhalb des Monte-Carlo-Schrittes abhängt (ein ähnliches Verhalten findet sich auch in gewissen zellulären Automaten [26]). Ein typisches Ergebnis ist dabei im Bild 2.1 dargestellt. Analoge Abhängigkeiten existieren auch bezüglich der genauen Verwendung

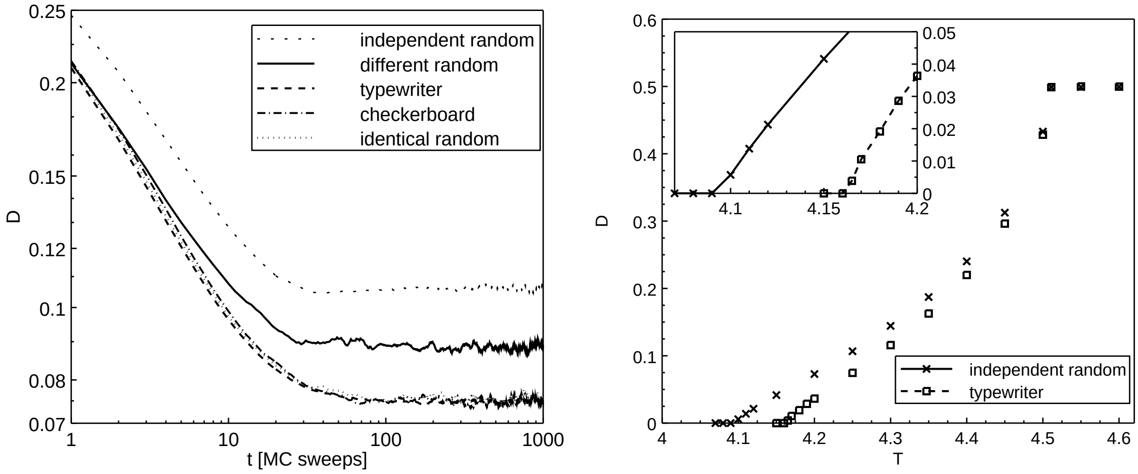


Abbildung 2.1: Abhängigkeit des Damage-Spreading im Ising-Modell von der Reihenfolge in der die Gitterplätze während der Simulation durchlaufen werden. Linkes Diagramm: Zeitverlauf das Hammingabstandes D, rechtes Diagramm: Stationärer Hammingabstand als Funktion der Temperatur (aus [VS98]).

der Zufallszahlen in der Simulation [14].

Generell gilt, daß solche Abhängigkeiten von Details des dynamischen Algorithmus in allen Nichtgleichgewichtsprozessen vorkommen können. Im Falle des Damage-Spreading war diese Erkenntnis trotzdem etwas unerwartet, da jede der Kopien im thermischen Gleichgewicht ist. Insgesamt ist Damage-Spreading damit ein interessantes Nichtgleichgewichts-Phänomen. Es hat sich aber als wenig geeignet zur Charakterisierung der Dynamik eines *einzelnen* Systems herausgestellt. Deshalb haben wir die Teilaufgabe „Damage-Spreading“ nach 1999 nicht weiter fortgeführt.

2.4.2 Teilaufgabe „Niederenergetische Zustände klassischer Systeme“

In der ersten Förderperiode hatten wir in Zusammenarbeit mit Dr. Möbius vom IfW Dresden und den Teilprojekten C3 und C4 effiziente Algorithmen zur kombinatorischen Optimierung entwickelt [27]. Sie bestehen aus wiederholtem Aufheizen und Abkühlen des Systems (*thermal cycling*), verbunden mit lokaler Suche in der Nähe der Energieminima.

Im Berichtszeitraum ist es gelungen, diese Algorithmen nochmals deutlich zu verbessern. Die Grundidee des neuen Verfahrens, das in [MFMS99] dargestellt ist, besteht darin, aus mehreren bereits gefundenen lokalen Energieminima eine neue Konfiguration mit eventuell niedrigerer Energie zu kombinieren (*iterative partial transcription – IPT*). Im Coulomb-Glas ist dies äquivalent zum Umbesetzen ganzer Cluster von stark gebundenen Gitterplätzen. In [MFMS99] wurde das neue Verfahren zunächst am Beispiel des Handelsreisenden-Problems getestet. Dabei konnte gegenüber den in der ersten Förderperiode verwendeten Methoden eine Beschleunigung um mehr als eine Größenordnung erzielt werden. Typische Resultate sind in Abbildung 2.2a dargestellt. Eine weitere drastische Verbesserung läßt sich durch

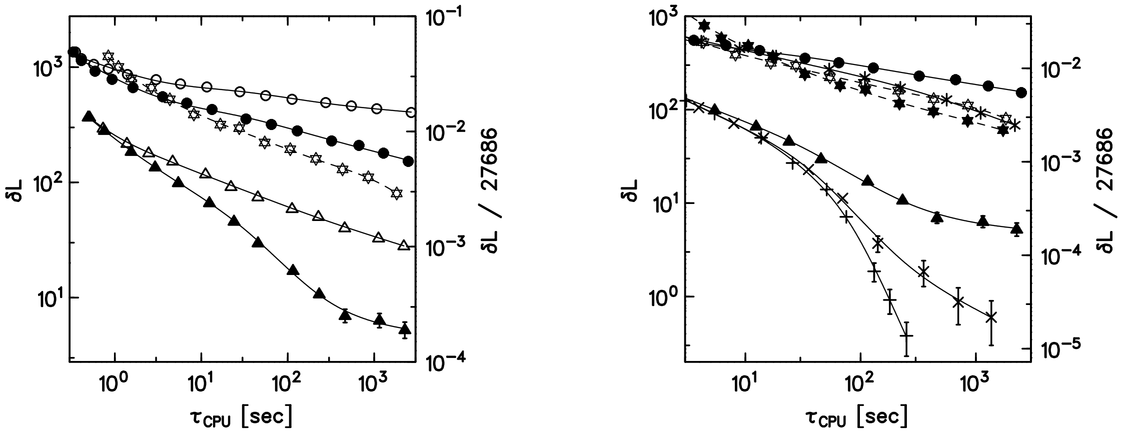


Abbildung 2.2: Linkes Diagramm: Abweichung der Streckenlänge im Handelsreisenden-Problem vom Optimum als Funktion der Rechenzeit für verschiedene Algorithmen. Die vollen Symbole sind jeweils mit, die leeren ohne IPT bestimmt worden. Rechtes Diagramm: Einfluß der parallelen Suche und Transkription. Die untersten drei Kurven demonstrieren den Gewinn für Archivgrößen von 1, 3 und 10 Zuständen. (aus [MFMS99]).

Parallelisierung des Aufheizens und der Transkription der lokalen Minima erreichen, ausgehend von einem Archiv von lokalen Minima (siehe Abbildung 2.2b). Unser neuer Algorithmus mit paralleler iterativer Transkription ist für kleinere Probleme (weniger als 1000 Städte) etwa genauso schnell wie die besten verfügbaren alternativen Verfahren, für größere Probleme dagegen sogar deutlich schneller, was vor allem auf die große Robustheit unseres Algorithmus zurückzuführen ist.

Neben der Verbesserung des Algorithmus haben wir uns ausführlich mit der spezifischen Wärme des klassischen Coulomb-Glases beschäftigt, und dabei die vorläufigen Ergebnisse aus der ersten Förderperiode deutlich erweitert und vertieft. Besondere Aufmerksamkeit haben wir dabei nichtergodischen Effekten in der spezifischen Wärme gewidmet. In [DMONS00] haben wir dazu zunächst einen vollständigen Satz von niederenergetischen Zuständen bestimmt. Die Dynamik des Systems kann durch einen Graphen dargestellt werden, der durch die relevanten Übergänge zwischen diesen Zuständen gebildet wird. Die Ergodizität bzw. Nichtergodizität hängt dann von der Konnektivität dieses Graphen ab. Zur Quantifizierung der Nichtergodizität definierten wir den Parameter $q(T, \tau_m) = c(T, \tau_m)/c(T, \infty)$, der das Verhältnis der spezifischen Wärme bei Messzeit τ_m zum Langzeitlimes der spezifischen Wärme beinhaltet. Typische Resultate für q sind in Abbildung 2.3 gezeigt.

Die spezifische Wärme des klassischen Coulomb-Glases relaxiert extrem langsam. Schon für ein System mit nur 216 Gitterplätzen umfaßt das Spektrum der Relaxationszeiten mehr als 10 Größenordnungen. Für ein System mit 1000 Plätzen steigt dies bis auf 15 Größenordnungen an. Insgesamt können diese Resultate als Beweis

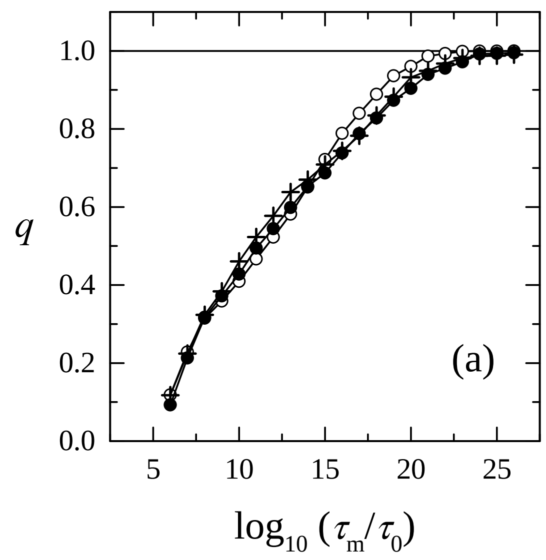


Abbildung 2.3: Nichtergodizitätsparameter q als Funktion der Meßzeit τ_m für Systeme mit 216, 512 und 1000 Plätzen. (aus [DMONS00]).

für glasartiges Verhalten durch Einfrieren der Dynamik auf den experimentellen Zeitskalen gewertet werden. Die Frage, ob es eine scharfe Übergangstemperatur gibt, die dieses Verhalten von gewöhnlichem ergodischen trennt, konnte bisher nicht endgültig beantwortet werden.

2.4.3 Teilaufgabe „Transporteigenschaften ungeordneter Quantensysteme"

Unsere zentrale Methode zur Untersuchung ungeordneter Quanten-Vielteilchensyteme im Berichtszeitraum war die Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung (HFD), deren Grundzüge wir in der ersten Förderperiode entwickelt hatten [VES98]. Dieses Verfahren beruht auf einer Diagonalisierung des Hamiltonoperators in einem Unterraum des Hilbertraumes, der aus den niederenergetischen Hartree-Fock-Eigenzuständen aufgebaut wird. Details dieser Methode sind in [VES99] dargestellt. Abbildung 2.4 zeigt beispielsweise die Grundzustandsenergie als Funktion der Dimension des verwendeten Unterraumes und im Vergleich mit dem exakten Resultat. Die Konvergenz der Grundzustandsenergie ist dabei näherungsweise exponentiell. Analoge Aussagen gelten auch für andere Observable.

Nachdem wir in den Arbeiten [VES98, VE98] den Leitwert ungeordneter korrelierter spinloser Fermionen in zwei und drei Raumdimensionen berechnet hatten, dehnten wir diese Untersuchungen im Berichtszeitraum auch auf eindimensionale Systeme aus [SEV99]. Abbildung 2.5 zeigt den typischen Leitwert einer eindimensionalen Kette von 25 Gitterplätzen als Funktion der Wechselwirkungsstärke. Dabei kann man, in Abhängigkeit von der Unordnungsstärke, zwei qualitativ verschiedene Regimes unterscheiden: Im lokalisierten Bereich (niedriger Leitwert) erhöht sich der Leitwert zunächst mit Einschalten der Wechselwirkung. Erst bei sehr starker Wechselwirkung fällt der Leitwert schließlich ab. Dies ist ein Vorbote einsetzen-

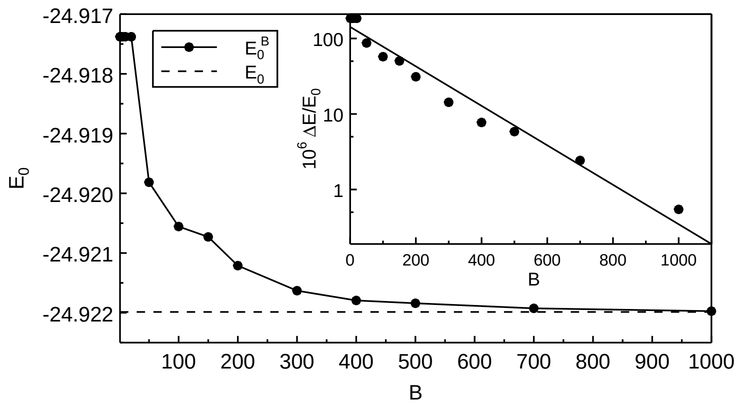


Abbildung 2.4: Grundzustandsenergie E_0 als Funktion der Dimension B des eingeschränkten Hilbertraumes in der HFD-Methode (der volle Hilbertraum hat eine Dimension von 12870) für ein System von 8 Elektronen auf 16 Gitterplätzen. Die gestrichelte Linie ist das exakte Resultat. (aus [VES99]).

der Wigner-Glas- oder Wigner-Kristall-Bildung. Dagegen führt im Falle schwacher Unordnung (hoher Leitwert) jede Elektron-Elektron-Wechselwirkung zu einer Verringerung des Leitwertes.

Es ist bekannt [28], daß in einem ungeordneten System ein enger Zusammenhang zwischen dem Leitwert und der Ladungssteifheit (zweite Ableitung der Grundzustandsenergie nach dem magnetischen Fluß) existiert. Eine numerisch einfachere, aber verwandte Größe ist die Phasensensitivität des Grundzustandes, definiert als Differenz der Grundzustandsenergien bei periodischen und antiperiodischen Randbedingungen. Zur Berechnung dieser Größen erweiterten wir den HFD-Algorithmus in [EVS99] auf Elektronen in einem äußeren Magnetfeld. Wir fanden, daß sich die wechselwirkungsbedingte Erhöhung des Transports im stark lokalisierten Regime auch in der Phasensensitivität wiederspiegelt, allerdings ist der Effekt vergleichsweise schwächer. Eine direkte Berechnung der Ladungssteifheit scheiterte bisher an der erforderlichen Genauigkeit zur Berechnung der zweiten Ableitung der Grundzustandsenergie.

Im letzten Jahr haben wir vor allem daran gearbeitet, unsere Untersuchungen von spinlosen Fermionen auf Elektronen mit Spin zu erweitern. Dies ist insbesondere auch deshalb wichtig, weil die Spinfreiheitsgrade eine zentrale Rolle bei den vermuteten Metall-Isolator-Übergängen in zweidimensionalen Elektronengasen spielen [29]. In ersten Rechnungen [VEKS00] haben wir allerdings gefunden, daß das qualitative Verhalten des Leitwertes für Elektronen mit Spin dem von spinlosen Fermionen gleicht. Die wechselwirkungsinduzierte Erhöhung des Leitwertes im lokalisierten Bereich ist für Elektronen mit Spin aber wesentlich stärker.

Um einen möglichst umfassenden Einblick in die Transporteigenschaften ungeordneter korrelierter Elektronen zu erhalten, haben wir auch die Lokalisierungseigenschaften von Einteilchenanregungen untersucht. In der Arbeit [30] hatten wir die Rückkehrwahrscheinlichkeit als ein Lokalisierungsmaß vorgeschlagen. Diese Grösse enthält jedoch neben der Information über Lokalisierung auch Information über den Zerfall von Quasiteilchen. Um die reine Lokalisierungsinformation zu erhal-

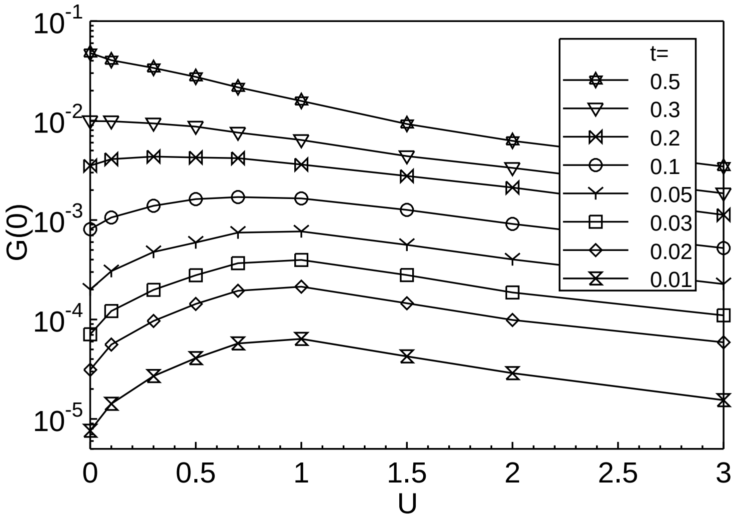


Abbildung 2.5: Leitwert G einer eindimensionalen Quanten-Coulomb-Glas-Kette als Funktion der Wechselwirkungsstärke U für verschiedene Hopping-Matrixelemente t (aus [SEV99]).

ten, normieren wir deshalb die Rückkehrwahrscheinlichkeit mit dem Quasiteilchengewicht [EKSUV01, VS01]. Abbildung 2.6 zeigt diese beiden Größen als Funktion der Wechselwirkungsstärke. Dabei ist zu sehen, daß das Quasiteilchengewicht zunächst mit zunehmender Wechselwirkung abnimmt. Es erreicht etwa dort ein Minimum, wo im lokalisierten Bereich die stärkste Erhöhung des Transports erfolgt. Für noch stärkere Wechselwirkung steigt das Quasiteilchengewicht wieder an. Im Limes $U \to \infty$ sollte es, abgesehen von symmetriebedingten Entartungen, wieder den Wert 1 erreichen. Ein analoges Verhalten zeigt auch die Partizipationszahl des Vielteilchen-Grundzustands im Fock-Raum, die wir in [EKSUV01] ebenfalls untersucht haben.

Abbildung 2.6 zeigt auch, daß die normierte Rückkehrwahrscheinlichkeit generell mit zunehmender Wechselwirkungsstärke zunimmt, die Einteilchenanregungen

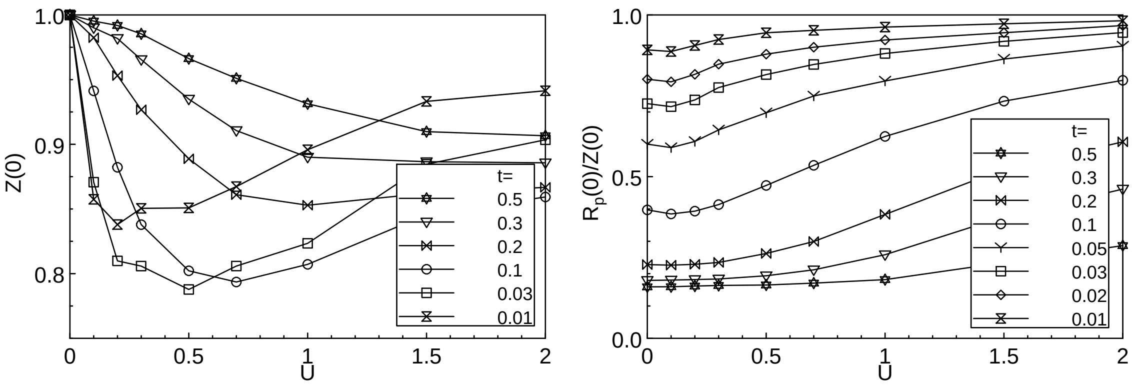


Abbildung 2.6: Quasiteilchengewicht Z und normierte Rückkehrwahrscheinlichkeit R_p/Z als Funktion der Wechselwirkungsstärke U für verschiedene Hoppingmatrixelemente t (aus [EKSUV01]).

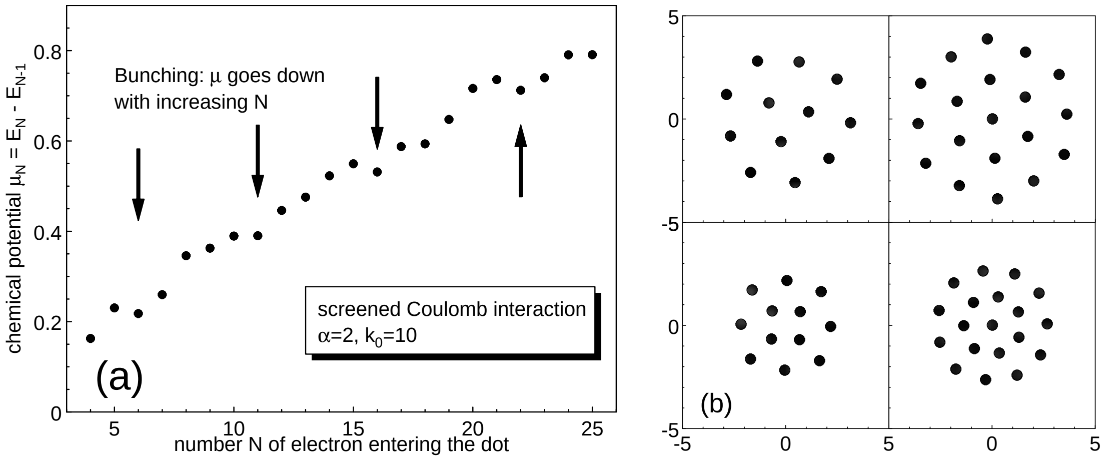


Abbildung 2.7: (a) Additionsspektrum und (b) räumliche Ladungsverteilung (oben ohne und unten mit Abschirmung) für klassische Punktladungen in einem parabolischen Potential. (aus [SSV01]).

werden also stärker lokalisiert. Für kleine Hopping-Matrixelemente und Wechselwirkungsstärke gibt es eine geringe Delokalisierung, die aber wesentlich schwächer ausfällt als die korrespondierende Erhöhung des Leitwertes (siehe Abb. 2.5). Die Ursache dafür ist die Coulomb-Lücke in der Einteilchenzustandsdichte, während die für den Leitwert verantwortlichen Teilchen-Loch-Anregungen eine derartige Lücke nicht besitzen.

2.4.4 Teilaufgabe „Korrelierte Elektronen in Quanten-Nanostrukturen"

Im Berichtszeitraum haben wir zunächst die Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung (HFD) auf das Problem korrelierter Elektronen in einem parabolischen Quanten-Punkt übertragen. Da die Elektronendichte in diesen Systemen relativ gering ist, spielt die lange Reichweite der Coulomb-Wechselwirkung unter Umständen eine wichtige Rolle. Wir arbeiten deshalb mit Impuls-Basiszuständen, da sich damit die Coulomb-Matrixelemente leicht berechnen lassen.

Mit dem resultierenden Programm haben wir die Ladungsdichteverteilung und das Additionsspektrum eines parabolischen Quanten-Punktes mit bis zu 20 Elektronen berechnet und mit entsprechenden Resultaten für klassische Punktladungen verglichen. Im klassischen Fall (siehe Abb. 2.7) tritt dabei bunching, d.h. ein negatives chemisches Potential, immer dann auf, wenn sich die räumliche Ladungsstruktur bei Addition eines weiteren Elektrons global ändert. Die voll quantenmechanischen Ergebnisse hängen wesentlich von der relativen Stärke der Coulomb-Wechselwirkung ab (die im Experiment indirekt, durch Änderung der Krümmung des parabolischen Potentials eingestellt werden kann). Bei geringer Stärke der Wechselwirkung ist die Situation sehr ähnlich der in der Atomphysik. Man erhält eine Schalenstruktur, die von den nicht-wechselwirkenden Eigenzuständen dominiert ist. Die Wechselwirkung vergrößert die Ausdehnung der Ladungswolke etwas, führt aber nicht zu globaler Umorganisation (siehe Abb. 2.8) In einer solchen Si-

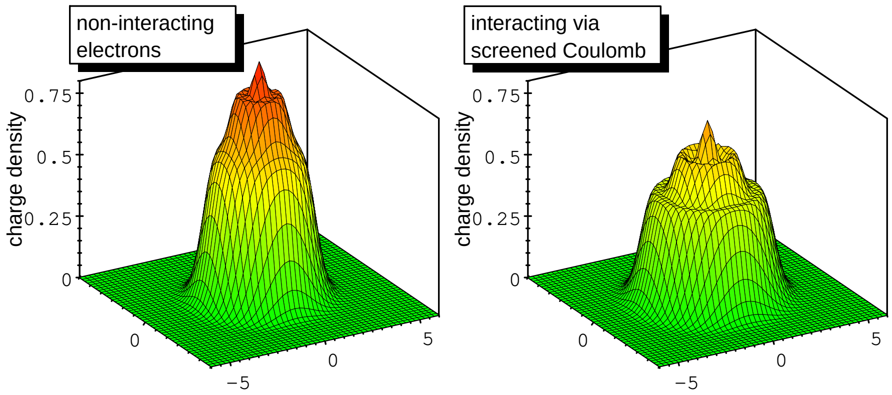


Abbildung 2.8: Räumliche Ladungsverteilung für 15 Elektronen im wechselwirkungsfreien bzw. schwach wechselwirkenden Fall (aus [M00vss]).

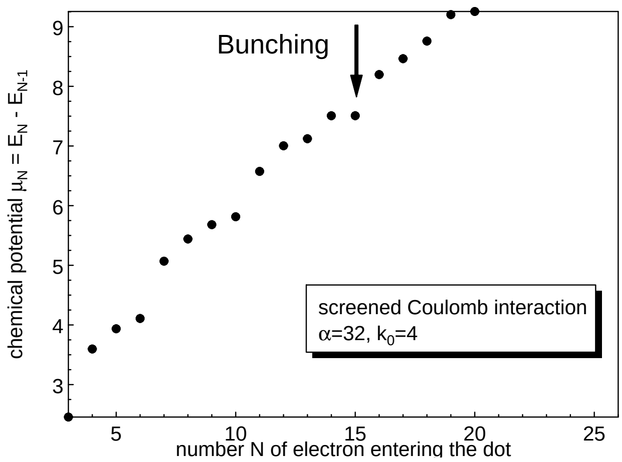


Abbildung 2.9: Additionsspektrum eines Quantenpunktes im Falle sehr starker Coulomb-Wechselwirkung (aus [SSV01]).

tuation haben wir auch kein Bunching gefunden.

Wird die Wechselwirkung dagegen genügend stark, verhält sich das quantenmechanische System so ähnlich wie klassische Punktladungen. Das Hinzufügen eines weiteren Elektrons führt unter Umständen zu einer globalen räumlichen Reorganisation der Elektronen. In diesen Fällen findet man folglich auch Regionen negativen chemischen Potentials, wie in Abb. 2.9 zu sehen ist. Allerdings passiert dies in unseren Rechnungen erst bei wesentlich höheren relativen Wechselwirkungsstärken als in den Experimenten [21]. Die wahrscheinlichste Ursache für diese Diskrepanz ist, daß in unseren Rechnungen die Anzahl der Elektronen im Quanten-Punkt (bis 20) immer noch wesentlich kleiner ist als im Experiment, wo sich mehrere hundert Elektronen darin befinden.

Literaturverzeichnis

Referierte Originalarbeiten

[DMONS00] A. Diaz-Sanchez, A. Möbius, M. Ortuno, A. Neklioudov, M. Schreiber, *Nonergodic effects in the Coulomb glass: Specific heat*, Phys. Rev. B 62, 8030 (2000)

[EKSUV01] F. Epperlein, S. Kilina, M. Schreiber, S. Uldanov und T. Vojta: *Fock space localization and conductance of disordered interacting electrons*, angenommen bei Physica B

[EVS99] F. Epperlein, T. Vojta, und M. Schreiber: *Crossover from interaction induced localization to delocalization in disordered electron systems*, Ann. Phys. (Leipzig) 8 (1999), SI–61–4

[M99] A. Möbius, A. Diaz-Sanchez, B. Freisleben, M. Schreiber, A. Fachat, K.H. Hoffmann, P. Merz, A. Neklioudov, *Two physically motivated algorithms for combinatorical optimization: thermal cycling and iterative partial transcription*, Comp. Phys. Commun. 121–122, 34–36 (1999)

[MFMS99] A. Möbius, B. Freisleben, P. Merz, M. Schreiber, *Combinatorical optimization by iterative partial transcription*, Phys. Rev. E 59, 4667 (1999)

[RSV99] R.A. Römer, M. Schreiber und T. Vojta: *Two interacting particles in a random potential: Numerical calculations of the interaction matrix elements*, phys. stat. sol. (b) **211**, 681–9 (1999)

[RSV01] R.A. Römer, M. Schreiber und T. Vojta: *Disorder and two-particle interaction in low-dimensional quantum systems*, Physica E **9**, 397–404 (2001)

[SEV99] M. Schreiber, F. Epperlein und T. Vojta: *Transport in disordered interacting systems: Numerical results for one-dimensional spinless electrons*, Physica A **266**, 443–9 (1999)

[SSV01] M. Schreiber, J. Siewert und T. Vojta: *Interacting electrons in parabolic quantum dots: energy levels, addition energies, and charge distributions*, angenommen bei Int. J. Mod. Phys. B

[VE98] T. Vojta und F. Epperlein, *Electronic transport in disordered interacting systems*, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 493 (1998)

[VEKS00] T. Vojta, F. Epperlein, S. Kilina und M. Schreiber: *From localization to delocalization in the quantum Coulomb glass*, phys. stat. sol. (b) **218**, 31–34 (2000)

[VES98] T. Vojta, F. Epperlein und M. Schreiber: *Do interactions increase or reduce the conductance of disordered electrons? It depends!*, Phys. Rev. Lett. **81**, 4212 (1998).

[VES99] T. Vojta, F. Epperlein und M. Schreiber: *Hartree-Fock based diagonalization: an efficient method for simulating disordered interacting electrons*, Comp. Phys. Commun. 121–122, 489-92 (1999)

[VS98] T. Vojta und M. Schreiber, *Differences between sequential and random order of updates in damage spreading simulations*, Phys. Rev. E **58**, 7998–8001 (1998).

[VS01] T. Vojta und M. Schreiber, *Quantum Coulomb glass*, angenommen bei Phil. Mag. B

Übersichtarbeiten

[V00a] T. Vojta: *Quantum phase transitions in electronic systems*, Ann. Phys. (Leipzig) **9**, 403–40 (2000)

[V00b] T. Vojta: *Quantum phase transitions*, in Proc. WE-Heraeus Summer School on Statistical Physics, Chemnitz (2000), wird erscheinen im Springer-Verlag, cond-mat/0010285

[V01] T. Vojta: Quantenphasenübergänge – Von Ordnung zu Unordnung durch Quantenfluktuationen, Physik in unserer Zeit **32**, 38–43 (2001)

Qualifikationsarbeiten

[E99] F. Epperlein, *Numerische Simulation des Transports in ungeordneten Vielelektronensystemen*, Dissertation, TU Chemnitz (1999)

[V99] T. Vojta, *Quantum and classical phase transitions in electronic systems*, Habilitationsschrift, TU Chemnitz (1999)

Proceedings

[SV00] M. Schreiber und T. Vojta: *Condensed matter physics on the computer*, in Proc. Int. Summer School on Teaching Computational Physics, Trest (2000)

[VS99] T. Vojta und M. Schreiber, *Damage spreadig in random field systems, extended abstract*, Comp. Phys. Commun. 121–122, 750 (1999)

Konferenzbeiträge (sortiert chronologisch)

[T98sv] M. Schreiber und T. Vojta, *Do interactions enhance or reduce transport in a disordered electron system?*, 2nd TMR Meeting Phase-Coherent Dynamics in Hybrid Nanostructures, Ioannina, Griechenland (1998)

[P98sv] M. Schreiber und T. Vojta, *Do interactions enhance or reduce transport in a disordered electron system?*, Int. Conf. Percolation and disordered systems, Schlo Rauischholzhausen, Giessen (1998)

[S98mndhs] A. Möbius, A. Neklioudov, A. Diaz-Sanchez, K.H. Hoffmann und M. Schreiber, *Optimization by thermal cycling*, 20th Int. Conf. Statistical Physics (Statphys 20), Paris (1998)

[S98vrs] T. Vojta, R.A. Römer und M. Schreiber, *Two interacting particles in a random potential: The random matrix model revisited*, 20th Int. Conf. Statistical Physics (Statphys 20), Paris (1998)

[S98esv] F. Epperlein, M. Schreiber und T. Vojta, *Computer simulation of disordered interacting electrons*, 20th Int. Conf. Statistical Physics (Statphys 20), Paris (1998)

[I98esv] F. Epperlein, M. Schreiber und T. Vojta, *Coulomb interactions and localization in disordered electron systems*, 24th Int. Conf. Physics of Semiconducters (ICPS24), Jerusalem (1998)

[C98ves] T. Vojta, F. Epperlein und M. Schreiber, *Computer Simulations of Disordered Interacting Electrons*, Conf. Computational Physics, CCP-1998, Granada (1998)

[C98vs] T. Vojta und M. Schreiber, *Damage Spreading in Random Field Systems*, Conf. Computational Physics, CCP-1998, Granada (1998)

[C98m] A. Möbius, A. Diaz-Sanches, B. Freisleben, M. Schreiber, A. Fachat, K. H. Hoffmann, P. Merz und A. Neklioudov, *Two Physically Motivated Algorithms for Combinatorial Optimization: Thermal Cycling and Iterative Partial Transcription*, Conf. Computational Physics, CCP-1998, Granada (1998)

[H98ves] T. Vojta, F. Epperlein und M. Schreiber, *Electronic transport in disordered interacting systems*, 210. WE-Heraeus Seminar Percolation, Interaction, Localization: Simulations of Transport in Disordered Systems, Berlin (1998)

[C99s] M. Schreiber, *Interacting Electrons in a Random Potential*, International Workshop Dynamics of Complex Systems, Dresden (1999)

[D99lssv] P. Lazić, M. Schreiber, E. Straver und T. Vojta: *Damage spreading and the existence of many pure states in the random field Ising model*, 63. Frühjahrstagung der DPG, Münster (1999)

[D99esv] F. Epperlein, M. Schreiber und T. Vojta: *Do interactions increase or reduce the conductance of disordered electrons? It depends!*, 63. Frühjahrstagung der DPG, Münster (1999)

[D99svt] S. Kilina, T. Vojta und M. Schreiber: *Transport properties of disordered interacting spinful electrons*, 63. Frühjahrstagung der DPG, Münster (1999)

[L99evs] F. Epperlein, T. Vojta, und Michael Schreiber: *Crossover from interaction induced localization to delocalization in disordered electron systems*, Int. Conference on Localization, Hamburg (1999)

[H99veks] T. Vojta, F. Epperlein, S. Kilina und M. Schreiber: *From localization to delocalization in the quantum Coulomb glass*, 8th International Conference on Hopping and Related Phenomena, Murcia (1999)

[H99ms] A. Möbius und M. Schreiber, *Specific heat of the Coulomb glass*, 8th International Conference on Hopping and Related Phenomena, Murcia (1999)

[M00vss] T. Vojta, J. Siewert und M. Schreiber: *Spectrum and charge distribution of interacting electrons in a parabolic confinement*, 11th International Winterschool on New Developments in Solid State Physics, Mauterndorf (2000)

[E00svs] J. Siewert, T. Vojta und M. Schreiber: *Spectrum and charge distribution of a parabolic quantum dot: dependence on the interaction range*, 18th General Conference of the Condensed Matter Division of the EPS, Montreux (2000)

[D00vss] T. Vojta, J. Siewert und M. Schreiber: *Spectrum and charge distribution of interacting electrons in a parabolic confinement*, 64. Frühjahrstagung der DPG, Regensburg (2000)

[D00eksuv] F. Epperlein, S. Kilina, M. Schreiber, S. Uldanov und T. Vojta: *Conductance and Fock space localization of disordered interacting electrons*, 64. Frühjahrstagung der DPG, Regensburg (2000)

[W00eksuv] F. Epperlein, S. Kilina, M. Schreiber, S. Uldanov und T. Vojta: *Fock space localization and conductance of disordered interacting electrons*, Symposium on Wave Propagation and Electronic Structure in Disordered Systems, Heraklion (2000)

[S00ssv] J. Siewert, M. Schreiber und T. Vojta: *Interacting electrons in parabolic quantum dots*, 25th International Conference on the Physics of Semiconductors, Osaka (2000)

[E00ssv] M. Schreiber, J. Siewert und T. Vojta: *Interacting electrons in parabolic quantum dots: energy levels, addition energies, and charge distributions*, International Conference on Excitonic Processes in Condensed Matter, Osaka (2000)

[T00sv] M. Schreiber und T. Vojta, *Solid State Physics on the Computer - Overview and Example: Hopping Conductivity*, Summerschool Teaching Computational Physics, Trest, Tschechien (2000)

[C00ssv] M. Schreiber, J. Siewert und T. Vojta, *Interacting electrons in quantum dots and quantum dot structures: the quantum mechanics of artifical atoms and molecules*, 36. Symposium für Theoretische Chemie, Litschau, sterreich (2000)

[E00msh] A. Möbius, M. Schreiber und K. H. Hoffmann, *Optimization by thermal cycling*, Int. Workshop Energy Landscapes, Chemnitz (2000)

[E00svm] M. Schreiber, T. Vojta und A. Möbius, *Correlated Electrons in the Quantum Coulomb Glass*, Int. Workshop Energy Landscapes, Chemnitz (2000)

[D01svs] M. Schreiber, T. Vojta und J. Siewert, *Interacting electrons in parabolic quantum dots and quantum dot structures*, 65. Frühjahrstagung der DPG, Hamburg (2001)

[D01bvs] S. Bekhechi, T. Vojta und M. Schreiber, *Monte-Carlo simulations of the quantum phase transition in disordered itinerant antiferromagnets*, 65. Frühjahrstagung der DPG, Hamburg (2001)

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Im Berichtszeitraum haben wir einerseits umfangreiche Simulationsrechnungen durchgeführt und damit Fortschritte bei der Beantwortung unserer physikalischen Fragen erzielt. Andererseits haben wir auch unsere Algorithmen verbessert und erweitert, um damit in Zukunft neue Probleme behandeln zu können.

Im Bereich der kombinatorischen Optimierung und ihrer Anwendung auf das klassische Coulomb-Glas steht in Zukunft neben einer verbesserten parallelen Implementierung des Optimierungsalgorithmus vor allem die Erweiterung der Simulationen auf verschiedene Observable im Mittelpunkt, bei denen im Experiment nichtergodisches Verhalten beobachtet wurde (z.B. Photoleitfähigkeit).

Bei der Simulation der quantenmechanischen Vielteilchensysteme, und zwar sowohl beim Quanten-Coulomb-Glas als auch bei den Quanten-Nanostrukturen ist das zentrale Problem zur Zeit die immer noch zu geringe maximal mögliche Zahl von Teilchen. Neben Verbesserungen am Algorithmus wollen wir unsere Simulationen aber auch auf kompliziertere Nanostrukturen als Quanten-Punkte ausdehnen. Da die Hauptschwierigkeit bei diesen Simulationen nicht vom (Confinement-) Potential, sondern von der Wechselwirkung stammt, sollte eine kompliziertere Geometrie die Rechnungen nicht übermäßig verteuern.

Außerdem sollen in Zukunft natürlich auch extensive Simulationsrechnungen zum Quanten-Magnetismus ungeordneter itineranter Elektronen durchgeführt werden. Die Entwicklung und der Test der dafür vorgesehenen Algorithmen sollen noch in diesem Jahr abgeschlossen werden.

Eine ausführlichere Darstellung der geplanten Arbeiten findet sich im Finanzierungsantrag 2002–2004.

Teilprojekt C3

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
Dr. A. Franz, Computerphysik
Dr. C. Schulzky, Computerphysik
Dr. P. Späth, Computerphysik
Dipl.-Phys. J. Burzler, Computerphysik
Dipl.-Phys. S. Seeger, Computerphysik

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Das Projekt befasst sich mit der thermischen Relaxation in komplexen Systemen [Pal82, H99]. Komplexe Systeme sind dabei durch einen Zustandsraum charakterisiert, in dem viele energetische Barrieren die lokalen Minima der Energiefunktionen trennen. Die Bewegung im Zustandsraum wird zum einen durch diese Barrieren und zum anderen durch die Konnektivität der Zustände beschränkt. Diese beiden Phänomene zusammen bestimmen dann das Relaxationsverhalten komplexer Systeme, das als thermisches Hüpfen zwischen den Zuständen beschrieben wird. Die Zeitskalen, auf denen solche Prozesse ablaufen, können sehr groß sein, verglichen mit den typischen für experimentelle Untersuchungen verwandten Zeiten. Dies führt zu einer Vielzahl interessanter experimenteller Befunde, insbesondere beobachtet man Nichtgleichgewichtsphänomene, die sich z. B. bei den Spin-Gläsern durch das sogenannte Aging-Verhalten ausdrücken [LSNB83, GSN+88, SGN+87, HLO+92].

Ziel dieses Teilprojektes ist es, diese Nichtgleichgewichtsphänomene auf der Basis komplexer Zustandsräume zu verstehen und zu modellieren. Wegen der sehr großen

Anzahl von Zuständen kann eine erfolgreiche Modellierung in der Regel nicht in dem ursprünglichen Zustandsraum erfolgen, stattdessen hat es sich als sinnvoll erwiesen, den Zustandsraum zu vergröbern (coarse graining) und so die Anzahl der Zustände deutlich zu verringern.

In der ersten Förderungsperiode hatten wir uns insbesondere mit Relaxationseigenschaften befasst, die aufgrund von Energiebarrieren im Zustandsraum zustande kamen. Bei der Modellierung von Aging-Phänomenen in sogenannten Temperature-Step-Experimenten [VHO91, GSN$^+$88, LHOV94, HSS97] zeigte sich allerdings, dass die Berücksichtigung von kinetischen Faktoren notwendig war, die in vergröberter Weise die Konnektivitäten im Zustandsraum wiedergeben. Dies hat unser Augenmerk insbesondere auf diesen zweiten Aspekt der Relaxation in komplexen Räumen gelenkt, der von Energiebarrieren unabhängig ist.

Um die durch die Konnektivitäten bedingten Relaxationseigenschaften besser zu verstehen, haben wir uns daher entschlossen, zunächst die Relaxation in selbstähnlichen Strukturen zu untersuchen, bei denen die Relaxation nicht durch die Energielandschaft, sondern ausschließlich durch die Topologie des Zustandsraumes bestimmt ist. Hier boten Fraktale [Man77, HBA87, BG90] einen ausgezeichneten Ansatzpunkt. Mit der Gewinnung von Frau Dr. Franz erhielten wir eine ausgezeichnete Mitarbeiterin, die sich schon zuvor mit der Diffusion auf Fraktalen beschäftigt hatte.

Komplexe Energielandschaften treten nun aber nicht nur bei Spin-Gläsern auf, sondern auch bei anderen Systemen, wie etwa der Protein-Faltung [EB99, DRP98, DS90], bei der Cluster-Bildung [Ber94] oder aber auch bei anderen Systemen [BBBP99], die durch kontinuierliche Variablen gekennzeichnet sind. Bei dem von uns im Dezember 2000 veranstalteten Workshop zum Thema Energielandschaften zeigten sowohl die Arbeiten von David Wales als auch die von Christian Schön, dass viele der von uns entwickelten Vorstellungen, insbesondere die Modellierung vergröberter Zustandsräume durch Baummodelle, auch für kontinuierliche Systeme anwendbar sind.

Daher erschien es uns angezeigt, bei der Strukturbestimmung von Zustandsräumen neben den diskreten Zustandsräumen von Spin-Gläsern auch die Untersuchung von Zustandsräumen kontinuierlicher Systeme einzubeziehen.

Die insgesamt durchgeführten Arbeiten lassen sich in die Bearbeitung der folgenden Teilaufgaben untergliedern:

- Zustandsraumstruktur und deren Vergröberung für Spin-Gläser,
- Zustandsraumstruktur und deren Vergröberung für kontinuierliche Systeme,
- Relaxationsverhalten auf Fraktalen.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

2.3.1 Teilaufgabe Zustandsraumstruktur und deren Vergröberung für Spin-Gläser

Die Zustandsraumstruktur komplexer Systeme ist Gegenstand intensiver Untersuchungen. Im allgemeinen geht man dabei vom Bild einer „Gebirgsstruktur“ der Energiefunktion aus. Diese zu analysieren ist Gegenstand einer Reihe von Arbeiten von Sibani et al. [SSSA93, SS94, Sib98], Klotz und Kobe [KK94a, KK94b] und uns.

Schon in der ersten Bewilligungsperiode untersuchten wir die Zustandsraumstruktur eines kubischen Ising-Spinglases mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung. Dabei wurden die Wechselwirkungskonstanten gleichverteilt gewählt, da dadurch gegenüber dem in den Kobeschen Arbeiten [KK94a, KK94b] verwendeten $\pm I$–Modell die Entartungen in den Wechselwirkungstermen fortfallen, und so eine glattere Energiefunktion entsteht. Mittels eines rekursiven, speziell dem Problem angepassten und parallelisierten Branch-and-Bound Algorithmusses ermittelten wir die Zustandsraumstruktur der energetisch tief liegenden Zustände. Dadurch sind in einem gewissen Energieinterval oberhalb eines Energieminimums alle Zustände bekannt.

Zur Vergröberung des Zustandsraumes hatten wir ein Clusterverfahren entwickelt, bei dem bestimmte Mengen von (mikroskopischen) Zuständen im Zustandsraum unter Vernachlässigung der inneren Struktur des Clusters zu vergröberten Zuständen (Clustern) zusammengefasst wurden. Der von uns im Rahmen dieses Teilprojektes entwickelte Algorithmus, der Cluster ohne innere Energiebarrieren erzeugt, wird ausführlich in [KSH98] beschrieben.

Die offene Frage war nun, ob die so erhaltenen Cluster eine gute Basis für die Modellierung der Dynamik der Relaxation sind. Hierzu mußte neben der Zustandsraumstruktur auch die Dynamik des Systems vergröbert werden, d.h. die effektiven Übergangsraten zwischen den Clustern mußten aus der mikroskopischen Dynamik bestimmt werden. Dabei standen verschiedene Möglichkeiten einer Modellierung zur Auswahl. Durch die Überprüfung, ob und inwieweit die ursprüngliche Struktur in ihrer Dynamik mit der vergröberten übereinstimmt, war dann die Qualität der verschiedene Modelle zu überprüfen.

2.3.2 Teilaufgabe Zustandsraumstruktur und deren Vergröberung für kontinuierliche Systeme

Bei der Untersuchung und Modellierung der Zustandsraumstruktur von kontinuierlichen Systemen treten zwar ähnliche Probleme auf wie bei den diskreten Systemen (etwa Spin Systeme), trotzdem unterscheiden sich die Methoden, mit denen man die Zustandsraumstruktur kontinuierlicher Systeme bestimmen kann, ganz erheblich von denen für diskrete Systeme. Während für letztere im Prinzip die Enumeration als Basisverfahren zur Verfügung steht, ist dies für kontinuierliche Systeme wegen des Kontinuums der Zustände ausgeschlossen.

Für kontinuierliche Systeme besteht, genau wie für diskrete Systeme, die Grundidee darin, die Bereiche des Zustandsraumes zu charakterisieren, die intern schnell relaxieren. Dabei ist natürlich zu berücksichtigen, dass auch hier eine ganze Hierarchie von Relaxationszeiten auftritt. Zunächst werden typischerweise die lokalen Minima der Energie im Zustandsraum aufgesucht. Die Einzugsbereiche (Energietäler) dieser Minima werden dann dadurch charakterisiert, dass Sattelpunkte der Enerfläche bestimmt werden, die den Pässen der Energielandschaft entsprechen [DWB90, HKQ91]. In einer vorhergehenden Arbeit, zusammen mit Berry und Kunz, hatten wir so die optimale Abkühlung eines Clustersystems untersucht, das durch Vergröberung des Zustandsraums eines Argon-19-Clusters entstanden war [KBHB98]. Hierbei wurde eine typische Stichprobe von Minima und Sattelpunkten verwendet, die seinerzeit durch sehr aufwendige Untersuchungen des Zustandsraumes bestimmt worden waren.

Für die Modellierung von dynamischen Eigenschaften, etwa von Alterungsverhalten, sind aber weniger die Kenntnis der Sattelpunkte, d.h. der Barrierenhöhen, wichtig, sondern die Verweilzeiten (Exitzeiten) in den Einzugsbereichen der Energieminima. Dies sind aggregierte Grössen, in die neben der Energie des Sattelpunktes auch kinetische Grössen (Zusammenhangsverhältnisse) eingehen.

Unser Plan war es nun, einen Algorithmus zu finden, der für kontinuierliche Systeme eine vergröberte Beschreibung auf der Basis von Verweilzeiten möglich macht und dies insbesondere unter Verwendung von Parallel-Algorithmen.

2.3.3 Teilaufgabe Relaxationsverhalten auf Fraktalen

Wie schon oben dargelegt, haben die Ergebnisse bisheriger Arbeiten gezeigt, dass für die Relaxation in komplexen Zustandsräumen neben der Energielandschaft auch die Nachbarschaftsstruktur (die Konnektivität) der Zustände im Zustandsraum eine wichtige Rolle spielt. Um diesen Effekt zu verstehen, wollten wir uns zunächst einmal mit Systemen beschäftigen, bei denen die Relaxation durch die Struktur des Zustandsraumes verlangsamt wird. Einen guten Startpunkt hierfür bot das Relaxationsverhalten von Diffusionsprozessen auf Fraktalen [Man77, HBA87, BG90]. Betrachtet man bei diesen die Zeitabhängigkeit des mittleren Abstandsquadrates für Random-Walker, so findet man Potenzgesetze mit einem Exponenten (Random Walk Dimension), der von dem normaler Diffusion abweicht. Die Bestimmung dieser Random Walk Dimension war in der Literatur schon für verschiedene Fraktale durchgeführt worden [DBT99]; bei dem Versuch, entsprechende Rechnungen durchzuführen, erschienen uns allerdings die dabei verwendeten Algorithmen als nicht optimal. Zu unserer Überraschung ergaben sich Diskrepanzen bei den Random Walk Dimensionen. So stellte sich uns zunächst die Aufgabe, einen möglichst effizienten und genauen Algorithmus zu entwickeln.

Zusätzlich war die Qualität unserer Algorithmen zu überprüfen. Dazu beschränkten wir uns auf die Klasse der SIERPINSKI-Teppiche, da wir für diese auch weitere Methoden zur Bestimmung der Random-Walk-Dimension zur Verfügung hatten. Bei der Durchführung dieses Programms ergaben sich eine ganze Anzahl von interessanten Fortschritten. Auch konnten Kontakte mit einer indischen Forschergruppe durch einen Arbeitsbesuch von Frau Sujata Tarafdar, tätig am Condensed Matter Physics Zentrum der Jadavpur Universität, Calcutta, aufgebaut werden. In einer Reihe von Arbeiten konnten so neue Erkenntnisse zu Diffusionsprozessen auf fraktalen Strukturen gewonnen werden.

Literaturverzeichnis

[BBBP99] K. Binder, J. Baschnagel, C. Bennemann, and W. Paul. Monte carlo and molecular dynamics simulation of the glass transition of polymers. *J. Phys.: Condens. Matter*, 11(10A):A47, 1999.

[Ber94] R. S. Berry. Clusters - tools for studying potential surfaces and their connection to molecular-dynamics. *J. Phys. Chem.*, 98(28):6910, 1994.

[BG90] J. P. Bouchaud and A. Georges. Anomalous diffusion in disordered media: Statistical mechanisms, models and physical applications. *Phys. Rep.*, 195:127, 1990.

[DBT99] Ruma Dasgupta, T. K. Ballabh, and S. Tarafdar. Scaling exponents for random walks on Sierpinski carpets and number of distinct sites visited: A new algorithm for infinite fractal lattices. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 32(37):6503, 1999.

[DRP98] J. M. Dudek, K. Ramnarayan, and J. W. Ponter. Protein structure prediction using a combination of sequence homology and global energy minimization: Ii. energy functions. *J. Comp. Chem.*, 19(5):548, 1998.

[DS90] J. M. Dudek and H. A. Scheraga. Protein structure prediction using a combination of sequence homology and global energy minimization i. global energy minimization of surface loops. *J. Comp. Chem.*, 11(1):121, 1990.

[DWB90] H. L. Davis, D. J. Wales, and R. S. Berry. Exploring potential energy surfaces with transition-state calculation. *J. Chem. Phys.*, 92(7):4308, 1990.

[EB99] N. Elmaci and R. S. Berry. Principal coordinate analysis on a protein model. *J. Chem. Phys.*, 110(21):10606, 1999.

[GSN+88] P. Granberg, L. Sandlund, P. Norblad, P. Svedlindh, and L. Lundgren. Observation of a time-dependent spatial correlation length in a metallic spin glass. *Phys. Rev. B*, 38(10):7097, 1988.

[HBA87] Shlomo Havlin and Daniel Ben-Avraham. Diffusion in disordered media. *Adv. Phys.*, 36(6):695, 1987.

[HKQ91] D. Heidrich, W. Kliesch, and W. Quapp. *Properties of Chemically Interesting Potential Energy Landscapes*. Springer-Verlag, Heidelberg, 1991.

[HLO+92] J. Hamman, M. Lederman, M. Ocio, R. Orbach, and E. Vincent. Spin-glass dynamics – relation between theory and experiment – a beginning. *Physica A*, 185(1–4):278, 1992.

[H99] K. H. Hoffmann. Slow relaxation dynamics from spin glasses to stochastic optimization. *Comp. Phys. Comm.*, 121-122(1-3):30, 1999.

[HSS97] K. H. Hoffmann, S. Schubert, and P. Sibani. Age reinitialization in hierarchical relaxation mo dels for spin-glass dynamics. *Europhys. Lett.*, 38(8):613, 1997.

[KBHB98] Ralph E. Kunz, Peter Blaudeck, Karl Heinz Hoffmann, and R. Stephen Berry. Atomic clusters and nanoscale particles: From coarse-grained dynamics to optimized annealing schedules. *J. Chem. Phys.*, 108(6):2576, 1998.

[KK94a] T. Klotz and S. Kobe. Exact low-energy landscape and relaxation phenomena in Ising spin glasses. *Acta Physica Slovaca*, 44:347, 1994.

[KK94b] T. Klotz and S. Kobe. "valley structures" in the phase space of a finite 3d ising spin glass with +or-i interactions. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 27(4):L95, 1994.

[KSH98] T. Klotz, S. Schubert, and K. H. Hoffmann. Coarse graining of a spin-glass state space. *J. Phys.: Condens. Matter*, 10(27):6127, 1998.

[LHOV94] F. Lefloch, J. Hammann, M. Ocio, and E. Vincent. Spin glasses in a magnetic field: phase diagram and dynamics. *Physica B*, 203:63, 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, 1983.

[Man77] B. B. Mandelbrot. *Fractals - Form, Chance and Dimension.* W. H. Freeman, San Francisco, 1977.

[Pal82] R. G. Palmer. Broken ergodicity. *Adv. Phys.*, 31(6):669, 1982.

[SGN+87] P. Svedlindh, P. Granberg, P. Nordblad, L. Lundgren, and H.S. Chen. Relaxation in spin glasses at weak magnetic fields. *Phys. Rev. B*, 35(1):268, 1987.

[Sib98] P. Sibani. Local state space geometry and thermal relaxation in complex landscapes: the spin-glass case. *Physica A*, 258(3–4):249, 1998.

[SS94] P. Sibani and P. Shriver. Local phase-space structure and low-temperature dynamics of short-range ising spin glasses. *Phys. Rev. B*, 49(10):6667, 1994.

[SSSA93] P. Sibani, C. Schön, P. Salamon, and J.-O. Andersson. Emergent hierarchical structures in complex system dynamics. a phase space analysis of the travelling salesman problem. *Europhys. Lett.*, 22:479, 1993.

[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.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe Zustandsraumstruktur und deren Vergröberung für Spin-Gläser

Bereits am Ende der vorhergehenden Berichtsperiode wurde begonnen, für ein Ising-Spinglas mit über 10^{19} Zuständen eine Vereinfachung des Zustandsraummodelles durchzuführen [KSH98]. Die in diesem Abschnitt vorgestellten Ergebnisse sind gegen Ende der vorherigen Bewilligungsperiode entstanden, und waren daher nicht im letzten Arbeitsbericht enthalten.

Die grundlegende Idee, die eine Vergröberung des Zustandsraums auch für eine dynamische Beschreibung möglich macht, ist die folgende [H99]: Bereiche des Zustandsraums, die nicht durch Energiebarrieren getrennt sind, werden sich schneller in ein lokales thermisches Gleichgewicht entwickeln können als solche, bei denen erst angeregt durch thermische Fluktuationen eine Energiebarriere zu überwinden ist. Bereiche, die schnell in ein internes Gleichgewicht kommen, sind dann gute Kandidaten für eine Clusterung. Darum muß der Vergröberungsalgorithmus dafür sorgen, daß innerhalb eines Clusters möglichst keine oder wenn, dann nur geringe, Energiebarrieren zu überwinden sind.

Wir entwickelten daher eine Clusterung, die keine Energiebarrieren innerhalb eines Clusters zuläßt. In Abbildung 2.1 ist das Resultat des zu diesem Zweck entwickelten Algorithmus anhand eines Modellsystems von nur 28 Zuständen dargestellt.

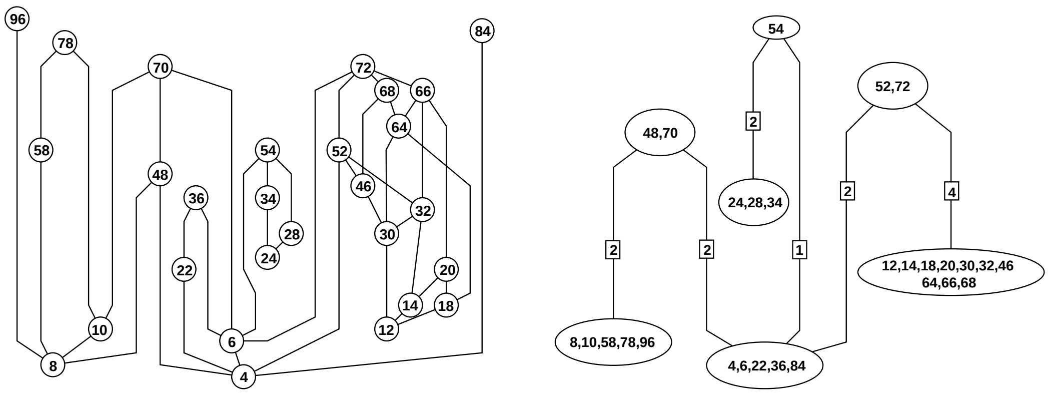
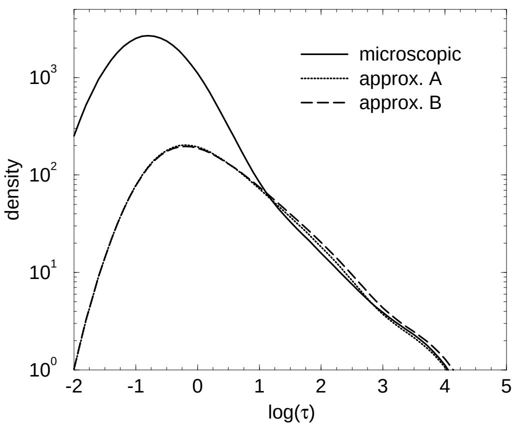


Abbildung 2.1: Links: Mikroskopische Zustände. Rechts: Vergröberter Zustandsraum. Die Zahlen in den Rechtecken stellen die jeweilige Anzahl der mikroskopischen Verbindungen dar.

Im Hinblick auf eine Qualitätskontrolle führten wir Vergleiche der Modellierungen auf der Ebene einer Mastergleichungsdynamik durch.

Für die nunmehr bekannte Topologie eines vergröberten Zustandsraumes ermittelten wir vergröberte Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den Clustern. Eine gute Approximation konnte erreicht werden, indem zunächst alle vorkommenden Energien innerhalb eines Clusters von Zuständen durch eine (Modell A) oder zwei (Modell B) Energien repräsentiert werden. Im Fall A wird die mittlere Energie der Zustände im Cluster als Energie des Gesamtzustandes benutzt. Im Fall B gibt es mehrere Möglichkeiten der Bestimmung der beiden repräsentativen Energien. In unserem Fall hat es sich bewährt, die niedrigste Energie eines Mikrozustandes als das niedrigere und die mittlere Energie aller anderen Mikrozustände als das höhere Energieniveau im Modell B zu wählen.

Anschließend wurden mikroskopische und vergröberte Übergangsraten verglichen und die Parameter des vergröberten Modells so angepaßt, daß die Übergangsraten für wenigstens zwei wichtige Punkte auf der Temperaturskala (z.B. $T \to 0$ und $T \to \infty$) übereinstimmen. Mit diesem Verfahren gelang es, eine Dynamik zu modellieren, die unter Benutzung des wesentlich einfacher zu berechnenden vergröberten Modells eine gute Näherung darstellt. Wie aus einem Vergleich der Dichte der Relaxationsmoden als Funktion der Relaxationszeit hervorgeht, Abbildung 2.2, gilt diese Aussage insbesondere für Modell B und für die langsamen Relaxationsmoden des Gesamtsystems über einen großen Temperaturbereich.



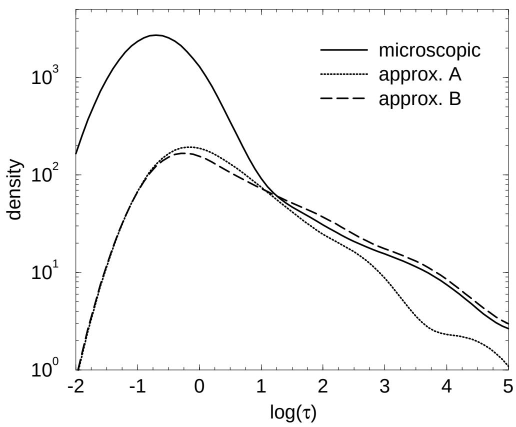


Abbildung 2.2: Geglättete Dichte der Relaxationsmoden über dem Logarithmus der Relaxationszeit τ bei $\beta = 1/kT = 1$ (links) und $\beta = 4$ (rechts) für das mikroskopische System und die beiden Modelle A und B.

Für die höhere Temperatur liefern beide Modelle eine nahezu gleichwertige Näherung für das mikroskopische System. Jedoch nur Modell B ist auch für niedrigere Temperaturen eine ebensogute Näherung.

2.4.2 Teilaufgabe Zustandsraumstruktur und deren Vergröberung für kontinuierliche Systeme

Untersucht wurden Systeme von Teilchen, deren Wechselwirkungsenergie durch Modellpotentiale gegeben war. Die Ankopplung an ein Wärmebad wird durch eine molekulardynamische Beschreibung modelliert. Ziel unseres Algorithmus war es, den kontinuierliche Zustandsraum auf einem diskreten Raum abzubilden. Dazu wurde eine parallele Implementierung entwickelt, die diese Aufgabe sehr effizient erfüllt [BH01].

Zunächst wird ein Master-Prozeß gestartet, der den Konfigurationsraum durchläuft, indem die molekulare Dynamik bei einer hohen Temperatur (Gaszustand) verfolgt wird.

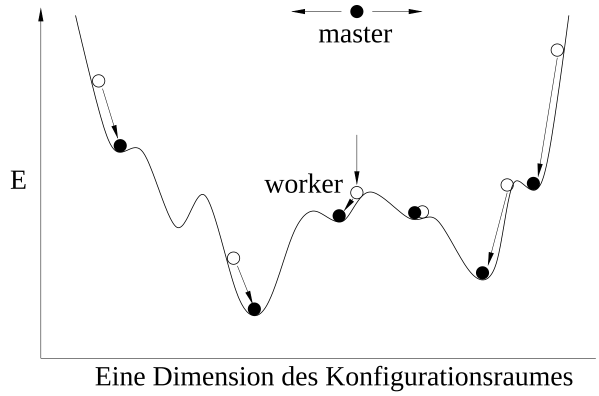


Abbildung 2.3: Ein Master Prozeß durchläuft den Konfigurationsraum bei einer genügend hohen Temperatur. Tochter-Prozesse sind für das Aufsuchen der Minima und ihrer Eigenschaften zuständig.

Dieser setzt in gewissen Zeitabständen Tochterprozesse in Gang, die für die genauere Untersuchung der lokalen Umgebung eines Punktes im Konfigurationsraum verantwortlich sind, siehe Abbildung 2.3. An dieser Stelle bot sich die Implementierung eines parallelen Algorithmus an, der zu einer annähernden Gleichverteilung der Last auf den Prozessoren führt, trotz unterschiedlicher Schwierigkeitsgrade der einzelnen Tasks für die Tochterprozesse. Das auf den Chemnitzer Linux-Clustern benutzte MPI ermöglicht dieses Vorgehen durch Aufruf eines Receive-Requests, der auf das erste Send eines beliebigen Workers wartet. Nach der Erstversorgung aller Worker mit Tochterprozessen führt der Master in geeigneten Zeitabständen zu diesem Zweck die Receive-Send-Sequenz in Abbildung 2.4 durch.

In Abbildung 2.4 ist außerdem beispielhaft die für diesen Algorithmus charakteristische Abhängigkeit der Effektivität (Zahl n der bearbeiteten Minima pro Zeiteinheit, dividiert durch die Anzahl der Prozessoren N) von der Anzahl der Prozessoren (inclusive ein Master-Prozessor) dargestellt. Es existiert ein Optimum der Effektivität bei einer bestimmten Prozessoranzahl. Benutzt man eine zu geringe Zahl von Prozessoren als Worker, so muß der Master oft auf freie Worker warten. Bei zu großer Zahl müssen die Worker auf neue Aufgaben warten und die Gesamteffektivität $(n/t)/N$ bleibt unterhalb einer asymptotischen Funktion, die durch die Leistung des Master bestimmt wird. Hat man sehr viele Prozessoren zur Verfügung, ist es folglich unter Umständen besser, mehr als einen Master-Prozeß zu starten. Das optimale Verhältnis $N_{\text{Worker}}/N_{\text{Master}}$ hängt natürlich von den Umständen des Einzelfalles ab. Es ist insbesondere abhängig von der mittleren Zeit, die ein Worker für die Analyse eines Minimums benötigt. Bei unseren praktischen Berechnungen wurden bisher zwischen 10 und 72 Worker pro Master eingesetzt.

Die Tochterprozesse suchen zunächst die Lage des jeweils nächstliegenden wesentlichen Minimums der potentiellen Energie. Anschließend wird, ausgehend vom Zustand im Potentialminimum, das System durch erneute Kalibrierung auf eine festgelegte Temperatur dazu gebracht, dieses Minimum wieder zu verlassen. Die dazu erforderliche Zeit (Verweilzeit) wird gemessen und über der Energie des Minimums, das verlassen wurde, aufgetragen.

```
...
########## Neuer Job fuer arbeitslosen Worker
########## Empfang einer Antwort von beliebigem Worker
#          mit der Nummer isender
call MPI_RECV(e0, 3, MPI_REAL, MPI_ANY_SOURCE,
              anstype, MPI_COMM_WORLD, status, ierr)
isender = status(MPI_SOURCE)
########## Senden des neuen Jobs an Worker isender
call MPI_SEND(x, n3, MPI_REAL, isender,
              reqtype, MPI_COMM_WORLD, ierr)
########## Verarbeitung des Resultats von isender
...
```

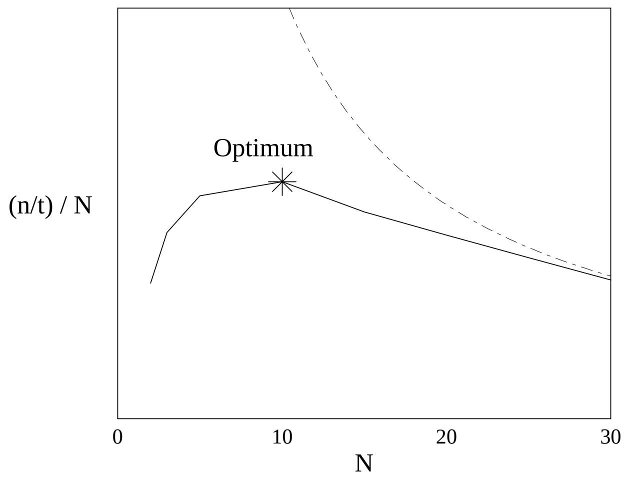


Abbildung 2.4: Master–Worker–Wechselwirkung und Zahl der bearbeiteten Minima pro Zeiteinheit und Prozessor als Funktion der Zahl der Prozessoren. Strichpunktlinie: Asymptotische Effektivität für einen Master-Prozess.

Die so gewonnenen Daten können nun weiterverarbeitet werden. In Abbildung 2.5 wurden beispielsweise eine jeweils gleiche Zahl von Minimumsenergien gemittelt und so die durch senkrechte Striche dargestellte repräsentative Auswahl von Energien E_j gewonnen. Desweiteren kann, wie im Bild als Linie dargestellt, durch Regression eine Funktion bestimmt werden, die einen Mittelwert der Verweilzeit $\overline{t_j^{esc}}$ in Abhängigkeit von der Energie des Minimums repräsentiert.

Führt man nunmehr dieselbe Prozedur der Sammlung und Auswertung von Daten für verschiedene Temperaturen durch, dann gelingt es anschließend, für jedes repräsentative Minimum mit der Energie E_j die Temperaturabhängigkeit der mittleren Verweilzeit und damit der Entkommwahrscheinlichkeit λ_j durch einen Boltzmann-Faktor zu approximieren, der eine zu jedem Minimum gehörende charakteristische zu überwindende Potentialhöhe ΔE_j enthält

$$\lambda_j(T) = \frac{1}{\overline{t_j^{esc}}(T)} = C \exp(-\frac{\Delta E_j}{kT}) \,. \tag{2.1}$$

Mit diesen Daten kann nun der ursprünglich kontinuierliche Raum auf eine verzweigte baumartige Topologie abgebildet werden. Bereits eine sehr grobe erste Approximation mit Übergangswahrscheinlichkeiten, die proportional zu den λ_j des

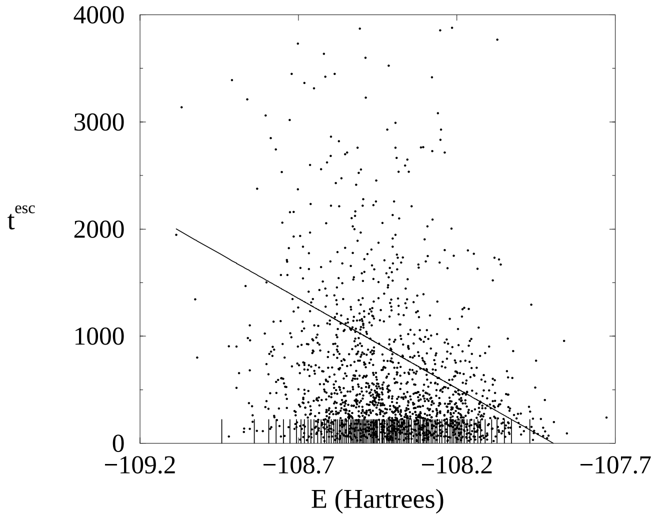


Abbildung 2.5: Jeder Punkt stellt die Zeit für das Verlassen einen Potentialminimums bei $T = 4000$ K in Abhängigkeit von der Energie dieses Minimums dar. Zeiteinheit ist 80 a.u. $\approx 2{*}10^{-15}$ s.

Startzustandes gewählt wurden, führte zu guten Resultaten bei der Verwendung dieses Modells für die stochastische Optimierung von realistischen Halbleiterclustern.

2.4.3 Teilaufgabe Relaxationsverhalten auf Fraktalen

Die Frage, inwieweit das Relaxationsverhalten in komplexen Systemen durch die Konnektivitäten im Zustandaraum bestimmt ist, steht im Mittelpunkt dieser Arbeiten. Diese Frage läßt sich besonders gut am Beispiel von Diffusionsprozessen auf fraktalen Strukturen studieren.

Fraktale können durch die Angabe mehrerer Parameter charakterisiert werden. Besondere Rollen spielen hierbei die fraktale Dimension d_f der Struktur, die direkt aus der Geometrie bestimmt werden kann, und die Random-Walk-Dimension d_w, die die zeitliche Entwicklung von Relaxations- und Diffusionsprozessen beschreibt. Im Vergleich zu d_f ist d_w sehr stark von der Nachbarschaftsstruktur geprägt und ist deshalb für eine gutes Verständnis des Relaxationsverhaltens auch im vergröberten Zustandsraum von grosser Bedeutung.

In vorbereitenden Arbeiten wurden daher zunächst verschiedene Algorithmen zur Modellierung von Diffusionsprozessen auf Sierpinski-Teppichen (siehe Abbildung 2.6) entwickelt.

In [SFSH01] wird ein neuartiger Algorithmus vorgestellt, der eine effiziente Simulation von Random-Walks auf sogenannten "finitely ramified" Sierpinski-Teppichen erlaubt. Diese deterministischen Fraktale sind dadurch gekennzeichnet, daß nur maximal vier Randpunkte des Generators in der iterierten Struktur zu Verbindungen führen können. Im Gegensatz zu herkömmlichen Algorithmen, die eine "Karte" der n-ten Iteration des Generators benutzen, um Nachbarschaftsrelationen bestim-

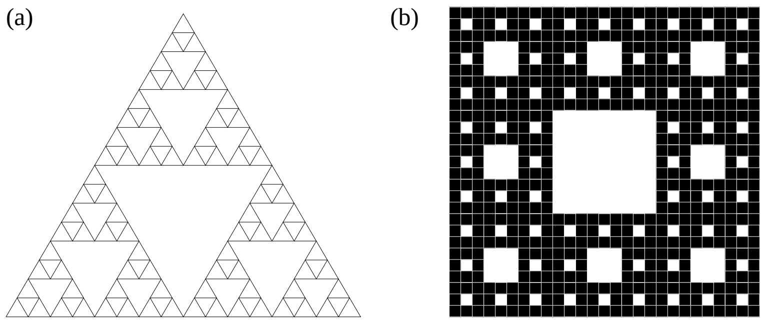


Abbildung 2.6: Das SIERPINSKI-Dreieck und der typische SIERPINSKI-Teppich.

men zu können, werden diese in unserem Algorithmus zu Beginn der Simulation in vergleichsweise kleinen Tabellen abgelegt. In Verbindung mit einer hierarchischen Notation (siehe Abbildung 2.7) der Koordinaten des Random-Walkers führt dies zu einem Programm mit sehr niedrigem Speicherbedarf, der besonders auf moderneren Rechnerarchitekturen effiziente Simulationen erlaubt (siehe Tabelle 2.1).

	Pentium/166	PentiumPro/200	PentiumII/400
unser Algorithmus	86.40s	25.91s	10.12s
Dasgupta et al.	562.08s	207.03s	98.29s
Verhältnis	6.5	8.0	9.7

Tabelle 2.1: Ausführungszeiten der Algorithmen zur Simulation von Random-Walks auf Fraktalen auf verschiedenen CPUs. Der Algorithmus ist effizienter auf moderneren CPUs, da Optimierungen (Sprungvorhersage, Pipelining) besser ausgenutzt werden können.

Im Gegensatz zu Algorithmen, die auf o.g. Karten basieren, treten hier auch keine Randeffekte auf. Dies erlaubte uns Simulationen verschiedener Strukturen mit jeweils $10,000$ Schritten pro Walker (der oberen Grenze in bisherigen Arbeiten) und Mittelungen über $10,000,000$ anstatt bisher $70,000$ Walker [DBT99] und aus den Daten dieser Simulationen die Bestimmung der Random-Walk Dimensionen. Die Ergebnisse zeigen qualitativ das gleiche Verhalten wie in den Arbeiten von Dasgupta et al., allerdings fanden wir eine sehr viel größere Variation der Exponenten von Teppich zu Teppich.

In weiterführenden Arbeiten wurden dann Untersuchungen der selben Strukturen mit der "Exact Numeration Method" [HBA87] durchgeführt. Basierend auf einer Iteration der Mastergleichung besteht das Problem bisheriger Untersuchungen vor allem darin, daß zu jedem Punkt des Fraktals eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit gespeichert werden muß. Erfolgt dies in einem Schema nach o.g. Karten, wird zum einen Speicher nicht genutzt und zum anderen erfolgt bereits durch Wahl der Kartengröße eine Beschränkung der Zeit, bis zu der eine Simulation ohne Randeffekte möglich ist.

Unser in [FSSH00b] vorgestellter Algorithmus umgeht diese Nachteile, indem eine dynamische Datenstruktur zur Speicherung der Wahrscheinlichkeitswerte benutzt wird. So kann die gesamte Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit zur Zeit t bestimmt werden, die wesentlich mehr Information enthält als nur das mittle-

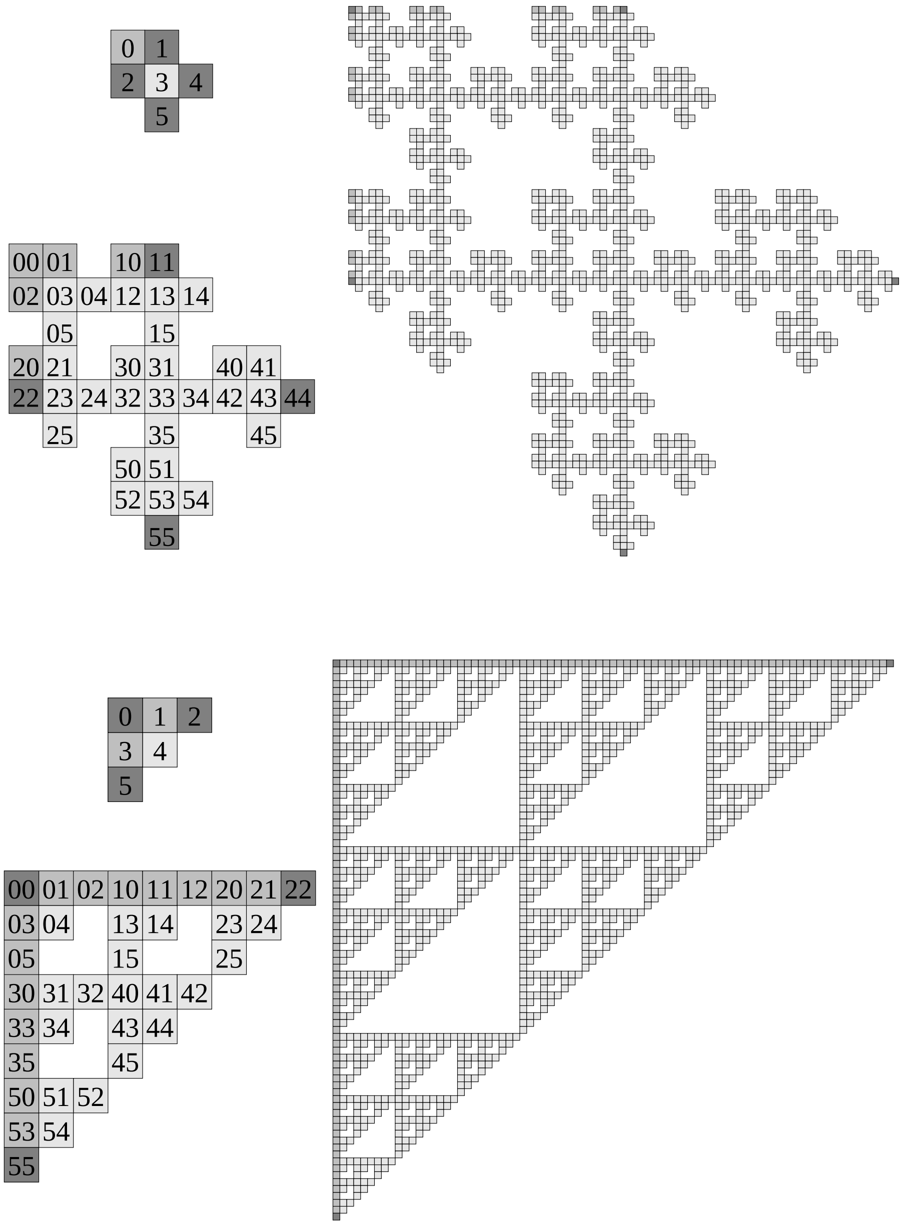


Abbildung 2.7: Die ersten Iterationen für Generatoren mit vier Kontaktpunkten (dunkel), einem nicht-verbindenden Oberflächenpunkt (mittel) und einem inneren Punkt (links) bzw. drei Kontaktpunkten, zwei nicht-verbindenden Oberflächenpunkten und einem inneren Punkt. Für die erste und zweite Iteration sind Beispiele der Positionsangaben gegeben.

re Abstandsquadrat $\langle r^2(t) \rangle$. Diese dynamische Datenstruktur benötigt nur wenig mehr Speicherplatz als für die Punkte mit nicht verschwindender Aufenthaltswahrscheinlichkeit zum Zeitschritt t notwendig ist.

Durch die Verwendung von Nachbarschaftstabellen wird auch hier eine erhebliche Beschleunigung der Algorithmen erreicht, so daß nur die verfügbare Rechenleistung und der vorhandene Speicherausbau eine echte Beschränkung darstellen. Simulationen zu den bereits mit dem Random-Walk Algorithmus untersuchten SIERPINSKI-Teppichen zeigten wieder eine größere Variation der Exponenten, die aber für einige

Strukturen wesentlich näher an den theoretischen Werten [SFH00] liegen.

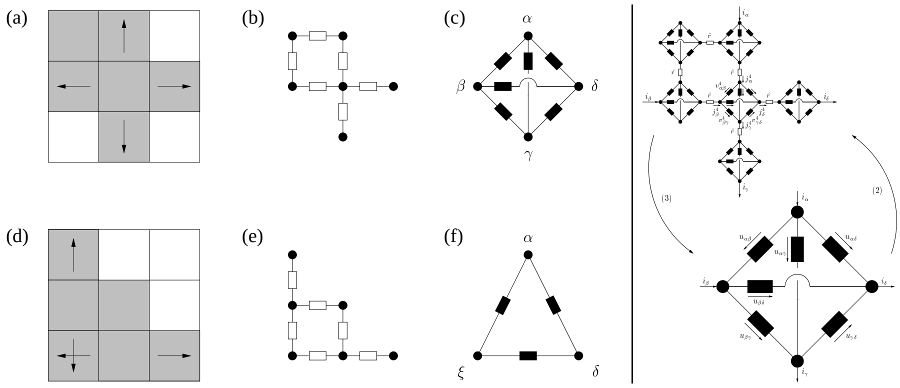


Abbildung 2.8: Übergang von Generatoren mit vier (a) und drei (d) Kontaktpunkten zu Generator-Netzwerken (b+e) und dazu equivalente rhomboidische (c) bzw. trianguläre (f) Netzwerke. Rechts eine Illustration des Iterationsschemas zur Widerstandsskalierungsmethode: (2) Die Knoten des Generator-Netzwerkes (b) werden durch den Rhomboid ersetzt. (3) Das entstehende Netzwerk wird in ein equivalentes rhomboidisches Netzwerk umgeformt.

Diese theoretischen Werte für die Random-Walk-Dimension d_w konnten in analytischen Untersuchungen [SFH00] bestimmt werden. Die theoretischen Beschreibungen basieren auf der Tatsache, daß Diffusionsprozesse, z. B. Brownsche Bewegung auf einem Substrat, und der Stromfluß durch ein geeignetes Widerstandsnetzwerk (siehe Abbildung 2.8) eng miteinander verbunden sind. Auch im dem Fall, daß das Substrat und das Widerstandsnetzwerk selbstähnliche Fraktale sind, wird die Einstein-Relation zwischen Diffusionskonstante und Leitfähigkeit benutzt und kann als Relation $d_w = d_f + \xi$ zwischen den Skalierungsexponenten für das mittlere Abstandsquadrat d_w und den Widerstand des Netzwerkes ξ sowie der fraktalen Dimension d_f formuliert werden [FSH00]. Durch Interpretation des Fraktals als Widerstandsnetzwerk und einer Skalierungsmethode konnten so mit einem Mathematica Programm wesentlich genauere Werte für die Random-Walk-Dimension erhalten werden.

Diese drei von uns entwickelten Zugänge zur Charakterisierung von Diffussionsprozessen, die durch topologische Beschränkungen im Realraum begrenzt sind, erlauben die Bestimmung der Random-Walk-Dimension über stochastische Simulation, Iteration der Mastergleichung und Widerstandsskalierung, d.h. also durch direkte Simulation, statistische Beschreibung der Dynamik und theoretische Betrachtungen. In einer zusammenfassenden Arbeit [FSSH00a] wurden die Methoden hinsichtlich ihrer Eigenschaften, Vor- und Nachteile untersucht. Es zeigt sich, daß die Methode der Widerstandsskalierung die exaktesten Ergebnisse für d_w liefert. Für beide – Mastergleichung und Random-Walk – zeigt sich jedoch aus den Untersuchungen zur Widerstandsskaliernung, daß extrem große Bereiche des Teppichs "abgedeckt" werden müssten, um vergleichbare Genauigkeiten für d_w zu erreichen.

Um mögliche Ähnlichkeiten der fraktalen Strukturen mit Zustandsräumen komplexer Systeme besser charakterisieren zu können, wurden Untersuchungen zur Porenstruktur von Sierpinski-Teppichen durchgeführt [FSTH00]. Dazu erfolgte zunächst die Beschreibung der Poren durch ein Polynom. Ausgehend vom Generator wird dieses Polynom iterativ für jede Stufe der Generierung des Teppichs berechnet und enthält Informationen über die Verteilung von Poren mit unterschiedlichem Durchmesser und Umfang. Damit können die die Skalierung dieser Größen bestimmenden Exponenten berechnet werden. Während die Porenfläche zwei-dimensional ist, kann die Dimension des Porenumfangs mit der Random-Walk-Dimension in Zusammenhang gebracht werden.

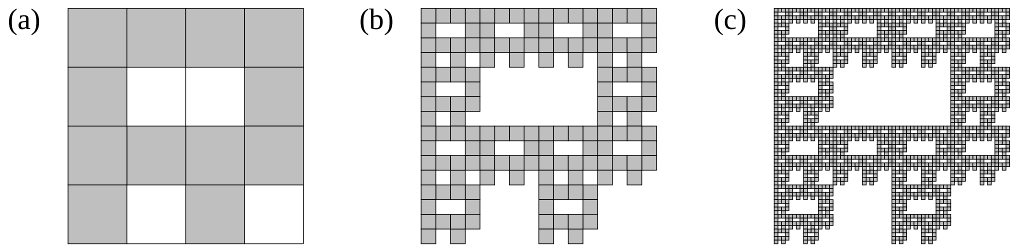


Abbildung 2.9: Beispiel für einen Generator (a) mit Poren und potentiellen Poren verschiedener Fläche, die in der zweiten (b) bzw. dritten (c) Iteration erst entstehen.

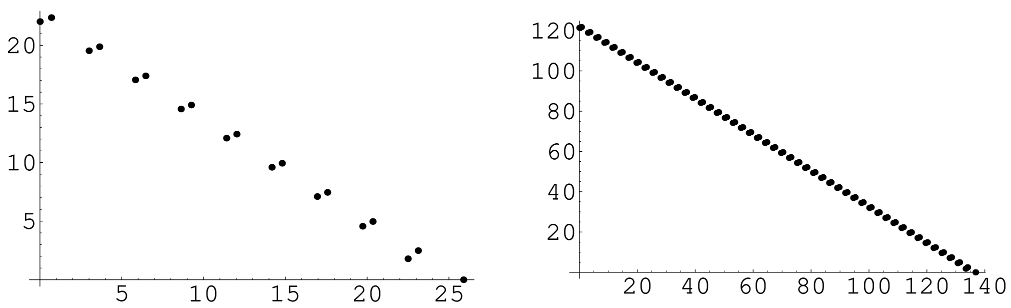


Abbildung 2.10: Doppelt-logarithmische Darstellung der Anzahl Poren über der Porenfläche für 10 (a) und 50 (b) Iterationen des Generators aus Abbildung 2.9.

Ein interessanter Aspekt dieser Arbeiten ist, dass poröse Materialien, wie z.B. Sedimentgestein, oft fraktale Eigenschaften auf bestimmten Längenskalen zeigen. Vorstufen deterministischer Fraktale, wie z.B. n-te Iterationen der Generatoren von Sierpinski-Teppichen, die periodisch wiederholt werden, können so durchaus als Modelle zum Studium der Diffusion in solch quasi-fraktalen Systemen herangezogen werden. Die Fragestellung, wie die makroskopische Diffusivität mit den Charakteristiken der fraktalen Strukturen in Zusammenhang gebracht werden kann, wurde in einer Zusammenarbeit mit S. Tarafdar untersucht [TFSH01]. Die Untersuchung des Diffusionsverhaltens auf "Sierpinski-Kristalle" für verschiedene Generatoren bestätigte zunächst den erwarteten Übergang von anomaler zu normaler Diffusion bei $\langle r^2 \rangle = R$, wobei R die Länge der Einheitszelle des Kristalls ist. Allerdings können Teppiche mit gleichem d_f und gleichem d_w durchaus verschiedene Diffusionskoeffizienten zeigen, abhängig von der Iterationsstufe des betrachteten Generators und auch von der anfänglichen anomalen Diffusionskonstante. Hier sind noch umfangreichere Studien für ein besseres Verständnis dieser Abhängigkeiten notwendig.

Ein noch immer offenes Problem ist die Kontinuumsbeschreibung von Diffusionsprozessen auf Fraktalen. Es gibt zwar einige Vorschläge [SED+00], aber aufgrund unserer sehr genauen numerischen Ergebnisse ist klar, dass es bisher keine befriedigende Beschreibung gibt. In diesem Zusammenhang haben wir eine Kooperation mit Prof. Essex (Canada), in der wir Eigenschaften von fraktionalen Diffusionsgleichungen untersuchen [HES98, ESFH00].

Literaturverzeichnis

Eigene referierte Publikationen

[DESF01] M. Davison, C. Essex, C. Schulzky, A. Franz, and K.H. Hoffmann. Clouds, Fibres and Echoes: a New Approach to Studying Random Walks on Fractals. accepted by *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 2001.

[ESFH00] C. Essex, C. Schulzky, A. Franz, and K.H. Hoffmann. Tsallis and Rényi entropies in fractional diffusion and entropy production. *Physica A*, 284(1-4):299, 2000.

[FSSH00b] A. Franz, C. Schulzky, S. Seeger, and K. H. Hoffmann. An efficient implementation of the exact enumeration method for random walks on Sierpinski carpets. *Fractals*, 8(2):155, 2000.

[HES98] K. H. Hoffmann, C. Essex, and C. Schulzky. Fractional diffusion and entropy production. *J. Non-Equilib. Thermodyn.*, 23:166, 1998.

[H99] K. H. Hoffmann. Slow relaxation dynamics from spin glasses to stochastic optimization. *Comp. Phys. Comm.*, 121-122(1-3):30, 1999.

[KSH98] T. Klotz, S. Schubert, and K. H. Hoffmann. Coarse graining of a spinglass state space. *J. Phys.: Condens. Matter*, 10(27):6127, 1998.

[SFSH01] S. Seeger, A. Franz, C. Schulzky, and K. H. Hoffmann. Random walks on finitely ramified Sierpinski carpets. *Comp. Phys. Comm.*, 134(3):307, 2001.

[TFSH01] S. Tarafdar, A. Franz, C. Schulzky, and K. H. Hoffmann. Modelling porous structures by repeated sierpinski carpets. *Physica A*, 292(1-4):1, 2001.

[SED+00] S. Schulzky, C. Essex, M. Davison, A. Franz, and K. H. Hoffmann. The similarity group and anomalous diffusion equations. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 33(31):5501, 2000.

[SFH00] Christian Schulzky, Astrid Franz, and Karl Heinz Hoffmann. Resistance scaling and random walk dimensions for finitely ramified Sierpinski carpets. Accepted for publication in *SIGSAM Bulletin*, 2000.

Zur Publikation eingereicht oder in Vorbereitung:

[BH01] P. Blaudeck and K. H. Hoffmann. Estimating energy landscape properties of amorphous systems. preprint, 2001.

[FSH00] Astrid Franz, Christian Schulzky, and Karl Heinz Hoffmann. The Einstein relation for finitely ramified Sierpinski carpets. Submitted to *Nonlinearity*, 2000.

[FSSH00a] Astrid Franz, Christian Schulzky, Steffen Seeger, and Karl Heinz Hoffmann. Diffusion on fractals – efficient algorithms to compute the random walk dimension. preprint, 2001.

[FSTH00] Astrid Franz, Christian Schulzky, Sujata Tarafdar, and Karl Heinz Hoffmann. The pore structure of Sierpinski carpets. Submitted to *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 2000.

Andere Zitate: Siehe auch Literaturverzeichnis zu 2.3

[HBA87] Shlomo Havlin and Daniel Ben-Avraham. Diffusion in disordered media. *Adv. Phys.*, 36(6):695, 1987.

[DBT99] Ruma Dasgupta, T. K. Ballabh, and S. Tarafdar. Scaling exponents for random walks on Sierpinski carpets and number of distinct sites visited: A new algorithm for infinite fractal lattices. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 32(37):6503, 1999.

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Bei der Relaxation komplexer Systeme gibt es – wie schon oben angedeutet – eine ganze Reihe offener Fragen:

Im Bereich der Zustandsraumuntersuchungen an Spingläsern ist zwar der Bereich um einzelne Energieminima herum untersucht, aber es stellt sich heraus, dass für die Frage einer gröberen Clusterung die bisher erzielte Enumeration der Zustände nicht ausreicht. Aufgrund größerer Rechnerresourcen sollte dies bald möglich werden, und es stellen sich dann Fragen wie:

- Wie sieht die Verbindung zwischen den Energietälern nah beieinanderliegender Minima aus?
- Kann eine Clusterung implementiert werden, die Energiebarrieren unterhalb einer gewissen Größe unberücksichtigt läßt?

Bei der Untersuchung der Zustandsräume kontinuierlicher Systeme gibt es ebenfalls naheliegende Ansatzpunkte für eine Verbesserung:

- Kann die Modellierung durch eine feinere Kategorisierung der Verweilzeiten, etwa nach weiteren Systemeigenschaften, zu einer Reduktion in der Varianz dieser Zeiten führen?
- Wie sieht eine hierarchische Struktur der Energieminima und -täler für die von uns untersuchten Systeme aus?

Und schließlich ergeben sich aus dem jetzigen Arbeitsstand im Bereich der Diffusion auf Fraktalen die folgenden Probleme:

- Wie sieht eine korrekte Kontinuumsbeschreibung für die Diffusion aus?
- Was passiert, wenn man die fraktale Struktur zusätzlich mit einer Energiefunktion versieht?
- Wie sieht das Wechselspiel zwischen Konnektivitäten und Überwindung von Energiebarrieren aus?

Eine ausführliche Darstellung der geplanten Vorhaben ist im Finanzierungsantrag 2002–2004, Teilprojekt C3, enthalten.

Teilprojekt C4

2.1 Teilprojekt C4

Parallele Implementierung von stochastischen Optimierungsverfahren und deren Anwendung

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Karl Heinz Hoffmann
29.7.1953
Theoretische Physik, insbesondere Computerphysik
Institut für Physik
Fakultät für Naturwissenschaften
Technische Universität Chemnitz
09107 Chemnitz
Telefon: (0371) 531-3212
e-mail: hoffmann@physik.tu-chemnitz.de

2.1.2 Projektbearbeiter

Prof. Dr. K. H. Hoffmann, Computerphysik
Dr. P. Blaudeck, Computerphysik
Dr. S. Schubert, Computerphysik
Dr. A. Fachat, Computerphysik
Dr. B. Heide, Computerphysik
Dipl.-Phys. J. Burzler, Computerphysik
Dr. S. Amelkin, Computerphysik
Dr. A. Franz, Computerphysik
Prof. Dr. A. Meyer, Numerische Mathematik
Prof. Dr. M. Schreiber, Theoretische Festkörperphysik

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Gegenstand dieses Teilprojektes war die parallele Implementierung stochastischer Optimierungsverfahren, insbesondere des Simulated Annealing (SA), mit verschiedenen Akzeptanzwahrscheinlichkeiten (Metropolis, Tsallis, Threshold Accepting). Stochastische Optimierungsverfahren kommen vor allem dann zum Einsatz, wenn die Zielfunktion viele lokale Minima aufweist. Dies ist z. B. bei der Frage nach der Grundzustandsenergie von komplexen Systemen (Spingläser, Neuronale Netzwerke, mechatronische Systeme, thermodynamische Systeme, amorphe Materialien) der Fall.

Um Simulated Annealing erfolgreich einzusetzen, ist die optimale Wahl der Abkühlfunktion von entscheidender Bedeutung. Eine besonders vielversprechende Basis bietet dabei der Ensemblezugang zum Simulated Annealing (EBSA), bei dem nicht ein einzelnes System sondern eine ganze Reihe von Kopien des Systems parallel abgekühlt werden. Dies gestattet es, bereits während des Abkühlens Informationen über die Natur des Systems zu gewinnen, die z.B. in die adaptive optimale Steuerung der Abkühlfunktion (oder auch der Move Class) einfließen können. Dieser Algorithmus kann sehr effektiv auf Parallelrechnern implementiert werden.

Das Teilprojekt hatte zum Ziel, für Simulated Annealing

die Move Class sowie
die adaptive Steuerung der Abkühlfunktion zu verbessern,
optimale Abkühlfunktionen zu finden,
den Einfluß anderer Akzeptanzregeln zu untersuchen,
populationsdynamische Elemente in die Algorithmen aufzunehmen und
einen Zusammenhang zwischen Zustandsraumstruktur und Effektivität
des Algorithmus aufzustellen.

Dabei können Ergebnisse nur durch die Behandlung konkreter Optimierungsprobleme erzielt werden. Es wurden Untersuchungen durchgeführt an

Travelling Salesman Problemen (TSP),
Atomaren Clustern,
thermodynamischen Prozeßführungen,
mechatronischen Systemen,
einfachen Zustandsraummodellen.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

2.3.1 Teilaufgabe Methoden der parallelen Implementierung

Als Grundlage zur Bearbeitung der oben genannten Teilaufgaben mußten zunächst effektive parallele Implementierungen [Gree90] von SA [Metr53, Kirk83, Duec90, Duec93] geschaffen werden. Die wichtigen Fragen hierbei waren die erzielbaren Speed-up's sowie die dahinterliegenden Kommunikationsprozesse und ihre optimale Gestaltung.

2.3.2 Teilaufgabe Verbesserung der Move Class

Untersuchungen zur Move Class Verbesserung wurden an TSP-Problemen durchgeführt, bei denen Besonderheiten der Problemstruktur ausgenutzt wurden [Lin94, Schn96]. Darüberhinaus wurden für die Optimierung von thermodynamischen Prozeßführungen [Beja96] bei Dieselmotoren eine Move Class für den Einsatz in kontinuierlichen Problemen entwickelt.

2.3.3 Teilaufgabe Optimale und adaptive Schedules

Zur Untersuchung der Frage, welche Eigenschaften optimale Abkühlfunktionen haben [Hoff90a] und wie Abkühlfunktionen adaptiv gesteuert werden können [Mari96], wurden verschiedene Systeme benutzt. Für Threshold Accepting wurden erste Untersuchungen an einem Barrierenmodell zur Bestimmung optimaler Abkühlfunktionen durchgeführt.

2.3.4 Teilaufgabe Einbeziehung von Populationsdynamik

Der Ensemble-Ansatz [Hoff90b, Rupp91] wurde durch Einbeziehung populationsdynamischer Elemente [Ebel90] in die Ensembleformulierung weiterentwickelt.

Literaturverzeichnis

[Metr53] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller und E. Teller, Equation of state calculations by fast computing machines, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).

[Kirk83] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt Jr. und M. P. Vecchi, Optimization by Simulated Annealing, Science **220**, 671 (1983).

[Gree90] D. R. Greening, Parallel Simulated Annealing techniques, Physica D **42** 293 (1990).

[Ebel90] W. Ebeling, A. Engel und R. Feistel, Physik der Evolutionsprozesse (Akademie-Verlag, Berlin, 1990)

[Duec90] G. Dueck und T. Scheuer, Threshold Accepting: A general purpose optimization algorithm appearing superior to Simulated Annealing, J. Comput. Phys. **90**, 161 (1990).

[Hoff90a] K. H. Hoffmann und P. Salamon, The optimal Simulated Annealing schedule for a simple model, J. Phys. A : Math. Gen. **23**, 3511 (1990).

[Hoff90b] K. H. Hoffmann, P. Sibani, J. M. Pedersen und P. Salamon, Optimal ensemble size for parallel implementations of Simulated Annealing, Appl. Math. Lett. **3**, 53 (1990).

[Rupp91] G. Ruppeiner, J. M. Pedersen und P. Salamon, Ensemble approach to Simulated Annealing, J. Physique I **1**, 455 (1991).

[Duec93] G. Dueck, New optimization heuristics: The Great Deluge Algorithm and Record-to-Record Travel, J. Comput. Phys. **104**, 86 (1993).

[Lin94] S. C. Lin und H. C. Hsueh, Nearest-neighbour heuristics in accelerated algorithms of optimization problems, Physica A **203**, 369 (1994).

[Schn96] J. Schneider, C. Froschhammer, I. Morgenstern, T. Husslein und J. M. Singer, Searching for backbones – an efficient parallel algorithm for the travelling salesman problem, Comp. Phys. Comm. **96**, 173 (1996)

[Mari96] F. P. Marin, New monitoring parameter for the travelling salesman problem, Phys. Rev. Lett. **77**, 5149 (1996).

[Beja96] A. Bejan, Entropy generation minimization: The new thermodynamics of finite-size devices and finite-time processes, J. Appl. Phys. **79**, 1191 (1996).

2.4 Ergebnisse

Wir haben bisher Arbeiten zu verschiedenen der oben genannten Fragestellungen durchgeführt [Hof99]. Gegenstand unserer Untersuchungen waren Fortentwicklungen des Simulated Annealing Algorithmus [MDSF99], der Ensemblezugang zum Threshold Accepting [TH99], die Bestimmung der Gleichgewichtsverteilung für Threshold Accepting [FHF00], und Vergleiche von Metropolis Algorithmus, Threshold Accepting und Tsallis Statistics basiertem Algorithmus [FH00b]. Schließlich haben wir für ein Anwendungsproblem ein besonders effektives Simulated Annealing basiertes Verfahren implementiert.

Im Bereich des Ensemblezugangs zum Simulated Annealing haben wir einen adaptiven Algorithmus vorgestellt [TH99], der es erlaubt die Abkühlkurve, d.h. das Herunterfahren des Thresholds, an das Verhalten der Ensemblemitglieder anzupassen. Hierbei konnte gezeigt werden, dass unser parallel implentierter Algorithmus bessere Ergebnisse erzielt, als wenn man etwa die gesamten Rechnerresourcen in sequentieller Weise einsetzt.

Bei der Untersuchung des Threshold Accepting Algorithmus stellte sich die Frage, wie die Gleichgewichtverteilung von der Energie abhängt. Dies ist für diese Akzeptanzregel nicht einfach zu beantworten, da das System keine detailierte Ballance besitzt. Es zeigte sich überraschenderweise [FHF00], dass sich eine angenäherte Exponentialverteilung als Gleichgewichtsverteilung ergibt.

In einer weiteren Arbeit konnten wir beim Vergleich von Threshold Accepting Algorithmus und Tsallis Statistics zeigen [FH00b], dass sich ersterer als Spezialfall des letzteren darstellen lässt. Damit ergeben sich natürlich Rationalisierungseffekte bei zukünftigen Arbeiten.

Für Tsallis Statistics bestimmten wir [FH00a] dann optimale Abkühlverfahren. Hier untersuchten wir insbesondere die Abhängigkeit von dem Parameter q, der in diesen Algorithmus eingeht. Dabei zeigte sich, dass immer der Limes $q \to -\inf$ zu den besten Ergebnissen führte.

Bei unseren Vergleichen der verschiedenen Algorithmen war uns immer wieder aufgefallen, dass Threshold Accepting die besten Ergebnisse erzielte. Es ist uns dann gelungen [FHS00], allgemein zu beweisen, dass Threshold Accepting in einer weiten Klasse von Algorithmen, die das klassische Simulated Annealing und auch die Tsallis Statistics enthält, der best mögliche Algorithmus ist.

Schließlich entstanden optimierte Simulated Annealing Algorithmen zur Lösung eines Anwendungsproblems.

Die laufenden Arbeiten an diesem Teilprojekt dauern an und werden zum Ende des Jahres 2001 beendet. Der ausführliche Abschlußbericht für das Teilprojekt wird dann mit den vollständigen Ergebnissen nachgereicht.

Literaturverzeichnis

[FH00a] Astrid Franz and Karl Heinz Hoffmann. Optimal annealing schedules for a modified Tsallis statistics. Submitted to *Journal of Computational Physics*, 2000.

[FH00b] Astrid Franz and Karl Heinz Hoffmann. Threshold Accepting as limit case for a modified Tsallis statistics. Submitted to *Applied Mathematics Letters*, 2000.

[FHF00] A. Fachat, K.H. Hoffmann, and A. Franz. Simulated annealing with threshold accepting or tsallis statistics. *Comp. Phys. Comm.*, 132(3):232–240, 2000.

[FHS00] Astrid Franz, Karl Heinz Hoffmann, and Peter Salamon. Threshold accepting is the best possible strategy in simulated annealing. Submitted to *Physical Review Letters*, 2000.

[Hof99] K. H. Hoffmann. Slow relaxation dynamics from spin glasses to stochastic optimization. *Comp. Phys. Comm.*, 121-122(1-3):30–33, 1999.

[MDSF99] A. Möbius, A. Díaz-Sánchez, B. Freisleben, M. Schreiber, A. Fachat, K.H. Hoffmann, P. Merz, and A. Neklioudov. Two physically motivated algorithms for combinatorial optimization: thermal cycling and iterative partial transcription. *Comp. Phys. Comm.*, 121-122(1-3):34–36, 1999.

[TH99] R. Tafelmayer and K. H. Hoffmann. Adaptive schedules for ensemble-based threshold accepting. *Appl. Math. Lett.*, 12(5):131–135, 1999.

Teilprojekt C6

2.1 Teilprojekt C6

Fluktuationen von Matrixelementen in ungeordneten Systemen

– Das Teilprojekt soll nicht fortgesetzt werden. –

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Michael Schreiber
22.04.54
Professur Theoretische Physik III (Theorie ungeordneter Systeme)
Institut für Physik
Technische Universität Chemnitz
09107 Chemnitz
Tel. (0371) 531-3142
Fax. (0371) 531-3143
email: schreiber@physik.tu-chemnitz.de

Dr. Bernhard Mehlig
06.12.64
Hochschuldozent Theoretische Quantendynamik, Fakultät für Physik
Universität Freiburg, Hermann-Herder-Str. 3, 79192 Freiburg
Tel. (0761) 203-5948
email: mehlig@tqd1.physik.uni-freiburg.de

Dr. Mehlig hat 1999 wie vorgesehen intensiv im SFB mitgearbeitet und die regelmäßige Betreuung des Doktoranden (siehe 2.1.2) übernommen. Ende 1999 wurde er auf eine Hochschuldozentur an der Fakultät für Physik der Unversität Freiburg berufen und schied deshalb Anfang 2000 aus dem SFB 393 aus. Trotzdem hat er als Kooperationspartner auch weiterhin an den Arbeiten dieses Teilprojekts mitgewirkt. Dies wurde durch mehrere Besuche des Doktoranden in Freiburg erleichtert. Inzwischen hat Dr. Mehlig einen Ruf auf eine Professur in Chalmers (Technische Universität Göteborg, Schweden) angenommen.

2.1.2 Projektbearbeiter

Prof. Dr. Michael Schreiber
Dr. Bernhard Mehlig
F.M. Ville Uski
Dr. Rudolf A. Römer (C1)
Dr. Frank Milde (C1)

Die für das Projekt bewilligte Stelle (BAT-IIa/2) wurde mit Ville Uski besetzt, der die unten beschriebenen analytischen und numerischen Arbeiten unter Anleitung der Antragsteller durchgeführt hat. Unterstützt wurde er bei den numerischen Untersuchungen von Dr. Römer (TP C1). Wesentlich war auch die Hilfe von Dr.

Milde (TP C1), ohne dessen Erfahrungen bei der Diagonalisierung sehr großer Matrizen die numerischen Ergebnisse in dem hier vorliegendem Teilprojekt nicht mit der erforderlichen Genauigkeit hätten erreicht werden können.

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Das Teilprojekt wurde in der Förderungsperiode 1999–2001 neu in den SFB 393 aufgenommen mit dem Ziel, die statistischen Eigenschaften von Wellenfunktionen, Erwartungswerten und Übergangsmatrixelementen in komplexen Quantensystemen zu verstehen. Mit komplexen Quantensystemen sind dabei abgeschlossene Quantensysteme gemeint, die bei einer großen Zahl von diskreten Energieniveaus nur wenige gute Quantenzahlen aufweisen, beispielsweise hochangeregte Atome und Moleküle mit klassisch chaotischer Dynamik, mesoskopische Quantensysteme und ungeordnete Quantendrähte.

Das einfachste und zugleich bedeutendste [1] Modell für ungeordnete elektronische Quantensysteme ist das Modell freier Elektronen, die sich in einem Unordnungspotential bewegen, das durch eine Gaußsche Zufallsfunktion $v(\mathbf{r})$ gegeben ist ($\mathbf{r} = (x, y, \ldots)$ ist die Ortskoordinate im Konfigurationsraum):

$$\langle v(\mathbf{r}) \rangle = 0\,, \qquad \langle v(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}') \rangle = (2\pi\nu\tau)^{-1} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\,. \tag{2.1}$$

Dabei ist $\langle \cdots \rangle$ das Mittel über Realisierungen des Unordnungspotentials, $\nu = 1/(V\Delta)$ die elektronische Zustandsdichte, V das Volumen des Systems und Δ der mittlere Abstand zwischen benachbarten Energieniveaus. Die Hamiltonfunktion ist durch

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + v(\mathbf{r}) \tag{2.2}$$

gegeben, mit Masse m und Impuls $\mathbf{p}$. In [2] ist bewiesen worden, daß die statistischen Eigenschaften von Eigenwerten, Eigenfunktionen und Matrixelementen im Rahmen der Theorie der Zufallsmatrizen verstanden werden können, aber nur unter der Voraussetzung genügend schwacher Unordnung und auf der Skala des mittleren Niveauabstandes Δ. Es zeigt sich, daß Fluktuationen in ungeordneten elektronischen Quantensystemen unter diesen Voraussetzungen universell sind: sie hängen lediglich von der Symmetrie und nicht von anderen mikroskopischen Details des Systems ab, z. B. nicht von der Wahl des Zufallspotentials (2.1) oder von Einzelheiten des Hamiltonoperators (2.2).

Gleiches gilt für Fluktuationen in hochangeregten Quantensystemen mit klassisch chaotischer Dynamik. Auch hier sind die statistischen Eigenschaften von Eigenwerten, Wellenfunktionen und Matrixelementen universell auf der Skala des mittleren Niveauabstandes. Dies gilt allerdings nur unter der weiteren Voraussetzung, daß der klassische Phasenraum genügend homogen ist und keine Transportbarrieren den Phasenfluß hemmen. Solche Transportbarrieren können verschiedener Natur sein: selbstähnliche Strukturen am Rande elliptischer Inseln, Transportbarrieren entlang Mannigfaltigkeiten kurzer, instabiler periodischer Bahnen, adiabatisch stabile periodische Bahnen oder auch Cantori. Ein Beispiel für ein System mit universellen statistischen Eigenschaften ist die Bewegung eines Massenpunktes innerhalb des sog. Sinaibilliards. Die Hamiltonfunktion ist allein durch die kinetische Energie gegeben,

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\,. \tag{2.3}$$

Klassisches und Quantenchaos werden hier durch die Randbedingungen erzeugt.

Universelle Aspekte statistischer Eigenschaften von Eigenwerten, Wellenfunktionen und Matrixelementen sind im Laufe der vergangenen 10 Jahre im Detail untersucht worden und gut verstanden. Abweichungen von universellem Verhalten (aufgrund stärkerer Unordnung in ungeordneten Systemen oder infolge von Phasenrauminhomogenitäten in klassisch chaotischen Systemen) sind weit weniger gut verstanden. Die meisten experimentell relevanten Systeme weisen Abweichungen von universellem Verhalten auf. Es ist deshalb von großer Bedeutung, solche systemspezifischen Abweichungen zu untersuchen und zu quantifizieren.

Darüber hinaus ist in jüngster Zeit eine weitere Verallgemeinerung bekannter Zufallsmatrixtheorien auf großes Interesse gestoßen: Die Hamiltonoperatoren (2.2) und (2.3) – mit entsprechenden Randbedingungen – sind Hermitesch und werden im Rahmen der Theorie der Zufallsmatrizen durch symmetrische oder Hermitesche Matrizen modelliert. Zufallsmatrizen sind aber auch im Zusammenhang mit vielen anderen physikalischen Fragestellungen von Bedeutung, beispielsweise für die Dynamik neuronaler Netzwerke, für die Quantenmechanik offener Systeme, für die Statistische Mechanik von Flußlinien in Supraleitern mit kolumnarer Unordnung wie auch für klassische Diffusion in ungeordneten Medien. In allen diesen Fällen sind die Zufallsmatrizen nicht Hermitesch. In jüngster Zeit sind die statistischen Eigenschaften von Eigen*werten* in solchen Systemen im Detail untersucht worden. Über die statistischen Eigenschaften der Eigen*vektoren* (d.h. der Wellenfunktionen) ist weit weniger bekannt. Weil in nicht-Hermiteschen Systemen die statistischen Eigenschaften der Eigenvektoren die Dynamik bestimmen, müssen solche Eigenvektorfluktuationen systematisch untersucht und quantitativ berechnet werden.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

Aus dem im vorigen Abschnitt beschriebenen Stand der Forschung ergaben sich folgende Fragestellungen im Rahmen des Teilprojektes:

1. Berechnung parametrischer Korrelationen von Diagonal- und Übergangsmatrixelementen
2. Bestimmung der statistischen Eigenschaften von Wellenfunktionen in ungeordneten Systemen
3. Berechnung der statistischen Eigenschaften von Eigenvektoren in nicht-Hermiteschen Zufallsmatrixensembles
4. Quantifizierung der statistischen Eigenschaften von Matrixelementen in abgeschlossenen, ungeordneten Quantensystemen

5. Berechnung des Einflusses von Phasenrauminhomogenitäten auf Matrixelemente in abgeschlossenen, klassisch chaotischen Quantensystemen.

Von diesen Fragestellungen sind die Punkte 2 und 3 ausführlich bearbeitet worden, einige Ergebnisse liegen für die Fragestellungen 1 und 4 vor, die Frage 5 wurde zunächst nicht verfolgt.
Die verwandten Methoden sind im Antrag erläutert worden. Wie dort beschrieben, sind sowohl umfangreiche analytische Untersuchungen als auch hochgenaue numerische Rechnungen durchgeführt worden.

Bei den *numerischen Rechnungen* handelt es sich in erster Linie um exakte Diagonalisierungen von Hamiltonoperatoren, um Eigenwerte *und* Wellenfunktionen zu bestimmen. Im Falle ungeordneter Systeme sind die exakten Diagonalisierungen für einen *tight-binding*-Hamiltonoperator auf einem (hyper-)kubischen Gitter $\mathbf{r}$ mit Gitterabstand a_0 durchgeführt worden,

$$\widehat{H} = \sum_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} c_{\mathbf{r}}^{\dagger}\, c_{\mathbf{r}'} + \sum_{\mathbf{r}} v_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}}^{\dagger} c_{\mathbf{r}}\,. \tag{2.4}$$

Dabei sind $c_{\mathbf{r}}^{\dagger}$ und $c_{\mathbf{r}}$ Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Das Unordnungspotential $v(\mathbf{r})$ ist gaußverteilt, siehe Gl. (2.1). Die Hüpfamplituden sind $|t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}| = 1$, wenn $\mathbf{r}$ und $\mathbf{r}'$ nächste Nachbarn sind, und sonst null. Die Phasen der Hüpfamplituden bestimmen, ob die Koeffizienten der Wellenfunktionen alle rein reell gewählt werden können oder nicht, so daß durch einen entsprechenden Phasenfaktor der Übergang von der orthogonalen zur unitären Symmetrie bei Einschalten eines Magnetfeldes beschrieben werden kann.

Die entsprechende Säkularmatrix ist dünn besetzt und sehr groß. Die Diagonalisierungen wurden deshalb mit einem speziell auf das Problem zugeschnittenen Algorithmus durchgeführt [3]. Die in Punkt 3 untersuchten nicht-Hermiteschen Zufallsmatrizen sind dagegen voll besetzt und so klein ($N \leq 2000$), daß sie mit herkömmlichen Methoden diagonalisiert werden können. Die entsprechenden unten beschriebenen Ergebnisse wurden mit Hilfe von Diagonalisierungsroutinen der NAG-Bibliothek erzeugt.

Die *analytischen* Rechnungen zu Punkt 3 verwenden die in [4] dargestellten Verfahren.

Literaturverzeichnis

[1] I. M. Lifshitz and L. A. Pastur, *Introduction to the theory of disordered systems* (Wiley, New York, 1988).

[2] K. B. Efetov, Adv. Phys. **32**, 53 (1983).

[3] J. Cullum und R. A. Willoughby, *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations* (Birkhäuser, Boston, 1985).

[4] M. L. Mehta, *Random Matrices and the Statistical Theory of Energy Levels* (Academic Press, New York, 1991).

[5] A. D. Mirlin, Phys. Rep. **326**, 259 (2000).

[6] J. Zittartz und J. S. Langer, Phys. Rev. **148**, 741 (1966).

[7] I. E. Smolyarenko and B. L. Altshuler, Phys. Rev. B **55**, 10451 (1997).

[8] Ya. M. Blanter, A. D. Mirlin, and B. A. Muzykantskii, cond-mat/0011498 v2 (2000).

[9] Y. V. Fyodorov and B. A. Khoruzhenko, Y. Fyodorov and B. Khoruzenko, cond-mat/9903043 v2 (unpublished); Phys. Rev. Lett. **83**, 65 (1999).

2.4 Ergebnisse

Die bisher erzielten Resultate bezüglich der universellen parametrischen Korrelationen in komplexen Quantensystemen, insbesondere auch im Anderson-Modell der Lokalisierung sind in [UMR98, UMRS99] dargestellt. Die Ergebnisse der Untersuchung von Punkt 2. sind in [UMRS00a, UMS01] zusammengefaßt. Die Veröffentlichungen [SM01, MC00] stellen die Ergebnisse zu Punkt 3. dar. Einen Überblick über alle erzielten Ergebnisse zum Anderson-Modell der Lokalisierung, insbesondere über die numerischen Resultate gibt die Dissertation von Herrn Uski [U01].

1. Für die Korrelationsfunktionen haben wir unsere numerischen Daten mit Vorhersagen einer von uns erarbeiteten semiklassischen Theorie verglichen und sehr gute Übereinstimmung im schwach ungeordneten Falle gefunden, in dem die Statistik universell ist. Wenn der magnetische Fluss eingeschaltet wird, zeigt die Statistik einen Übergang von der orthogonalen zur unitären Universalitätsklasse [UMR98, UMRS99].

2. In [UMR98, UMRS00a, UMRS00b] sind die Verteilungsfunktionen von Wellenfunktionsamplituden in ein-, zwei-, drei- und quasi-eindimensionalen ungeordneten Quantensystemen untersucht worden, und zwar als Funktion der dimensionslosen Leitfähigkeit g, die Abweichungen von universellem Verhalten aufgrund von Wellenfunktionslokalisierung parametrisiert. Solche Abweichungen können insbesondere in den *tails* der Amplitudenverteilungen von Bedeutung sein (sog. *rare events*). Die Seltenheit solcher *rare events* ist mit Hilfe von zwei verschiedenen Methoden theoretisch vorhergesagt worden, und zwar zum einen mit Hilfe des nicht-linearen σ-Modells [2]. Dieses Modell geht von einer diffusiven klassischen Elektrondynamik aus ([5] gibt einen Überblick über die verwandeten Näherungen und die Ergebnisse). Zum anderen sind solche Verteilungen mit der sog. Zittartz-Langer-Methode [6] berechnet worden [7]. Die beiden Methoden (nicht-lineares σ-Modell und Zittartz-Langer-Methode) ergeben widersprüchliche Resultate.

   In [UMRS00a] wurden Wellenfunktionsamplitudenverteilungen für den Hamiltonoperator (2.4) numerisch berechnet. Um den Einfluss der unterschiedlichen Symmetrien mit und ohne Brechung der Zeitumkehrinvarianz auf die Statistik zu erkennen, wurde das Modell sowohl mit als auch ohne externen

Magnetfluss untersucht. Dabei hat sich gezeigt, daß die Verteilungen in quasi-eindimensionalen Systemen sehr gut mit den Vorhersagen des nicht-linearen σ-Modells übereinstimmen, aber nur unter der Voraussetzung, daß die dimensionslose Leitfähigkeit nicht zu groß ist. In zweidimensionalen Systemen stimmen die *tails* der Wellenfunktionsverteilungen qualitativ mit den Vorhersagen des nicht-linearen Sigmamodells überein (es ergeben sich lognormale *tails*). Die Koeffizienten weichen aber deutlich von den Ergebnissen des nicht-linearen σ-Modells ab. Die Ergebnisse der Zittartz-Langer-Methode sind in diesem Fall konsistent mit den numerischen Ergebnissen. Um überzeugend Übereinstimmung demonstrieren zu können, müßten sehr viel größere Systeme diagonalisiert werden. In dreidimensionalen Systemen ist es zur Zeit nicht möglich, genügend große Systeme zu diagonalisieren und eine genügend große Zahl von statistisch unabhängigen *samples* zu behandeln.

Aus den Ergebnissen von [UMRS00a] ergeben sich damit folgende weiterführende Fragestellungen: erstens muß untersucht werden, warum die Wellenfunktionsstatistik in quasi-eindimensionalen Systemen nur dann mit den Vorhersagen des nicht-linearen σ-Modells übereinstimmt, wenn g nicht zu groß ist. Die zusätzliche Bedingung (g darf nicht zu groß sein) läßt sich nicht im Rahmen des herkömmlichen (diffusiven) nicht-linearen σ-Modells rechtfertigen. Zweitens müssen in höher-dimensionalen Systemen größere und vor allem mehr *samples* diagonalisiert werden, um zu entscheiden, ob die in [7] zusammengefaßten Ergebnisse die numerischen Daten adäquat beschreiben.

Letzteres ist bei der vorhandenen Rechenkapazität selbst mit dem außerordentlich effektiven Lanczosalgorithms [3] nicht möglich. Die erste Frage wird in [UMS01] beantwortet. Eine mögliche Begründung der oben erwähnten zusätzlichen Bedingung findet sich in [5]: für sehr große Werte von g können in quasi-eindimensionalen ungeordneten Systemen ballistische Effekte die statistischen Eigenschaften von Eigenwerten und Wellenfunktionen dominieren. Die in [5] vorgeschlagene Bedingung ist

$$g^{-1} \gg \lambda_{\mathrm{F}}/\ell\,. \tag{2.5}$$

Dabei ist λ_{F} die Fermiwellenlänge und ℓ die mittlere freie Weglänge. In [UMS01] konnte anhand von exakten Diagonalisierungen des Hamiltonoperators (2.4) verifiziert werden, daß das diffusive nicht-lineare σ-Modell quasi-eindimensionale Systeme nur unter der zusätzlichen Bedingung (2.5) beschreibt. Darüber hinaus konnte gezeigt werden, in welcher Weise ballistische Effekte die Vorhersagen des diffusiven nicht-linearen σ-Modells modifizieren.

3. Unsere Ergebnisse zur Eigenvektorstatistik in nicht-Hermiteschen Zufallsmatrixensembles sind in den Arbeiten [SM01, MC00] zusammengefaßt. In [MC00] wird argumentiert, daß die statistischen Eigenschaften der Eigenvektoren von größter Bedeutung für die Dynamik ungeordneter, nicht-Hermitescher Systeme sind. Darüber hinaus konnten die statistischen Eigenschaften der Eigenvektoren in Ginibre's Ensemble nicht-Hermitescher Zufallsmatrizen analytisch exakt bestimmt werden. Des weiteren wurde ein analytisches Approximationsverfahren entwickelt, das es erlaubt, auch andere, allgemeinere

Ensembles zu behandeln. Schließlich konnte gezeigt werden, in welchen physikalischen Situationen Eigenvektorkorrelationen relevant werden können.

Es stellt sich die Frage, inwieweit die exakten Ergebnisse für Ginibre's Ensemble auch für andere Ensembles von Bedeutung sind. Greift auch im Falle nicht-Hermitescher Ensembles ein Universalitätsprinzip, wie im Falle Hermitescher Ensembles oben erwähnt? Diese Frage konnte in [SM01] beantwortet werden. In dieser Arbeit wurden die statistischen Eigenschaften von Eigenvektoren in einem Modell für ein offenes, klassisch chaotisches Quantensystem [9] numerisch bestimmt und mit den Ergebnissen approximativer analytischer Rechnungen verglichen. Dabei konnte gezeigt werden, daß die statistischen Eigenschaften der Eigenvektoren lokal universell sind, d.h. auf Skalen sehr viel kleiner als die typische Bandbreite des Spektrums (i.A. ist das Spektrum nicht-Hermitescher Matrizen nicht auf die reelle Achse beschränkt).

Darüber hinaus war Herr Uski noch an Untersuchungen zu den kritischen Eigenschaften des Metall-Isolator-Übergangs in anisotropen Systemen beteiligt [MRSU00], die nicht in direktem Zusammenhang mit diesem Teilprojekt stehen.

Literaturverzeichnis

Referierte Originalarbeiten

[MC00] *Statistical properties of eigenvectors in non-Hermitian Gaussian random matrix ensembles*, B. Mehlig und J. Chalker, J. Math. Phys. **41**, 3233 (2000)

[MRSU00] *Critical properties of the metal-insulator transition in anisotropic systems*, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, und V. Uski, Eur. Phys. J. B **15**, 685–690 (2000)

[SM01] *Universal eigenvector statistics in a quantum scattering ensemble* M. Santer und B. Mehlig, Phys. Rev. E (Rapid Communications), (2001) im Druck

[UMR98] *A numerical study of wave-function and matrix-element statistics in the Anderson model of localization*, V. Uski, B. Mehlig, und R. A. Römer, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 437–441 (1998)

[UMRS00a] *An exact-diagonalization study of rare events in disordered conductors*, V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, und M. Schreiber, Phys. Rev. B **62**, R7699–R7702 (2000)

[UMRS00b] *Incipient localization in the Anderson model*, V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, und M. Schreiber, Physica B **284–288**, 1934–1935 (2000)

[UMRS99] *Smoothed universal correlations in the two-dimensional Anderson model*, V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, und M. Schreiber, Phys. Rev. B **59**, 4080–4090 (1999)

Eingereichte Manuskripte

[UMS01] *Signatures of ballistic effects in disordered conductors*, V. Uski, B. Mehlig und M. Schreiber, Phys. Rev. E (Rapid Communications) (2001), zur Veröffentlichung eingereicht

Diplom-, Doktor- und Habilitationsarbeiten

[U01] *Universality in the Anderson-Model of Localization*, V. Uski, Doktorarbeit, TU Chemnitz (voraussichtlich 04/2001)

Konferenzbeiträge

[B98umrs] *Universal parametric correlations in complex quantum systems*, V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, und M. Schreiber, Poster, 210. WE-Heraeus Seminar PILS'98, Berlin (10/1998)

[C00umrs] *Statistics of rare events in the Anderson model of localization*, V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, und M. Schreiber, Poster, WE-Heraeus-Ferienkurs für Physik: Vom Billardtisch bis Monte Carlo - Spielfelder der Statistischen Physik, Chemnitz (09/2000)

[D00m] *Eigenvector correlations in non-Hermitian random matrix ensembles*, B. Mehlig, Vortrag, Erstes Dresdner Herbstseminar des Arbeitskreises Nichtlineare Physik: *Nichtgleichgewichtsprozesse in neuen Materialien*, Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Dresden (11/2000)

[D99ursm] *Incipient localisation in the Anderson model*, V. Uski, R. A. Römer, M. Schreiber und B. Mehlig, Poster, *Dynamics of Complex Systems*, MPI-PKS Dresden (05/1999)

[E00umrs] *Wave function statistics in disordered systems with GOE- and GUE-universality*, Vortrag, V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, und M. Schreiber, Vortrag, *1. Symposium Schwerpunktprogramm "Quanten-Hall-Systeme"*, Bad Elster (04/2000)

[H00m] *Eigenvector correlations in non-Hermitian random matrix ensembles*, B. Mehlig, Vortrag, SCIENCE Workshop "Mesoscopics 2000", Universität Hamburg (02/2000)

[H99umrs] *Incipient localization in the Anderson model*, V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, und M. Schreiber, Poster, 22nd International Conference on Low Temperature Physics (LT22), Helsinki (08/1999)

[H01ums] *Deviations from universality in spectral statistics of the Anderson model*, V. Uski, B. Mehlig und M. Schreiber, Poster, DPG-Frühjahrstagung des Arbeitskreises Festkörperphysik, Hamburg (03/2001)

[H01ursm] *An exact-diagonalization study of rare events in disordered conductors*, V. Uski, R. A. Römer, M. Schreiber und B. Mehlig, Poster, DY, 65. Frühjahrstagung der DPG, Hamburg (03/2001)

[M99umrs] *Incipient localisation in the Anderson model*, V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, und M. Schreiber, Poster, DY 41.26, 63. Frühjahrstagung der DPG, Münster (03/1999)

[R00umrs] *Wave function statistics in the Anderson model of localization*, V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, und M. Schreiber, Poster, DY 17.3, 64. Frühjahrstagung der DPG, Regensburg (03/2000)

[S00m] *Eigenvector correlations in non-Hermitian random matrix ensembles*, B. Mehlig, Vortrag, Internationale Konferenz "New Directions in Mesoscopic Physics", Strasbourg, Frankreich (04/2000)

[S01rusm] *An exact-diagonalization study of rare events in disordered conductors*, R. A. Römer, V. Uski, M. Schreiber und B. Mehlig, Poster, 1.4, APS March meeting, Seattle, USA (03/2001)

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Bezüglich der Wellenfunktionsstatistik wäre es von großem Interesse, die in [UMS01] zusammengefaßten numerischen Ergebnisse mit analytischen Resultaten zu vergleichen. Die analytische Berechnung von Verteilungsfunktionen in Gegenwart ballistischer Effekte sollte mit Hilfe des in [8] vorgeschlagenen Modells möglich sein.

Bei den Untersuchungen der nicht-Hermiteschen Zufallsmatrixensembles wäre es interessant, zu zeigen, daß sich die in [SM01, MC00] bestimmten Eigenvektorkorrelationen in hochangeregten Atomen mit klassisch chaotischer Dynamik wiederfinden. Dazu wäre es notwendig, die Resonanzzustände von Helium numerisch zu bestimmen.

Eine interessante bisher nicht behandelte Fragestellung bezüglich der Matrixelemente in abgeschlossenen, klassisch chaotischen Quantensystemen betrifft die Abweichungen vom universellen Verhalten, die durch Inhomogenitäten in Phasenraum hervorgerufen werden können, wie im Kapitel 2.2 geschildert.

Projektbereich

D

Teilprojekt D1

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 und Verfahrenstechnik
TU Chemnitz

Prof. Dr. A. Meyer
Professur Numerische Analysis
Fakultät für Mathematik
TU Chemnitz

Prof. Dr. M. Kuna
Institut für Mechanik und Maschinenelemente
Fakultät für Maschinenbau, Verfahrens- und Energietechnik
TU Bergakademie Freiberg

2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. U. Benedix
Professur Festkörpermechanik
Institut für Mechanik
Fakultät für Maschinenbau und Verfahrenstechnik
TU Chemnitz

Dr. M. Scherzer
Institut für Mechanik und Maschinenelemente
Fakultät für Maschinenbau, Verfahrens- und Energietechnik
TU Bergakademie Freiberg

Dr. U.-J. Görke
Professur Festkörpermechanik
Institut für Mechanik
Fakultät für Maschinenbau und Verfahrenstechnik
TU Chemnitz

Dr. D. Michael
Institut für Mechanik und Maschinenelemente
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 Entwicklungs- und Konstruktionsprozesse bewirkt. Insbesondere der Ersatz aufwendiger Versuchsreihen durch anwenderfreundliche kommerzielle computergestützte Simulationstechniken führt seit mehreren Jahren zum verstärkten Einsatz der Finite-Element Methode (FEM) in nahezu allen Industriebranchen. Bei der Entscheidung für eine spezielle Software stehen in der Praxis zwei Kriterien besonders im Vordergrund – Effektivität (Zeitersparnis) und Genauigkeit. Die Untersuchungen im Rahmen des SFB dienen vordergründig der Effektivitätssteigerung numerischer Simulationen, wobei die Zeiteinsparung eine Approximation des realen Bauteilverhaltens durch komplexere Modelle ermöglicht, und damit auch die Genauigkeit der Berechnungen vergrößert wird.

Teilprozesse einer FE-Simulation, die in den Integrationsstützstellen der Elemente abgearbeitet werden, benötigen in der Regel keine Informationen von anderen Gebieten der vernetzten Geometrie. So finden beispielsweise die Integration des Deformationsgesetzes und die dazu konsistente Berechnung der lokalen Steifigkeitsmatrix separat in jedem materiellen Punkt statt. Einen umfangreichen Informationsaustausch erfordern hingegen die Ein- und Ausgabe modellrelevanter Daten sowie die Lösung des globalen Steifigkeitssystems. Der hohe Anteil rechenintensiver Prozesse, die unabhängig voneinander an unterschiedlichen Orten der Geometrie, quasi "gleichzeitig", bearbeitet werden können, bewirkt die natürliche Effizienzsteigerung einer FE-Berechnung bei deren Parallelisierung. Besonders deutlich wird dieser Vorteil gegenüber der herkömmlichen, sequentiellen Vorgehensweise bei der Simulation geometrisch und physikalisch nichtlinearer Modelle mittels inkrementell-iterativer Algorithmen und der Lösung von Optimierungsproblemen, beispielsweise bei der Materialparameteridentifikation durch Analyse inhomogener Verschiebungsfelder, mit der Notwendigkeit der mehrfachen Wiederholung vollständiger Vorwärtsrechnungen. Eine Bearbeitung von Optimierungsaufgaben auf der Basis nichtlinearer mechanischer Probleme erscheint überhaupt erst durch Anwendung der Parallelrechentechnik sinnvoll möglich.

An der TU Chemnitz werden seit mehreren Jahren in den Bereichen Informatik und Mathematik Untersuchungen zum Aufbau und Transport effizienter Datenstrukturen sowie zur effektiven Lösung großdimensionierter linearer algebraischer Gleichungssysteme durchgeführt. Unter Nutzung dieser Erfahrungen war es ein Ziel, im Rahmen des SFB ein FEM-Programm zur Simulation inelastischen Materialverhaltens für massiv parallele Rechner zu erstellen und für Praxisanwendungen vorzubereiten. Hauptaugenmerk sollte dabei auf die Entwicklung effizienter Zeitdiskretisierungsverfahren und Gleichungslöser gerichtet werden.

Während schnelle Löser bei 2D und 3D–Elastizitätsproblemen mit hierarchischen oder BPX–Techniken seit längerer Zeit bekannt und in den Programmrealisierungen SPC–PMEl2D (2D–Elastizität) und SPC–PMAd3T (eine erste Experimentalrealisierung für 3D– Potential– und Elastizitätsprobleme [vgl. Teilprojekt A3]) integriert sind, konnte die Eignung hierarchischer Techniken für Probleme der ebenen Elasto–Plastizität erstmals im Rahmen von Arbeiten der DFG–Forschergruppe „SPC“ gezeigt und mit dem Programm SPC–PMEP verfügbar gemacht werden. Weiterhin erfolgten die Implementierung und Testung der BPX–Vorkonditionierung. Die Programmentwicklung für die Bearbeitung geometrisch linearer (kleine Verzerrungen), aber physikalisch nichtlinearer Probleme (elastisch-plastisches Materialverhalten mit isotroper, kinematischer und formativer Verfestigung) konnte im vorausgegangenen Berichtszeitraum abgeschlossen und erfolgreich für die Materialparameteridentifikation genutzt werden.

Reale Problemstellungen der Festkörpermechanik, insbesondere im Bereich der Elasto-Plastizität (z. B. Simulation von Umformvorgängen), lassen sich in der Regel nicht hinreichend zuverlässig mit geometrisch linearen Modellen beschreiben. Im laufenden Berichtszeitraum erfolgte somit konsequenterweise die Entwicklung eines FE-Programmes zur Berechnung großer elastisch-plastischer Verzerrungen – des Programmes SPC–PMHP. Mit diesem Programm können neben ebenen nun auch räumliche Probleme behandelt werden.

Eine allgemeine Theorie der Elasto–Plastizität bei Annahme großer Verzerrungen ist derzeit noch Gegenstand einer breiten, teilweise kontroversen Diskussion. Neben Modellen, die auf ausschließlich phänomenologischen Annahmen basieren[1], finden auch Formulierungen, die durch ein mikromechanisches Bild der Einkristallplastizität motiviert sind breite Anwendung. Essentiell für diesen Zugang ist die Berücksichtigung der Tatsache, daß ein plastischer Deformationsprozess auf submikroskopischem Niveau durch das Verhalten von Fremdatomen, Versetzungen und Disklinationen charakterisiert ist. Diesem Problem näherungsweise Rechnung tragend, wurde aufbauend auf einer geometrischen Interpretation von Elementarmechanismen der Plastizität ein Materialmodell der finiten Elasto–Plastizität entwickelt. Unter Voraussetzung der Anwendbarkeit der *rationalen Thermodynamik* ergibt sich daraus ein Satz von Evolutionsgleichungen, der bei Annahme kleiner Verzerrungen in die Gleichungen der klassischen Elasto–Plastizität übergeht.

Zur Vorbereitung der Erweiterung des Anwendungsspektrums der für SPC–PMEP entwickelten Algorithmen und deren Programmrealisierungen auf geometrisch nichtlineare Probleme konnte zunächst ein einfaches Modell zur Beschreibung großer elastisch–plastischer Verzerrungen entwickelt werden, das es erlaubt, bei den zur Identifikation von Materialparametern herangezogenen Stoffen auch den Einfluss geometrischer Nichtlinearitäten zu berücksichtigen. Dieses sich aus kontinuumsthermodynamischen Betrachtungen ergebende Modell wurde im Berichtszeitraum wesentlich erweitert und ist offen für zukünftige Modifikationen.

Bei Berücksichtigung geometrischer Nichtlinearitäten kommt es bekanntlich bei sehr großen Deformationen zur sogenannten „geometrischen Entfestigung“, d. h., das linearisierte Problem wird indefinit. Diese zusätzliche Schwierigkeit verschiebt sich bei der Behandlung von Problemen der duktilen Schädigungsmechanik hin zu

[1] Dieser Zugang findet in vielen kommerziell verfügbaren Finite Element Programmen ausschließlich Anwendung.

kleineren Deformationen, wobei man hier üblicherweise von „materieller Entfestigung“ spricht. Wenngleich es auch nicht Anliegen des vorliegenden Projektes war, indefinite Aufgabenstellungen zu behandeln, erschien es doch erforderlich, diesem Problem Rechnung zu tragen.

Von ihrer Struktur her sind die Evolutionsgleichungen der assoziierten Fließtheorie diffenzialalgebraische Gleichungen. In Abhängigkeit davon, ob als algebraischer Anteil die Fließbedingung oder die Kuhn–Tucker–Bedingung herangezogen wird, sind diese DAE's vom Typ Index 2 bzw. Index 1. Die Index–2–DAE's zur Beschreibung des elastisch–plastischen Materialverhaltens bei großen Deformationen sind von vergleichbarer Struktur wie die 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 Teilprojekt A3 implementiert. Die Linearisierungstechniken zur Behandlung der DAE's beruhen wie bei kleinen Verzerrungen auf der Verwendung einer verallgemeinerten Trapezregel. Zur Verbesserung des globalen und lokalen Konvergenzverhaltens erwies sich die Entwicklung und Implementierung geeigneter Dämpfungsalgorithmen für die Linearisierungsverfahren als sinnvoll. Adams–Moulton–Verfahren, zu denen auch die hier angesprochene verallgemeinerte Trapezregel gehört, sind bekanntlich für steife Systeme nicht stabil. Deshalb ist zusätzlich ein implizites Mehrschritt–Rückwärtsdifferenzenverfahren (BDF) für Index–1–DAE's realisiert worden. Dieses Verfahren ist auch für steife Systeme bis zur Schrittzahl 6 stabil. Allerdings ist der numerische Aufwand größer, da, um die quadratische Konvergenzordnung der Trapezregel erreichen zu können, hier ein 2–Schrittverfahren verwendet werden muss. Die Schnittstelle zu den das Materialverhalten charakterisierenden Routinen ist wie bei SPC–PMEP so allgemein und umfassend gestaltet, dass Neuentwicklungen im Bereich der Deformationsgesetze ohne massive Eingriffe in die Programmstruktur implementiert werden können. Dieser Umstand wurde bereits für die Einbeziehung von Materialmodellen der finiten Elasto-Plastizität unter Berücksichtigung einer Substruktur und alternativ der duktilen Schädigungsmechanik erfolgreich genutzt.

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 Deformationsgesetze. In der Praxis zeigt sich, dass gerade die Auswahl geeigneter Materialmodelle und die Identifikation darin enthaltener Parameter problematisch sind, und in ungünstigen Fällen zu erheblichen Fehlern im Simulationsergebnis führen können. Ein weiteres Ziel der Untersuchungen im Teilprojekt bestand deshalb darin, das parallelisierte FE-Programm SPC–PMHP für die jeweiligen Vorwärtsrechnungen zu nutzen und durch seine Einbettung in einen Optimierungsalgorithmus die Anpassung von Materialmodellen an gemessene inhomogene Verschiebungsfelder und somit eine verbesserte Materialparameteridentifikation zu erreichen.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

2.3.1 Teilaufgabe FEM–Entwicklung/Parameteridentifikation

Die Identifikation von Materialparametern ist ein inverses Problem, da die noch unbekannten Parameter auf der Ebene der Beschreibung des realen Materialverhaltens die *Ursache* für die konkrete Form von Spannungs- und Verzerrungsfeldern sind. Lediglich diese *Wirkungen* können (zudem in der Regel auch nur indirekt z. B. in Form von Verschiebungsfeldern) gemessen werden. In der Praxis wird die inverse Aufgabe durch ein Optimierungsproblem approximiert, das die bestmögliche Anpassung von gemessenen sowie berechneten lokalen und/oder globalen mechanischen Größen ermöglicht. Dabei zeigt sich, dass die Materialparameteridentifikation ein schlecht gestelltes Problem verkörpert. Deshalb sind zu seiner akzeptablen Lösung ein großes Informationsangebot und Sorgfalt bei der Auswahl geeigneter Experimente, Materialmodelle sowie Optimierungsverfahren erforderlich.

Die Materialmodelle sollten die jeweils relevanten Eigenschaften des Werkstoffverhaltens adäquat widerspiegeln. Das wachsende Verständnis physikalischer Zusammenhänge und deren mathematische Approximation führen zu immer komplexeren Modellen für die Beschreibung des thermomechanischen Verhaltens von Metallen. In diesem Prozess zeigt sich eine wachsende Diskrepanz zwischen den Möglichkeiten der physikalisch-mathematischen Modellbildung und den praktischen Erfordernissen der Identifikation aller notwendigen Modellparameter aus experimentellen Ergebnissen ([stec85, besd91, dahl93]).

Sehr häufig werden Materialparameter durch Auswertung homogener Spannungs- und Verzerrungszustände bestimmt ([dudd93, pei93a, pei93b]). Auch an der TU Chemnitz wurden entsprechende Verfahren lange Zeit zur Parameteridentifikation für elastisch-plastische Materialmodelle entwickelt und genutzt ([krei86, sall88, gerl89, berg92]). Die Analyse homogener Zustände hat den Vorteil, dass aus gemessenen globalen Größen wie z. B. Kraft, Moment, Verschiebung unmittelbar innere Beanspruchungen in Form von Spannungen und Verzerrungen berechnet werden können. Das führt dazu, dass das Deformationsgesetz mit einem Teil der Messwerte als Belastung integriert werden kann, während die restlichen Messwerte die experimentellen Vergleichsgrößen bilden. Allerdings hat diese Vorgehensweise auch entscheidende Nachteile. Insbesondere bei komplexen Deformationsgesetzen mit vielen Materialparametern ist eine anschließende Simulation von Spannungs- und Verzerrungszuständen, die von den zur Identifikation genutzten abweichen (insbesondere von inhomogenen Verteilungen), nicht immer gegeben. Zudem lassen sich homogene Zustände teilweise experimentell nur schwierig realisieren. So erfordert z. B. die Erfassung von Anisotropien im zweiachsigen Versuch an Kreuzproben umfangreiche Vorarbeiten und einen erheblichen experimentellen Aufwand [dem93].

Ein breiteres und realistischeres Informationsangebot zur Parameteroptimierung bietet die Auswertung inhomogener Spannungs- und Verzerrungszustände. Da sich diese nur in Ausnahmefällen unmittelbar messtechnisch erfassen lassen, werden die Messung und Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder angestrebt. Das Verfahren ist schematisch im Bild 1 dargestellt.

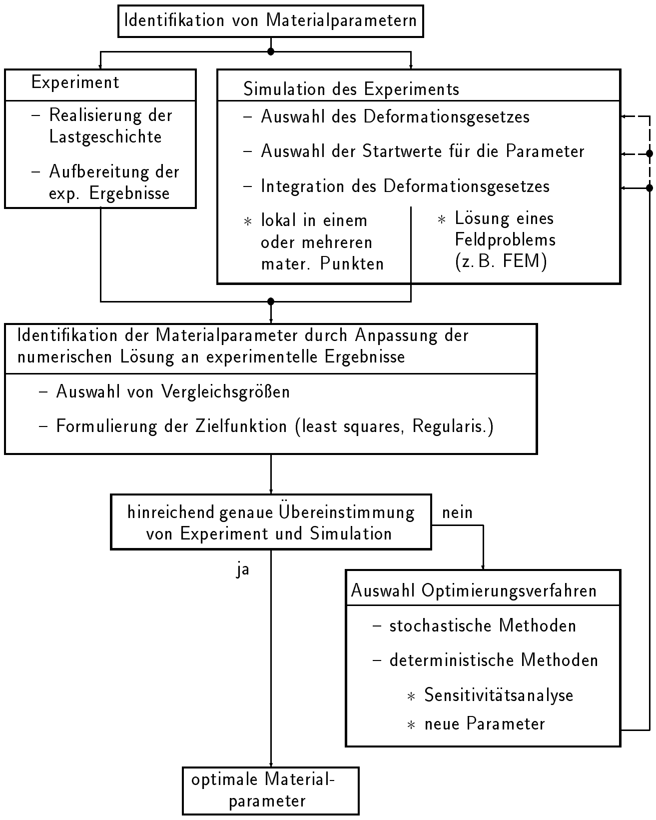


Bild 1: Schematische Darstellung des Prozesses der Materialparameteridentifikation durch Analyse inhomogener Spannungs- und Verzerrungszustände.

Ein zentraler Punkt dieser Methodik ist die Bereitstellung der numerischen Vergleichswerte in der Zielfunktion. Da diese und deren Gradienten (bei deterministischen Methoden) im Verlaufe des Optimierungsprozesses vielfach aufgebaut werden müssen, sind für die jeweilige Lösung des direkten Problems effektive Verfahren notwendig. Zunächst wurde dabei das Konzept der lokalen Integration des Deformationsgesetzes in mehreren ausgewählten materiellen Punkten mit einem Teil der Messwerte als Belastung verfolgt [kre93a, kre93b]. Durch die Erfassung inhomogener Verteilungen mechanischer Feldgrößen konnten bessere Identifikationsergebnisse bei geringen Optimierungszeiten erzielt werden [krei97]. Das Informationsangebot für den Identifikationsprozess ist jedoch durch die Beschränkung auf einige materielle Punkte weiterhin stark begrenzt.

Die verbesserten Möglichkeiten der Messung kompletter Verschiebungsfelder an Probekörpern und realen Bauteilen sowie die Leistungssteigerung auf dem Gebiet der Computerhardware erlaubten die Entwicklung und den Einsatz von Verfahren zur Materialparameteridentifikation, bei denen das direkte Problem nunmehr in jedem Optimierungsschritt mit Hilfe eines FEM-Programmes gelöst werden muss [bisc93, mahn93, stei94]. Damit kann ein Maximum an messbaren Informationen für die Konstruktion sinnvoller Zielfunktionen genutzt werden. Durch die Verfügbarkeit eines Parallelrechners und eines effektiven parallelisierten FEM-Programmes wurde es auch an der TU Chemnitz ermöglicht, diese modernen Verfahren zur Materialparameteridentifikation zu nutzen und eigene Entwicklungen auf diesem Gebiet zu betreiben. In Abgrenzung zu anderen Forschergruppen standen dabei von Beginn an Entwicklungsarbeiten zu verallgemeinerten Deformationsgesetzen für elastisch-plastisches Materialverhalten unter Berücksichtigung isotroper, kinematischer und formativer Verfestigung mit möglicher Anfangsanisotropie und zur effizienten Lösung des Optimierungsproblems im Mittelpunkt. Dabei wurde insbesondere die sehr effektive und genaue semianalytische Methode der Sensitivitätsanalyse weiterentwickelt und implementiert [bohn94].

Die Ergebnisse der Untersuchungen zur Identifikation von Materialparametern für elastisch-plastisches Materialverhalten bei kleinen Verzerrungen durch Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder, die im ersten Antragszeitraum erzielt wurden, sind im Arbeitsbericht für diese Periode ausführlich dargestellt ([kre98b]). An dieser Stelle sollen die wichtigsten Punkte noch einmal zusammengefasst werden.

- Für die Lösung des nach der Zeitdiskretisierung nichtlinearen FEM-Randwertproblems wurde ein Newton-Verfahren verwendet, in dessen Rahmen eine konsistente Linearisierung des Deformationsgesetzes für die Integrationsstützstellen erfolgte ([mich95], [mey97]). Zur Diskretisierung des Index–2–Algebro-Differenzialgleichungssystems für das Deformationsgesetz wurde eine verallgemeinerte Trapezregel als Einschritt-Differenzenschema implementiert.

- Im ersten Antragszeitraum wurden die Entwicklungsarbeiten zu verallgemeinerten Deformationsgesetzen für elastisch-plastisches Materialverhalten bei kleinen Verzerrungen unter Berücksichtigung isotroper, kinematischer und formativer Verfestigung mit möglicher Anfangsanisotropie abgeschlossen ([grew98, kret98]). Teilweise sind diese Modelle bereits unter Nutzung der standardisierten Materialschnittstelle in das FE-Programm PMEP implementiert worden.

- Die Identifikation von Verfestigungsparametern erfolgte durch Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder an gekerbten Vier-Punkt-Biege-Proben mit Hilfe des in-plane Moiré-Verfahrens. Für den Vergleich mit der FEM wurden die gemessenen Verschiebungsfelder in den notwendigen materiellen Punkten approximiert und auf den undeformierten Ausgangszustand transformiert ([boh97a, boh97b]).

- Eine effiziente Vorgehensweise im Rahmen der Materialparameteroptimierung kann wegen der mehrmaligen Lösung des direkten Feldproblems sinnvoll nur durch den Einsatz von Gradientenverfahren gewährleistet werden. Für die dabei notwendige Sensitivitätsanalyse wurde das effektive und genaue semianalytische Verfahren weiterentwickelt und implementiert ([boh97b]).

- Durch Approximation synthetischer Messwerte ließen sich zunächst die Effizienz und Genauigkeit der gewählten Optimierungsverfahren in Abhängigkeit verschiedener Einflussfaktoren untersuchen ([goe97a]).

- Das vorgestellte Verfahren zur Materialparameteridentifikation wurde erfolgreich zur Analyse realer Messwerte mit verschiedenen Verfestigungsansätzen angewandt ([kret98]).

Wie Effektivitätsuntersuchungen deutlich belegen, konnten diese Ergebnisse nur auf einem Parallelrechner mit akzeptablem Aufwand erzielt werden ([kret98], [kre98b]). Im Rahmen des Sonderforschungsbereiches war für D1 insbesondere die Zusammenarbeit mit den Teilprojekten A1, A3, A4, B1, B5 und D4 von großer Bedeutung.

Bei der Materialparameteridentifikation ist eine Zielfunktion, z. B. im Sinne einer ungewichteten Fehlerquadratsumme, so zu minimieren, dass numerisch ermittelte Verschiebungswerte $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{p})$ den Messwerten $\bar{\boldsymbol{U}}$ möglichst weit angenähert werden:

$$\Phi(\boldsymbol{p}) = \sum \left(\boldsymbol{U}(\boldsymbol{p}) - \bar{\boldsymbol{U}}\right)^2 \longrightarrow \min_{\boldsymbol{p}\in P}. \tag{3.1}$$

Die Optimierungsaufgabe (3.1) erweist sich nicht notwendig als gut gestelltes Problem. So ist die Zielfunktion nicht a priori konvex und deren Hesse-Matrix in einigen Fällen schlecht konditioniert. Beides erschwert eine eindeutige, stabile Lösung der Aufgabe. Die Ursache für die Schlechtgestelltheit ist in der ungenauen Beschreibung der physikalischen Grundlagen und einem Mangel an Informationen für die Problemlösung enthalten. Durch die konkrete Formulierung des Deformationsgesetzes und die begrenzte Anzahl von Messpunkten stellt die Zielfunktion ein deterministisches Modell dar, das die Realität in einem idealisierten Sinn anhand ausgewählter Informationen beschreibt. Das physikalisch-mathematische Materialmodell kann inakkurat sein (Vernachlässigung wichtiger Effekte, gegenseitige Abhängigkeiten der Materialparameter). Die Messdaten sind mit Fehlern (Rauschen, Streuen) behaftet und möglicherweise unvollständig (nicht alle Anwendungsbereiche des Materialmodells werden erfasst).

Durch Auswertung zusätzlicher experimenteller Informationen und die Kopplung verschiedener Identifikationsstrategien konnte die Zuverlässigkeit des Optimierungsergebnisses wesentlich verbessert werden. So wurde beispielsweise zur Bearbeitung des Problems der deutlichen Abhängigkeit der Optimierungslösung von den Startwerten der Materialparameter ein Verfahren erfolgreich untersucht, das eine Ermittlung dieser Anfangswerte mit dem oben erwähnten Algorithmus der lokalen Integration des Deformationsgesetzes in ausgewählten Materialpunkten mit einem Teil der Messwerte als Belastung beinhaltet. Mit dieser Startlösung wurde eine Konvergenzverbesserung für das zuverlässigere Verfahren der Parameteridentifikation aus der Lösung eines Feldproblems erreicht.

Die Berücksichtigung von geometrischen und physikalischen Nichtlinearitäten für elastisch-plastisches Materialverhalten ist von großer Praxisrelevanz (z. B. Umformtechnik) und bildet gleichzeitig die Grundlagen für eine methodische Übertragbarkeit auf andere Materialklassen (Kunststoffe, Gummi) und spezielle festigkeitsrelevante Phänomene (z. B. Schädigung). Hauptaufgabe für die Fortführung der Untersuchungen im aktuellen Berichtszeitraum war daher die Entwicklung und rechentechnische Realisierung analoger Verfahren zur numerischen Simulation elastisch-plastischen Materialverhaltens und der Parameteridentifikation bei Berücksichtigung großer Verzerrungen.

Dabei ergaben sich neue Anforderungen an die Methoden zur Materialparameteridentifikation (insbesondere im Zusammenhang mit der semianalytischen Sensitivitätsanalyse), deren Untersuchung auch international erst von wenigen Forschergruppen begonnen wurde (siehe z. B. ([mahn97],[mahn99],[mahn00]) und dort oftmals auf Spezialfälle beschränkt ist. Im Rahmen der Arbeiten am Teilprojekt wurde eine allgemeine Methodik für verschiedene Materialmodelle und unbeschränkt experimentell erfassbare Messdaten angestrebt.

Im Rahmen der Materialtheorie wurde eine Neubewertung der Materialmodelle und geeigneter Diskretisierungsverfahren im Zusammenhang mit der multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten vorgenommen und rechentechnisch realisiert. Die Lösung des nichtlinearen Randwertproblems erfolgt analog der Vorgehensweise bei kleinen Verzerrungen. Linearisierungstechniken für das lokale Anfangswertproblem konnten aus den bisherigen Integrationsstrategien für kleine Verzerrungen abgeleitet werden. In der Folge wurden phänomenologische Deformationsgesetze entwickelt und über eine universelle Materialschnittstelle in das Programmsystem implementiert. Schwerpunkte stellten dabei insbesondere die Ermittlung der konsistenten Materialtangente und der Beziehungen für die semianalytische Sensitivitätsanalyse bei Berücksichtigung geometrischer Nichtlinearitäten dar. Der universelle Materialteil gestattet die Implementierung verschiedener Zugänge zur Beschreibung spezieller Materialphänomene (z. B. additive Zerlegung des Lagrangeschen Verzerrungstensors, multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten und zusätzliche Substrukturtechnik zur Erfassung plastischer Anisotropien).

2.3.2 Teilaufgabe Schädigungsmechanik

Der erfolgreiche Einsatz der Schädigungsmechanik erfordert die Beherrschung der folgenden Problemkreise:

- die zahlreichen Parameter des Schädigungsmodells müssen aus Verformungs- und Bruchexperimenten ermittelt werden,
- für das extrem nichtlineare und lokal instabile Verhalten müssen geeignete und zuverlässige Algorithmen entwickelt werden.

Systematische Untersuchungen zu numerischen Lösungsalgorithmen in der Schädigungsmechanik wurden bisher kaum durchgeführt. Ein Vergleich von Ergebnissen zur Beschreibung duktiler Schädigungsprozesse unter Nutzung der vorgestellten Modelle ist bisher aus der Literatur nicht bekannt. Lediglich im Rahmen der European Structural Integrity Society wurden numerische Vergleichsberechnungen (sog. *Round Robins*) durchgeführt, die hauptsächlich die Verifikation von verschiedenen FE-Codes an einfachen Zugproben bei gegebenen Modellparametern zum Ziel hatten (RT in [mudr93], GTN in [bro95a]). Insbesondere fehlen weiterführende Analysen zur Simulation des duktilen Risswachstums.

Mit der Erweiterung des Programmsystems SPC-PMEP auf dreidimensionale Aufgaben mit endlichen elastisch-plastischen Verzerrungen war es sinnvoll, auch die unterschiedlichen Versagensmechanismen in die konstitutiven Beziehungen einzuschließen. Im Berichtszeitraum wurden zunächst Schädigungsmodelle für duktile Werkstoffe programmtechnisch realisiert. Daraus ergaben sich Fragen nach konstitutiven Beziehungen, die in der Lage sind, die makroskopische Entfestigung infolge mikrostruktureller Schädigungsprozesse wiederzugeben, sowie nach dem zu verwendenden Versagenskriterium. Die Weiterentwicklungen des mikromechanischen Modells von Gurson haben sich in der Literatur als die Ansätze mit der höchsten praktischen Relevanz durchgesetzt, so dass sich die Autoren zunächst für die Implementierung des **G**urson-**T**vergaard-**N**eedleman-Modells entschieden haben.
Die numerische Integration des Materialmodells ist außerordentlich schwierig und weiterhin Gegenstand wissenschaftlicher Arbeiten, da infolge überkritisch geschädigter und somit eliminierter Elemente die Effizienz, Genauigkeit und insbesondere die Stabilität des Lösungsverfahrens gefährdet sind. Relativ häufig werden explizite Algorithmen (z.B. Euler-Vorwärts-Algorithmus) angewendet, deren Genauigkeit und Stabilität allerdings nur bei extrem kleinen Inkrementen gewährleistet sind. Im Programmsystem SPC-PMHP werden die Materialgleichungen effektiv mit impliziten Verfahren integriert, so dass dieses Verfahren auch für die Integration der schädigungsmechanischen Beziehungen angewandt wird.
Da sich das Materialmodell zur Beschreibung des Einflusses von Schädigungsprozessen auf den elastisch–plastischen Deformationsvorgang im Rahmen einer assoziierten Fliesstheorie behandeln lässt, besitzt es konsequenterweise auch die gleiche Struktur, wie sie bisher zur Definition der Materialschnittstelle vorausgesetzt wurde. So ist gewährleistet, dass sich die an dieser Stelle erforderlichen algorithmischen Entwicklungen und deren programmtechnische Realisierung auch in den Untersuchungen zur Parameteridentifikation niederschlagen.

2.3.3 Teilaufgabe Netzadaption

Bei Anwendung adaptiver Algorithmen wird mit Hilfe von Informationen, die aus einer vorhergehenden Näherungslösung abgeleitet werden, ein neues Finite–Element–Netz konstruiert. Aus der Literatur sind dazu im wesentlichen drei Strategien bekannt: Neuvernetzung unter Ausnutzung der gewonnenen lokalen Informationen ([simp94]), Teilung der Elemente des vorhandenen Netzes ([korn90]) und Knotenverschiebung (r–Version der FEM).

Die Verfahren zur Bestimmung des Fehlers lassen sich grundsätzlich unterteilen in

1. residuale Verfahren

   Residuale Fehlerschätzer sind inzwischen für kleine elastoplastische Verzerrungen unter Voraussetzung der Gültigkeit der Deformationstheorie ([john92]) bzw. der Fließtheorie ([rann97, rann98, stei97]) unter Beschränkung auf einfache Materialmodelle und für große elastische Verzerrungen [brin98] bekannt.

2. heuristische Verfahren

   Unter den heuristischen Methoden findet die „Superconvergent Patch Recovery Method“ ([zien87, zien92]) besondere Beachtung. Wenngleich es sich hier auch nicht um einen wirklichen Fehlerschätzer handelt, besticht diese Methode durch ihre relativ einfache Implementierbarkeit.

Im Rahmen der Teilprojekte A1/A3 wurden in den vergangenen Berichtszeiträumen programmtechnische Realisierungen für H^1 Residuenschätzer und L_2 Residuenfehlerschätzer für die 3D–Poisson–Gleichung implementiert. Innerhalb des gegenwärtigen Berichtszeitraumes konnten diese Techniken durch das Teilprojekt A3 in ihrer Anwendung auf Probleme der ebenen linearen Elastizität erweitert werden. Da im Teilprojekt D1 keine eigenständigen Entwicklungen zur Fehlerschätzung vorgesehen waren, stand in erster Linie die Frage, ob die Komplexität der Spannungs–Verzerrungs–Beziehungen einer assoziierten Fliesstheorie, wie sie in SPC–PMHP behandelt wird, eine Fehlerschätzung erlaubt, oder ob nicht letztlich doch nur heuristische Netzverfeinerungskriterien realisierbar sind. Interessanterweise hat eine genauere Analyse gezeigt, dass der in A3 verwirklichte residuale Schätzer universell für alle statischen Probleme der Festkörpermechanik ist.

Der Vorteil der mikromechanischen Modelle besteht darin, dass sich das lokale Werkstoffversagen infolge der Deformationsgeschichte als Lösung einstellt. Das erfordert bei der FE-Behandlung eine adäquate, von der Schädigungsentwicklung abhängige, sich ändernde Vernetzung. Zur Beschreibung der Schädigungsentwicklung dient das **GTN**-Modell. Es ist eine geeignete adaptive Vernetzungsstrategie notwendig, die ein hinreichend feines Netz erzeugt, das sich in Abhängigkeit vom Lösungsverhalten mit der Schädigungszone (Rissspitze) bewegt. Da Hohlraumentstehung und -wachstum die eigentlichen Ursachen der Schädigung darstellen, ist es sinnvoll, schädigungsmechanische Feldgrößen, z.B. den Hohlraumvolumenanteil, als zusätzlichen Steuerparameter für die Netzverfeinerung anzuwenden.

Literaturverzeichnis

[berg92] Bergander, H., Kreißig, R., Gerlach, J., Knauer, U., Standard formulation of elasto-plastic deformation laws, *Acta Mechanica*, **91**, 157-178 (1992)

[besd91] Besdo, D., Müller, M., The influence of texture development on the plastic behaviour of polycristals, in: *Finite Inelastic Deformations – Theory and Applications*, D. Besdo, E. Stein (Eds.), IUTAM-Symp. Hannover 1991, Springer, Berlin, 135-144 (1991)

[bisc93] Bischoff, D., Mahnken, R., Stein, E., *Identifikation von Materialparametern mit Finite-Element Methoden*, Arbeitsbericht SFB 319 für 1991-93, TU Braunschweig (1993)

[bohn94] Bohnsack, E., *Semesterbericht Graduiertenkolleg "Kontinuumsmechanik inelastischer Festkörper"*, TU Dresden und TU Chemnitz-Zwickau (1994)

[boh97a] Bohnsack, E., Continuous Field Approximation of Experimentally Given Data by Finite Elements, *Comp. & Struct.*, **63**, 1195-1204 (1997)

[boh97b] Bohnsack, E., *Zur Identifikation von Verfestigungsparametern elastisch-plastischer Stoffgesetze an inhomogen verformten Proben*, Diss., TU Chemnitz-Zwickau, Institut für Mechanik, Bericht 1/97 (1997)

[brin98] Brink, U., Stein, E., A–posteriory error estimation in large–strain elasticity using equilibrated local Neumann problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* (1998), to appear

[bro95a] Brocks, W., *Numerical round robin on micromechanical models*, European Structural Integrity Society ESIS, Task Group 8, IWM-Bericht T8 (1995)

[dahl93] Dahl, W., Kopp, R., Pawelski, O., Pankert, R., *Umformtechnik: Plastomechanik und Werkstoffkunde*, Stahleisen, Düsseldorf und Springer, Berlin (1993)

[dem93] Demmerle, S., Boehler, J.P., Optimal design of biaxial tensile cruciform specimens, *J. Mech. Phys. Solids*, **41**, No. 1, 143-181 (1993)

[dudd93] Duddeck, H., Ahrens, H. et al., *Berechnung metallischer Strukturen mit zeitabhängigen Stoffgesetzen*, Arbeitsbericht SFB 319 für 1991-93, TU Braunschweig (1993)

[gerl89] Gerlach, J., *Eignung verschiedener Verfestigungsansätze zur numerischen Simulation des plastischen Verhaltens von Blechen*, Diss., TU Karl-Marx-Stadt (1989)

[goe97a] Görke, U.-J., Kretzschmar, S., Kreißig, R., Analysis of inhomogeneous displacement fields for the identification of parameters for elasto-plastic deformation laws, in: *Material Identification Using Mixed Numerical Experimental Methods*, Proceedings of the EUROMECH 357 Colloquium, H. Sol, C.W.J. Oomens (Eds.), Kluwer Academic Publishers, 61-70 (1997)

[grew98] Grewolls, G., *Numerische Untersuchungen zur anisotropen plastischen Verfestigung unter besonderer Berücksichtigung der Verhältnisse in gewalzten Blechen*, Diss., TU Chemnitz, Institut für Mechanik, Bericht 1/98 (1998)

[john92] Johnson, C., Hansbo, P., Adaptive finite element methods in computational mechanics, *Comput. Methods Appl. Mech. and Engrg*, **101**, 143–181 (1992)

[korn90] Kornhuber,R., Roitzsch, R., On adaptive grid refinement in the presence of internal and boundary layers, *IMPACT of Computing in Science and Engineering*, **2**, 40–72 (1990)

[krei86] Kreißig, R., Schindler, J., Some experimental results on yield condition in plane stress state, *Acta Mechanica*, **65**, 169-179 (1986)

[kre93a] Kreißig, R., Naumann, J., *Identifikation elastisch-plastischer Deformationsgesetze mit Hilfe des Moiré-Verfahrens*, Arbeitsbericht SFB 319 für 1992-93, TU Braunschweig (1993)

[kre93b] Kreißig, R., Naumann, J., *Identifikation elastisch-plastischer Deformationsgesetze durch Auswertung inhomogener Spannungs- und Deformationszustände*, Förderungsanträge SFB 319 für 1994-96, TU Braunschweig (1993)

[krei97] Kreißig, R., Naumann, J., Benedix, U., Bormann, P., Grewolls, G., Kretzschmar, S., *Parameter Identification of Inelastic Deformation Laws Analyzing Inhomogeneous Stress-Strain States*, Abschlußbericht SFB 319 für 1994-96, TU Braunschweig (1997)

[kre98b] Kreißig, R., Meyer, A., Michael, D., Görke, U.-J., *Effiziente parallele Algorithmen zur Simulation des Deformationsverhaltens von Bauteilen aus elastisch-plastischen Materialien*, Arbeitsbericht SFB 393 für 1996-98, TU Chemnitz (1998)

[kret98] Kretzschmar, S., *Parameteridentifikation elastisch-plastischer Deformationsgesetze durch Anpassung numerischer an experimentell ermittelte Verschiebungsfelder*, Diss., TU Chemnitz, Institut für Mechanik, Bericht 3/98 (1998)

[mahn93] Mahnken, R., Stein, E., *Identification of parameters for visco-plastic models via finite-element methods and gradient methods*, IBNM Bericht 93/5, Universität Hannover (1993)

[mahn97] Mahnken, R., Stein, E., Parameter identification for finite deformation elastoplasticity in principal directions, *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.* bf 147, 17-39 (1997)

[mahn99] Mahnken, R., Kuhl, E., Parameter identification of gradient enhanced damage models with the finite element method, *Eur. J. Mech. A/Solids* bf 18, 819-835 (1999)

[mahn00] Mahnken, R., Aspects on the Finite-Element Implementation of the Gurson Model including Parameter Identification, *Int. J. Plast.* **15(11)**, 1111-1137 (1999)

[mey97] Meyer, A., Michael, D., A Modern Approach to the Solution of Problems of Classic Elastoplasticity on Parallel Computers, *Numerical Linear Algebra with Applications*, **4**, No. 3, 205-221 (1997)

[mich95] Michael, D., Meyer, A., *Some remarks on the simulation of elasto-plastic problems on parallel computers*, Preprint-Reihe der Chemnitzer DFG-Forschergruppe "Scientific Parallel Computing", SPC 95-13, Fakultät für Mathematik der TU Chemnitz-Zwickau (1995)

[mich97] Michael, D., *Einige Bemerkungen zum Einsatz paralleler Auflösungsstrategien für FE–Gleichungssysteme bei der numerischen Simulation geometrisch und physikalisch nichtlinearer Probleme in der Festkörpermechanik*, Chemnitzer FEM–Symposium, 1.–3. September 1997, Chemnitz (1997)

[mudr93] Mudry, F., *Round Robin on local criteria*, ESIS Task Group Elastic-Plastic Fracture, Brussels (1993)

[pei93a] Peil, U., Kuck, D., *Stahlkonstruktionen unter zyklischer Belastung*, Arbeitsbericht SFB 319 für 1991-93, TU Braunschweig (1993)

[pei93b] Peil, U., Reinighaus, M., *Baustahl unter mehrachsiger zyklischer Belastung*, Arbeitsbericht SFB 319 für 1991-93, TU Braunschweig (1993)

[rann97] Rannacher, R., Suttmeier, F.-T., *A posteriori error control in finite element methods via duality techniques: Application to perfect plasticity*, Technical report, Preprints of SFB359, Universität Heidelberg (1997)

[rann98] Rannacher, R., Suttmeier, F.-T., *A Posteriory Error Control and Mesh Adaption for FE models in Elasticity and Elasto–Plasticity*, Preprint, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Heidelberg (1998)

[sall88] Sallat, G., *Theoretische und experimentelle Untersuchungen zum Fließverhalten von Blechen im zweiachsigen Hauptspannungszustand*, Diss., TH Karl-Marx-Stadt (1988)

[simp94] Simpson, R.B., Anisotropic mesh transformation and optimal error control, *Applied Numerical Mathematics*, **14**, 183–198 (1994)

[stec85] Steck, E., A stochastic model for the high-temperature plasticity of metals, *Int. J. of Plasticity*, **1**, 243-258 (1985)

[stei94] Stein, E., *Parameteridentifikation mit Finite–Element Methoden*, Förderungsanträge SFB 319 für 1994-96, TU Braunschweig (1993)

[stei97] Stein, E., Barthold, F.–J., Ohnimus, S., Schmidt, M., Adaptive finite elements in elastoplasticity with mechanical error indicators and neumann–type estimators, In *New Advances in Adaptive FEM* (1997)

[zien87] Zienkiewicz, O.C., Zhu, J.Z., A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **24**, 337–357 (1987)

[zien92] Zienkiewicz, O.C., Zhu, J.Z., The Superconvergent Patch Recovery and Adaptive Finite Element Refinement, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, **101**, 207–224 (1992)

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe FEM–Entwicklung/Parameteridentifikation

Da Materialparameter in der Regel nicht direkt messbar sind, ist zu ihrer Identifikation die Lösung eines inversen Problems notwendig, das zweckmäßig durch eine Optimierungsaufgabe approximiert werden kann. Eine ausführliche Darstellung der Methodik und der Algorithmen zur Materialparameteridentifikation durch Analyse inhomogener Verschiebungsfelder auf der Basis nichtlinearer Optmierungsverfahren für kleine elastisch-plastische Verzerrungen, die an der TU Chemnitz entwickelt und numerisch realisiert wurden, erfolgte im letzten Arbeitsbericht für das Teilprojekt D1 und der dort angegebenen Literatur.

Wegen der physikalisch und mathematisch idealisierten Natur der Materialmodelle und der Unvollständigkeit realer Messwerte, die zudem noch fehlerbehaftet sind, ist das Identifikationsproblem für die Materialparameter schlecht gestellt. Das findet seinen Ausdruck in der Mehrdeutigkeit der Lösung, die u. a. in starkem Maße von der Auswahl der Startwerte abhängt. Auf weitere Einflussfaktoren wurde bereits in [goe97] detailliert eingegangen. An dieser Stelle sollen lediglich die Ergebnisse einiger Untersuchungen zur Effizienzsteigerung der Materialparameteridentifikation durch Kopplung der oben erwähnten Methode der lokalen Integration des Deformationsgesetzes in ausgewählten materiellen Punkten mit der Lösung des Feldproblems unter Nutzung der FEM im Falle kleiner elastisch-plastischer Verzerrungen ergänzt werden.

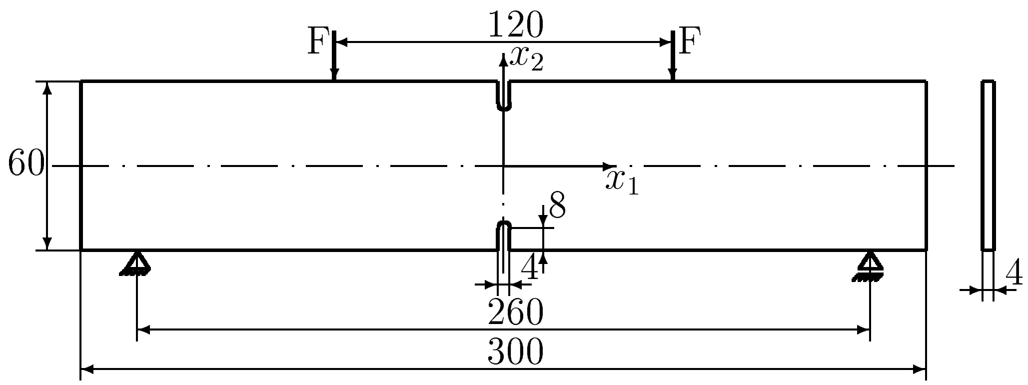


Bild 2: Vier-Punkt-Biegung. Geometrie der gekerbten Probe und Randbedingungen.

Reale Messwerte wurden am Lehrstuhl für Experimentelle Mechanik der TU Chemnitz an gekerbten Vier-Punkt-Biegeproben aus dem austenitischen Stahl X 6 Cr Ni Ti 18-10 gewonnen. Die Geometrie einer Probe ist in Bild 2 dargestellt.

Das mechanische Verhalten von Bauteilen und Konstruktionen aus elastisch-plastischem Material mit isotroper und kinematischer Verfestigung soll bei kleinen Verzerrungen durch folgendes Materialmodell charakterisiert werden:

- Beziehung zwischen den Tensoren der Spannungsgeschwindigkeit $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$ und der Verzerrungsgeschwindigkeit $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ mit der Elastizitätsmatrix $\boldsymbol{C}^{el}$, dem plastischen Multiplikator λ und der Fließbedingung F

$$\left(\boldsymbol{C}^{el}\right)^{-1} \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \lambda \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}} - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{0}\,. \tag{4.1}$$

- Evolutionsgleichungen für die inneren Variablen $\boldsymbol{\kappa}$ (Tensorgrößen zur Beschreibung des Verfestigungsverhaltens)

$$\dot{\boldsymbol{\kappa}} - \lambda\, \boldsymbol{q}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{p}) = \mathbf{0}\,. \tag{4.2}$$

- Fließbedingung

$$F(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{p}) = 0\,. \tag{4.3}$$

Im Fall großer Deformationen bedürfen die obigen Materialgleichungen jedoch einer Verallgemeinerung. Basierend auf einer geometrischen Beschreibung der Elementarmechanismen der plastischen Deformation und unter zusätzlicher Voraussetzung der Gültigkeit der rationalen Thermodynamik und des Prinzips der maximalen Dissipation konnte in [mich01] eine assoziierte Fliesstheorie defektbehafteter Kontinua entwickelt werden. Im Rahmen des gewählten Zuganges ist es so möglich, Anhaltspunkte für die Struktur der spezifischen freien Energie ψ aus der geometrischen Beschreibung der Elementarmechanismen der plastischen Deformation zu erhalten und letztlich zu zeigen, dass, formuliert in der Momentankonfiguration, die Gleichungen

$$\begin{aligned}
&\mathcal{L}_v \bar{\boldsymbol{b}}^e = 2\lambda \frac{\partial F}{\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}}; \\
&\mathcal{L}_v \boldsymbol{\kappa} = -\lambda \boldsymbol{q}, \;\; \boldsymbol{q} := \frac{\partial \boldsymbol{\kappa}}{\partial \boldsymbol{\alpha}} : \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\kappa}}; \\
&\lambda \geq 0, \quad \lambda F(\overset{*}{\boldsymbol{\tau}}, \boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{p}) = 0, \quad F(\overset{*}{\boldsymbol{\tau}}, \boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{p}) \;\; \textit{konvex}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\tau} &:= 2\rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{g}} \\
\overset{*}{\boldsymbol{\tau}} &:= -2\rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial \bar{\boldsymbol{b}}^e} \\
\boldsymbol{\kappa} &:= \rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\alpha}}
\end{aligned} \tag{4.4}$$

$$\psi := \psi_e(\boldsymbol{g}, \bar{\boldsymbol{b}}^e, \boldsymbol{p}) + \psi_h(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{p})$$

das Materialverhalten bei finiten elastisch–plastischen Deformationen beschreiben (mit dem inversen linken elastischen Cauchy–Green Tensor $\bar{\boldsymbol{b}}^{e}$, einem zu $\bar{\boldsymbol{b}}^{e}$ arbeitskonjugierten Spannungstensor $\overset{*}{\boldsymbol{\tau}}$, dem Kirchhoffschen Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}$, der Dichte des undeformierten Körpers ρ_0, der Raummetrik $\mathbf{g}$ und einer zu $\boldsymbol{\kappa}$ arbeitskonjugierten internen Variablen $\boldsymbol{\alpha}$). Bezüglich detaillierterer Informationen sei auf [mich01] verwiesen. Im Programm SPC-PMHP sind ausschließlich Materialien behandelbar, deren Verhalten sich durch obigen Satz von Differenzial–Algebraischen Gleichungen beschreiben lässt.

Entsprechend den Annahmen der Theorie des skleronomen plastischen Fließens bei [krei92] wird eine quadratische Fließfunktion vom *von Mises*-Typ in den Koordinaten der Deviatorspannung $\overset{D}{\sigma}_{ij}$ und den deviatorischen Rückspannungskoordinaten α_{ij} angenommen:

$$F = \frac{3}{2}\left(\overset{D}{\sigma}_{ij} - \alpha_{ij}\right)\left(\overset{D}{\sigma}_{ij} - \alpha_{ij}\right) - \sigma_F^2 = 0\,. \tag{4.5}$$

Für die Darstellung der Fließkurve als eine Funktion der plastischen Vergleichsdehnung ε_v^{pl} fand das modifizierte Potenzgesetz

$$\sigma_F = \sigma_{Fo} + a_1\left[\left(\varepsilon_v^{pl} + a_2\right)^{a_3} - a_2^{a_3}\right] \tag{4.6}$$

mit der Fließspannung σ_F Verwendung. Die Entwicklung der Rückspannungen wurde nach dem kinematischen Verfestigungsansatz von *Prager* modelliert:

$$\dot{\alpha}_{ij} = b\,\dot{\varepsilon}_{ij}^{pl}\,. \tag{4.7}$$

Wegen der speziellen Probengestaltung und der applizierten Randbedingungen kann auf der Verbindungslinie zwischen den Kerbgründen (dem *Ligament*) der Biegeprobe nach Bild 2 ein Hauptachsenzustand ermittelt werden. Unmittelbar in den Kerbgründen wird ein einachsiger Spannungszustand angenommen. Werden die gemessenen Verzerrungen als Belastung verwendet, können die Spannungen und internen Variablen mit Hilfe der lokalen Integration des Deformationsgesetzes in den materiellen Punkten des Ligaments ohne Nutzung einer globalen Ortsdiskretisierung berechnet werden. In diesem Fall werden die Spannungen in den Kerbgründen und globale Parameter wie das Biegemoment M und die Normalkraft N als Vergleichsgrößen angenommen. Die entsprechende Zielfunktion kann wie folgt formuliert werden:

$$\Phi(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{2}\left[\gamma_1\sum_{i=1}^{n_L}(\hat{\sigma}_M(\boldsymbol{p}) - \tilde{\sigma}_M)^2 + \gamma_2\sum_{i=1}^{n_L}(\hat{\sigma}_N(\boldsymbol{p}) - \tilde{\sigma}_N)^2\right. \tag{4.8}$$

$$\left. + \gamma_3\sum_{i=1}^{n_L}(\hat{\sigma}_{11}^{ln}(\boldsymbol{p}) - \tilde{\sigma}_{11}^{ln})^2 + \gamma_4\sum_{i=1}^{n_L}(\hat{\sigma}_{11}^{un}(\boldsymbol{p}) - \tilde{\sigma}_{11}^{un})^2\right]\,. \tag{4.9}$$

Dabei stellen n_L die Anzahl der Lastschritte, $\gamma_1 \ldots \gamma_4$ Wichtungsfaktoren und σ_{11}^{un} bzw. σ_{11}^{ln} die Spannungen im oberen und unteren Kerbgrund dar. Zur Behandlung von Größen mit analoger physikalischer Bedeutung wurden das Biegemoment und die Normalkraft durch die normierten (bezogenen) Spannungsvariablen

$\sigma_M = 4M/bh^2$ und $\sigma_N = N/bh$ ausgedrückt. Das Biegemoment und die Normalkraft wurden durch numerische Integration der Spannungen über das Ligament berechnet. Die mit einem Dach gekennzeichneten Größen stellen die berechneten Werte dar, die mit einer Tilde versehenen zugehörige Messwerte.

Da für beliebige Materialien und beliebige Lastgeschichten lediglich Verschiebungsfelder messtechnisch erfasst werden können, werden die Verschiebungskoordianten in $x-$ und $y-$Richtung als Vergleichsgrößen bei der Nutzung der FEM als Verfahren zur Lösung des gesamten Feldproblems angenommen. Die zugehörige Zielfunktion ergibt sich im Sinne einer Quadratmittelapproximation in folgender Form:

$$\begin{aligned}\Phi(\boldsymbol{p}) \;&=\; \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n_L}\sum_{j=1}^{n_T}\Bigg[\Big(\{\hat{u}_x(\boldsymbol{p})\}_{ij} - \{\tilde{u}_x\}_{ij}\Big)^2 \\ &\qquad + \Big(\{\hat{u}_y(\boldsymbol{p})\}_{ij} - \{\tilde{u}_y\}_{ij}\Big)^2\Bigg]\,, \qquad (4.10)\end{aligned}$$

mit der Anzahl der Lastschritte n_L und der Anzahl der materiellen Punkte n_T, in denen die gemessenen und berechneten Verschiebungskoordinaten verglichen werden.

Die Kombination beider auf der Analyse inhomogener Verschiebungsfelder beruhender Methoden zur Materialparameteridentifikation wurde zunächst an synthetischen Messwerten erprobt. Diese Messwerte waren das Ergebnis einer FEM-Berechnung mit einer vorgegebenen Belastungsgeschichte, bestehend aus Belastungs-, Entlastungs- und Wiederbelastungsschritten sowie den vorgegebenen Materialparametern $\sigma_{Fo} = 220\,\mathrm{MPa}$, $\mathrm{a}_1 = 600\,\mathrm{MPa}$, $\mathrm{a}_3 = 0.25$ and $\mathrm{b} = 750\,\mathrm{MPa}$. Wie bereits erwähnt, hängen Materialparameter, die mit Hilfe von Gradientenverfahren identifiziert werden, in starkem Maße von ihren Startwerten ab, was zur Ermittlung unterschiedlicher lokaler Minima führen kann. Da es in der Praxis bei der Untersuchung neuer Materialien schwierig ist, geeignete Startwerte für die Materialparameter zu definieren, wurde diese Situation im Fall der synthetischen Messwerte simuliert. Dabei zeigte es sich, dass beim Start mit einem beliebigen Parametersatz, weit entfernt von der optimalen Lösung, beide Identifikationsverfahren lediglich lokale Minima ergaben, die wegen der unterschiedlichen Topologie der Zielfunktionen ungleich waren. Die Ergebnisse sind in Tabelle 1 zusammengefasst.

Wegen der einfacheren Topologie der Zielfunktion, die weniger lokale Minima erwarten lässt, ist die Lösung aus der lokalen Integration des Deformationsgesetzes näher an der zu erwartenden optimalen mit einer kleineren mittleren Abweichung der Verschiebungen. Es zeigte sich jedoch, dass sie wegen des geringen Informationsangebotes auch von anderen Startwerten aus kaum verbessert werden kann. Werden hingegen die optimierten Werte der lokalen Integration des Deformationsgesetzes als Startwerte für die Lösung des gesamten Feldproblems genutzt, konnten die optimalen Parameter, somit das globale Minimum, ermittelt werden (siehe Tabelle 1). Die Kombination beider Identifikationsstrategien verbessert das Ergebnis des Optimierungsprozesses und ist effektiver (insgesamt geringere Rechenzeit) als die alleinige Nutzung des Feldverfahrens mit Hilfe der FEM.

Tabelle 1: Ergebnisse der Materialparameteridentifikation nach Analyse synthetischer Messwerte mit $a_2 = 10^{-6}$ und einer Anfangsorthotropie von α^o_{11} =-16 MPa, α^o_{22} =-6 MPa.

Parameter	Start-werte	Optimierte Werte Lokale Integr.	Feldproblem
σ_{Fo} in MPa	300,0	241,00	295,58
b in MPa	200,0	504,00	412,89
a_1 in MPa	2000,0	714,00	1841,08
a_3	0,8	0,34	0,66
Rechenzeit	–	15 min	300 min
Mittlere Abweich. der Versch. in mm	0,0215	0,0009	0,00119
σ_{Fo} in MPa	241,00	–	219,92
b in MPa	504,00	–	750,21
a_1 in MPa	714,00	–	599,88
a_3	0,34	–	0,25
Rechenzeit	–	–	120 min
Mittlere Abweich. der Versch. in mm	0,0009	–	$8{,}74 \cdot 10^{-7}$

Wie aus Tabelle 2 ersichtlich wird, konnten die Erfahrungen der Untersuchung synthetischer Messwerte bei der Analyse realer Biegeexperimente mit Proben aus der X 6 Cr Ni Ti 18-10 Stahllegierung bestätigt werden.

Tabelle 2: Ergebnisse der Materialparameteridentifikation nach Analyse realer Messwerte für die X 6 Cr Ni Ti 18-10 Stahllegierung mit $a_2 = 10^{-6}$, σ_{Fo} =220 Mpa und einer Anfangsorthotropie von α^o_{11} =-8.3 MPa, α^o_{22} =-3.2 MPa.

Parameter	Start-werte	Optimierte Werte Lokale Integr.	Feldproblem
b in MPa	550,0	1956,00	588,64
a_1 in MPa	440,0	372,00	429,30
a_3	0,1	0,23	0,23
Rechenzeit	–	5 min	135 min
Mittlere Abweich. der Versch. in mm	0,0447	0,0185	0,0258
b in MPa	1956,00	–	2793,31
a_1 in MPa	372,00	–	640,53
a_3	0,23	–	0,43
Rechenzeit	–	–	105 min
Mittlere Abweich. der Versch. in mm	0,0185	–	0,0139

Die Entwicklung eines allgemeinen, thermodynamisch konsistenten Deformationsgesetzes für große elastisch-plastische Verzerrungen im Rahmen der Untersuchungen zum Teilprojekt D1 ist detailliert in den Arbeiten [buch98, bu01a, go00a, go00b, goe01, mich98] dargestellt. Im Folgenden wird seine numerische Aufbereitung zur Lösung des lokalen Anfangswertproblems kurz am Beispiel des klassischen Falls ohne Berücksichtigung einer Substruktur skizziert (gegenwärtig ist die Materialparameteridentifikation bei großen Verzerrungen zunächst mit diesem Modell realisiert). Entsprechende Beziehungen mit Berücksichtigung einer Substruktur werden in [bu01b] ausführlich abgeleitet.

Als Fließbedingung wird ein für große Deformationen modifizierter Ansatz nach Baltov-Sawczuk [bal65] verwendet, mit dem es möglich ist, sowohl isotrope und kinematische als auch Distorsionsverfestigung zu berücksichtigen.

$$F = \left(\grave{\boldsymbol{T}} - \grave{\boldsymbol{\alpha}}\right) \cdot\cdot \underset{\mathbf{4}}{\boldsymbol{K}} \cdot\cdot \left(\grave{\boldsymbol{T}} - \grave{\boldsymbol{\alpha}}\right) - \frac{2}{3} T_F^2 = 0 \tag{4.11}$$

$$\text{mit} \quad \grave{\boldsymbol{T}} = \boldsymbol{T} - \frac{1}{3} (\boldsymbol{T} \cdot\cdot \boldsymbol{C}) \boldsymbol{B} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{B} = (\boldsymbol{C})^{-1} . \tag{4.12}$$

Dabei stellen $\boldsymbol{T}$ den kontravarianten, zweistufigen Tensor der 2. Piola-Kirchhoff-Spannungen, $\boldsymbol{\alpha}$ den Tensor der Rückspannungen und $\boldsymbol{C}$ den kovarianten, zweistufigen Rechts-Cauchy-Green Tensor dar. Auf eine spezielle Kennzeichnung ko- und kontravarianter Größen wird hier verzichtet, da eine Verwechslung nicht möglich ist. Für die Materialparameteridentifikation bei großen Verzerrungen wurde eine Total-Lagrangesche Vorgehensweise bevorzugt. Aus diesem Grunde erfolgt eine materielle (Lagrangesche) Darstellung des Deformationsgesetzes und seiner Zeitintegration. Die Fließbedingung wird in der Momentankonfiguration formuliert und anschließend in die Ausgangskonfiguration zurückgezogen. Der vierstufige Tensor $\underset{\mathbf{4}}{\boldsymbol{K}}$ dient der Beschreibung von Anfangsanisotropien bzw. einer Distorsionsverfestigung.

Die Auswertung der Kuhn-Tucker-Bedingungen für das Extremwertproblem des Prinzips vom Maximum der plastischen Dissipation liefert das elastisch-plastische Deformationsgesetz in Form eines nichtlinearen Algebro-Differenzialgleichungssystems. Es enthält die folgenden Evolutionsgleichungen für die inneren Variablen (hier die Rückspannungen $\boldsymbol{\alpha}$ und die plastische Bogenlänge E_v^p):

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} + \boldsymbol{Q}_1 (\boldsymbol{T}, \boldsymbol{\alpha}, \lambda) = \mathbf{0} \tag{4.13}$$

$$\dot{E}_v^p + Q_3 (\boldsymbol{T}, \boldsymbol{\alpha}, \lambda) = 0 \tag{4.14}$$

mit den speziellen Ansätzen

$$\boldsymbol{Q}_1 = \lambda\, c \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \tag{4.15}$$

$$Q_3 = -\lambda \sqrt{\frac{2}{3} \boldsymbol{B} \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{T}} \cdot\cdot \boldsymbol{B} \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{T}}} . \tag{4.16}$$

Dabei ist zu bemerken, dass die hier gewählte Lagrangesche Darstellungsweise und die oben verwendete Eulersche Formulierung identisches Materialverhalten beschreiben und somit gleichberechtigt sind.

Für die verkürzte Darstellung der weiteren Lösungsschritte wird ein Variablen-Vektor $\boldsymbol{z}$ eingeführt.

$$\boldsymbol{z} = (\boldsymbol{T}, \boldsymbol{\alpha}, E_v^p, \lambda)^T \tag{4.17}$$

Ebenso wird ein Operator $\boldsymbol{G}$ definiert, der die linke Seite des nach der Zeit diskretisierten Algebro-Differenzialgleichungssystems repräsentiert. Gesucht wird letztendlich der Variablen-Vektor

$$\boldsymbol{z}_{n+1} = \left(\boldsymbol{T}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_{n+1}, E^p_{v_{n+1}}, \lambda_{n+1}\right)^T \tag{4.18}$$

für den Lastschritt $n+1$ als Lösung des nichtlinearen algebraischen Gleichungssystems

$$\boldsymbol{G}_{n+1} = \boldsymbol{G}\,(\boldsymbol{z}_{n+1}) = \mathbf{0}\,. \tag{4.19}$$

Dabei ist es unerheblich, welches konkrete Verfahren zur Zeitdiskretisierung des Deformationsgesetzes verwendet wurde. Im vorliegenden Fall wurden eine verallgemeinerte Trapezregel als Einschrittverfahren bzw. eine Rückwärtsdifferenzenmethode als Mehrschrittverfahren untersucht.

Die Berechnung von $\boldsymbol{z}_{n+1}$ erfolgt mit Hilfe des Newtonverfahrens

$$\boldsymbol{z}_{n+1}{}^{i+1} = \boldsymbol{z}_{n+1}{}^{i} - \left(\nabla_{\boldsymbol{z}_{n+1}{}^{i}}\, \boldsymbol{G}\right)^{-1} \boldsymbol{G}_{n+1}{}^{i}\,, \tag{4.20}$$

wobei die konkrete Form der Jakobi-Matrix $(\nabla_{\boldsymbol{z}}\, \boldsymbol{G})$ für den Fall eines Deformationsgesetzes ohne Berücksichtigung einer Substruktur in [goe01] detailliert beschrieben wurde.

Bezüglich der ausführlicheren Darstellung der dort verwendeten Verfahrensweise und der konkreten Beziehungen für das betrachtete Deformationsgesetz sei auf [goe01] und die dort angegebenen Literaturzitate verwiesen.

Deterministische Optimierungsverfahren sind trotz ihres zusätzlichen numerischen Aufwandes zur Ermittlung des Gradienten der Zielfunktion zur Materialparameteridentifikation bei Auswertung inhomogen verformter Proben zu favorisieren. Die Anzahl der Optimierungsschritte ist wesentlich geringer als bei gradientenfreien Verfahren, zudem kann die Konvergenz oder Divergenz des Optimierungsprozesses in der Regel deutlich verfolgt werden.

Gradientenverfahren führen immer in das nächste lokale Minimum der Zielfunktion, vorausgesetzt, das Verfahren konvergiert und strebt keinem Sattelpunkt zu. Die Zielfunktion (3.1) ist eine vieldimensionale Fläche, bei der nicht ausgeschlossen werden kann, dass sie über mehrere Minima verfügt. Grundsätzlich ist es das Ziel einer jeden Optimierung, das globale Minimum zu ermitteln. Mit Gradientenverfahren ist das nicht eindeutig möglich, da sie immer einer einmal gefundenen Abstiegsrichtung folgen, die in das nächstgelegene Minimum führt. Zur Ermittlung des globalen Minimums sind verschiedene Methoden denkbar:

- Verwendung stochastischer Verfahren mit einer sehr großen Anzahl von Versuchen,
- Nutzung von Gradientenverfahren mit unterschiedlichen Startvektoren zur Ermittlung verschiedener Minima,
- Verwendung hybrider Verfahren als Kombination stochastischer und Gradientenverfahren.

Mit den genannten Verfahren ist es möglich, eine diskrete Menge verschiedener Minima zu ermitteln, deren tiefstes als das globale angesehen wird.

Als Vergleichsgrößen für die Materialparameteridentifikation werden in verschiedenen Lastschritten die Verschiebungen U_1, U_2 und U_3 an ausgewählten Punkten der Oberfläche einer geeigneten Probe gemessen. Sie bilden die Grundlage für die Formulierung folgender Zielfunktion:

$$\Phi(\boldsymbol{p}) \;=\; \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_L} \sum_{j=1}^{n_T} \sum_{K=1}^{3} \Big(\{U_K(\boldsymbol{p})\}_{ij} - \{\bar{U}_K\}_{ij} \Big)^2 \tag{4.21}$$

mit

$U_1,\, U_2\, U_3$ – berechnete Verschiebungsfelder

$\bar{U}_1,\, \bar{U}_2\, \bar{U}_3$ – gemessene Verschiebungsfelder

und

$\boldsymbol{p} \;=\; \big(p_1,\, \ldots,\, p_{n_p}\big)^T$ – Materialparameter

n_L – Anzahl der Lastschritte
n_T – Anzahl der Messpunkte.

Parameter $\boldsymbol{p}$, welche die Funktion (4.21) minimieren, gelten als Lösung des Optimierungsproblems. Es ist darauf zu achten, dass bei Messung und FE-Berechnung materielle Punkte in den gleichen Orten, gleiche Randbedingungen und gleiche Lastschritte betrachtet werden. Die Berechnung kann aus Gründen der Konvergenz der FE-Lösung auch in kleineren Lastschritten erfolgen, ein Vergleich von Verschiebungen ist jedoch nur auf gleichen Lastniveaus gestattet.

Für die Gradientenverfahren ergibt sich folgendes Iterationsschema zur Ermittlung der Materialparameter $\boldsymbol{p}_{l+1}$ aus der vorhergehenden Lösung $\boldsymbol{p}_l$:

$$\boldsymbol{p}_{l+1} \;=\; \boldsymbol{p}_l \;+\; \omega\, \boldsymbol{s}_l \tag{4.22}$$

mit der Suchrichtung $\boldsymbol{s}_l$

$$\boldsymbol{s}_l \;=\; -\boldsymbol{Q}_l^{\,-1}\, \boldsymbol{\nabla}\, \Phi_l \tag{4.23}$$

und der Schrittweite ω. Der Gradient der Zielfunktion (4.21) hat folgendes Aussehen:

$$\boldsymbol{\nabla}\, \Phi_l = \sum_{i=1}^{n_L} \sum_{j=1}^{n_T} \sum_{K=1}^{3} \Big(\{U_K(\boldsymbol{p}_l)\}_{ij} - \{\bar{U}_K\}_{ij} \Big) \, \frac{d\, \{U_K\}_{ij}}{d\boldsymbol{p}_l}\,. \tag{4.24}$$

Er ist laut (4.24) durch die Struktur der Zielfunktion vorgegeben, die Suchrichtung wird somit maßgeblich durch die Wahl der Matrix $\boldsymbol{Q}_l$ beeinflusst. Ihre konkrete Definition führt zu unterschiedlichen Gradientenverfahren. Im Falle kleiner Verzerrungen hat sich besonders das Verfahren nach Levenberg-Marquardt bewährt ([ben98, ben00, goe97, krei00, lev44, mar63]). Für $\omega = 1$ wird die Suchrichtung $\boldsymbol{s}_l$ so ermittelt, dass das Minimum (4.21) in einem gewissen Vertrauensbereich (trust-region)

$$\|\boldsymbol{s}_l\| \leq \delta \tag{4.25}$$

mit einem vorgegebenen Radius δ gesucht wird ([ben00, boh97]). Die Matrix $\boldsymbol{Q}_l$ ergibt sich aus

$$\boldsymbol{Q}_l = \boldsymbol{H}_{GN} + \mu \boldsymbol{I} \,. \tag{4.26}$$

Hierbei stellt $\boldsymbol{H}_{GN}$ eine modifizierte Hesse-Matrix (Matrix der zweiten Ableitungen der Zielfunktion nach den Materialparametern) dar, die nur Produkte der ersten partiellen Ableitungen enthält, und deren Komponenten $(H_{GN})_{mn}$ sich für das Modell (4.21) wie folgt ergeben:

$$(H_{GN})_{mn} = \sum_{i=1}^{n_L} \sum_{j=1}^{n_T} \sum_{K=1}^{3} \frac{\partial \left\{U_K(\boldsymbol{p})\right\}_{ij}}{\partial p_m} \frac{\partial \left\{U_K(\boldsymbol{p})\right\}_{ij}}{\partial p_n} \,. \tag{4.27}$$

Der Wert μ wirkt als Dämpfungsparameter und wird so ermittelt, dass die Lösung den vorgegebenen Vertrauensbereich nicht verletzt

$$\mathcal{G}(\mu) = {\boldsymbol{s}_l}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{s}_l - \delta^2 \quad \Rightarrow \quad \mu^{k+1} = \mu^k - \frac{\left(\mathcal{G}(\mu^k) + \delta^2\right) \mathcal{G}(\mu^k)}{\mathcal{G}_{,\mu}|^k \, \delta^2} \tag{4.28}$$

mit

$$\mathcal{G}_{,\mu} = -2{\boldsymbol{s}_l}^{\mathrm{T}} {\boldsymbol{Q}_l}^{-1} \boldsymbol{s}_l \quad \text{und} \quad \mu^o = 0 \,. \tag{4.29}$$

Fern der Lösung ergeben sich große Werte für μ, so dass der Levenberg-Marquardt-Algorithmus dem Gradientenverfahren (Methode des steilsten Abstiegs) ähnelt und eine schnelle globale Konvergenz in den ersten Suchschritten gewährleistet. Im Laufe der Berechnung wird μ verkleinert, so dass der Iterationsprozess in der Nähe der Lösung in das Gauß-Newton-Verfahren mit seiner quadratischen Konvergenz übergeht.

Im Folgenden werden die Grundzüge eines Verfahrens zur semianalytischen Sensitivitätsanalyse vorgestellt, mit dessen Hilfe die für den Gradienten der Zielfunktion benötigten Ableitungen der Verschiebungskomponenten nach den Materialparametern berechnet werden können. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird dabei von der Existenz nur eines Materialparameters p ausgegangen. Das vorgestellte Verfahren ist dann nach der Lösung des direkten Problems komplett auf jeden zu identifizierenden Materialparameter anzuwenden. Es hat den Vorteil, analoge numerische Strukturen zu nutzen, die bereits bei der Lösung des direkten Problems generiert wurden. Außerdem besitzen die benötigten Ableitungen die gleiche

Genauigkeit wie die Lösung des direkten Problems (Knotenverschiebungen). Für weiterführende Darstellungen sei wiederum auf [ben00, boh97, goe01] und darin enthaltene Literaturangaben verwiesen.

Die Herleitung der Beziehungen für die semianalytische Sensitivitätsanalyse bei finiten inelastischen Verzerrungen basiert auf einem Vorschlag von *Mahnken* ([mah97, mah99, mah00]). Wird die Erfüllung des Gleichgewichts zu einem Zeitpunkt t vorausgesetzt, gilt die Darstellung des Prinzips der virtuellen Arbeit:

$$\int\limits_{V_o} [\boldsymbol{T}\ (\boldsymbol{GRAD}\,(\boldsymbol{U}) + \boldsymbol{I})] \cdot\cdot\, \boldsymbol{GRAD}\,(\delta \boldsymbol{U})\ dV_o =$$

$$= \int\limits_{A_{o1}} \boldsymbol{R}^T\, \delta \boldsymbol{U}\ dA_o + \int\limits_{V_o} \varrho_o\, \boldsymbol{K}^T\, \delta \boldsymbol{U}\ dV_o\,, \tag{4.30}$$

wobei $\boldsymbol{K}$ die im materiellen Punkt angreifenden Volumenkräfte und $\boldsymbol{R}$ die Randkräfte auf der Teiloberfläche A_{o1} des Körpers repräsentieren. Die Herleitung und numerische Realisierung dieser Gleichgewichtsbedingungen im Rahmen der FEM sind in [go00b] im Detail erläutert.

Im folgenden Schritt wird eine implizite Differenziation der Gleichgewichtsbedingung (4.30) nach einem Materialparameter durchgeführt. Da die Oberflächen- und Volumenkräfte weder explizit noch implizit von den Materialparametern abhängen, für den 2. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor $\boldsymbol{T}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{p}), \boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{p}), E_v^p(\boldsymbol{p}), \lambda(\boldsymbol{p}), \boldsymbol{p})$ jedoch keine Einschränkungen gelten, folgt mit

$$\frac{d\boldsymbol{T}}{dp} = \frac{\partial \boldsymbol{T}}{\partial \boldsymbol{E}} \cdot\cdot\, \frac{d\boldsymbol{E}}{dp} + \frac{d^p\boldsymbol{T}}{dp} \tag{4.31}$$

aus (4.30) die Parameterableitung des Prinzips der virtuellen Arbeit:

$$\int\limits_{V_o} \left\{ \frac{d\boldsymbol{T}}{dp}\ [\boldsymbol{GRAD}(\boldsymbol{U}) + \boldsymbol{I}] \right\} \cdot\cdot\, \boldsymbol{GRAD} \left(\delta \frac{d\boldsymbol{U}}{dp} \right) dV_o +$$

$$+ \int\limits_{V_o} \left\{ \boldsymbol{T} \left[\boldsymbol{GRAD} \left(\frac{d\boldsymbol{U}}{dp} \right) \right] \right\} \cdot\cdot\, \boldsymbol{GRAD} \left(\delta \frac{d\boldsymbol{U}}{dp} \right) dV_o = 0\,. \tag{4.32}$$

Diese Formulierung hat die gleiche Struktur wie die materielle Zeitableitung des Prinzips der virtuellen Arbeit (siehe auch [go00b, goe01]). Dabei wird die Tatsache, dass bei fixierter Zeit unterschiedliche Materialparameter zu unterschiedlichen Verzerrungs- und Spannungszuständen führen, genutzt, Ableitungen, Inkremente bzw. Variationen nach den Materialparametern zu definieren, die eine mathematisch vollkommen analoge Struktur und Bedeutung besitzen wie materielle Zeitableitungen. Mit

$$\frac{d^p\boldsymbol{T}}{dp} \tag{4.33}$$

wird der Anteil der vollständigen Ableitung des Spannungstensors nach den Materialparametern bezeichnet, der mögliche explizite Abhängigkeiten der Spannungen von diesen Parametern und deren impliziten Abhängigkeiten außer jenen über die Verzerrungen berücksichtigt.

Wird analog zur Variation der materiellen Zeitableitung des Verzerrungstensors seine Variation der Ableitung nach einem Materialparameter definiert (siehe [goe01]), kann leicht gezeigt werden, dass aus (4.32) folgende Formulierung der Parameterableitung des Prinzips der virtuellen Arbeit abgeleitet werden kann:

$$\int\limits_{V_o} \left(\frac{d\boldsymbol{T}}{d\boldsymbol{E}} \cdot\cdot \frac{d\boldsymbol{E}}{dp} \right) \cdot\cdot\, \delta \left(\frac{d\boldsymbol{E}}{dp} \right) dV_o \; +$$

$$\int\limits_{V_o} \boldsymbol{T} \cdot\cdot \left[\left(\boldsymbol{GRAD} \left(\frac{d\boldsymbol{U}}{dp} \right) \right)^T \boldsymbol{GRAD} \left(\delta \left(\frac{d\boldsymbol{U}}{dp} \right) \right) \right] dV_o \; =$$

$$= - \int\limits_{V_o} \frac{d^p\boldsymbol{T}}{dp} \cdot\cdot\, \delta \left(\frac{d\boldsymbol{E}}{dp} \right) dV_o \tag{4.34}$$

Gleichung (4.34) stellt die Ableitung der globalen Gleichgewichtsbeziehung nach einem Materialparameter dar und kann durch ein Ortsdiskretisierungsverfahren (z. B. FEM) in ein System nichtlinearer algebraischer Gleichungen übergeführt werden. In diesem Zusammenhang ergeben sich Element*steifigkeitsbeziehungen* der Form

$$\boldsymbol{K}^e \, \frac{d\hat{\boldsymbol{U}}}{dp} \; = \; - \int\limits_{V_o^e} \boldsymbol{B}_v{}^T \left(\frac{d^p\boldsymbol{T}}{dp} \right) dV_o^e \; = \; \boldsymbol{P}_p{}^e \tag{4.35}$$

mit der aus der Lösung des direkten Problems bekannten Elementsteifigkeitsmatrix

$$\boldsymbol{K}^e \; = \int\limits_{V_o^e} \left[\boldsymbol{B}_v{}^T \left(\frac{d\boldsymbol{T}}{d\boldsymbol{E}} \right) \boldsymbol{B}_v \; + \bar{\boldsymbol{G}}\, \boldsymbol{T}^\star\, \bar{\boldsymbol{G}} \right] dV_o^e \tag{4.36}$$

und der rechten Seite

$$\boldsymbol{P}_p{}^e \; = \; - \int\limits_{V_o^e} \boldsymbol{B}_v{}^T \left(\frac{d^p\boldsymbol{T}}{dp} \right) dV_o^e \, . \tag{4.37}$$

In Anlehnung an die Darstellung in [go00b] werden mit $\boldsymbol{G}$ die Matrix der Formfunktionen, $\bar{\boldsymbol{G}}$ deren Ortsableitungen nach den globalen Koordinaten, $\boldsymbol{B}_v$ die Matrix der Verzerrungs-Verschiebungs-Beziehungen und $\hat{\boldsymbol{U}}$ die Knotenverschiebungen bezeichnet.

Nach Akkumulation aller Elementmatrizen und -vektoren folgt das FEM-Gleichungssystem

$$\boldsymbol{K} \, \frac{d\boldsymbol{U}}{dp} \; = \; \boldsymbol{P}_p \, , \tag{4.38}$$

welches als Lösung die für den Gradienten der Zielfunktion benötigten Ableitungen der Knotenverschiebungen nach den Materialparametern ergibt und mit den entsprechenden Beziehungen bei kleinen Verzerrungen identisch ist ([boh97, goe97]). Dabei kann nach der Lösung des direkten Problems in jedem Lastschritt dessen Gesamtsteifigkeitsmatrix erneut verwendet werden. Die Randbedingungen für das System (4.38) werden in den Knoten mit vorgegebenen Verschiebungen durch die Beziehungen

$$\frac{d\boldsymbol{U}}{dp} = \boldsymbol{0} \tag{4.39}$$

charakterisiert.

Für den Aufbau der rechten Seite des Systems (4.38) sind die Ableitungen (4.33) der Spannungen nach den Materialparametern zu bilden. Dazu wird das ausiterierte, zeitdiskretisierte Deformationsgesetz implizit nach den Materialparametern abgeleitet. Aus der symbolischen Darstellung des Deformationsgesetzes

$$\boldsymbol{G}\left(\boldsymbol{z}_n(\boldsymbol{p}), \boldsymbol{z}_{n+1}(\boldsymbol{p}), \boldsymbol{p}\right) = \boldsymbol{0} \tag{4.40}$$

folgt

$$\frac{d^p \boldsymbol{G}_{n+1}}{dp} = \frac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{z}_n}\frac{d^p \boldsymbol{z}_n}{dp} + \frac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{z}_{n+1}}\frac{d^p \boldsymbol{z}_{n+1}}{dp} + \frac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}}{\partial p} = \boldsymbol{0}\,. \tag{4.41}$$

Auch diese Gleichung weist eine direkte Analogie zu den Beziehungen bei kleinen Verzerrungen auf ([boh97, ben00]), wodurch die Verwendung der dort entwickelten Methoden auch für finite inelastische Verzerrungen möglich wird. Mit der Kennzeichnung $d^p(.)/dp$ für die vollständige Ableitung des diskretisierten Deformationsgesetzes nach den Materialparametern wird die Annahme aus der impliziten Differenziation des Gleichgewichtszustandes unterstrichen, dass in diesem Anteil implizite Abhängigkeiten von den Materialparametern über den Verzerrungszustand nicht berücksichtigt werden. Dies ist auch insofern nicht notwendig, da das Verzerrungsinkrement $\Delta\boldsymbol{C}_{n+1}$ als Lösung des Randwertproblems quasi die Belastung für das Anfangswertproblem und somit keine unabhängige Variable darstellt.

Nach einer geeigneten Umformung von (4.41)

$$\frac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{z}_{n+1}}\frac{d^p \boldsymbol{z}_{n+1}}{dp} = \left(\nabla_{\boldsymbol{z}_{n+1}} \boldsymbol{G}\right)\frac{d^p \boldsymbol{z}_{n+1}}{dp} = -\frac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{z}_n}\frac{d^p \boldsymbol{z}_n}{dp} - \frac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}}{\partial p} \tag{4.42}$$

ergeben sich die geforderten Ableitungen der Spannungen nach den Materialparametern als Teil der Lösung eines Systems linearer algebraischer Gleichungen mit der aus dem Prozess der Integration des Deformationsgesetzes bekannten Jakobi-Matrix. Dabei ist die Jakobi-Matrix des letzten, zur Konvergenz von (4.20) führenden Iterationsschrittes zu verwenden.

In seiner ausführlichen Darstellung erhält die Beziehung (4.42) unter Berücksichtigung des zeitdiskretisierten Deformationsgesetzes folgende Form:

$$\left(\nabla_{\boldsymbol{z}_{n+1}}\boldsymbol{G}\right)\begin{pmatrix} \left.\dfrac{d^p\boldsymbol{T}}{dp}\right|_{n+1} \\ \left.\dfrac{d^p\boldsymbol{\alpha}}{dp}\right|_{n+1} \\ \left.\dfrac{d^pE_v^p}{dp}\right|_{n+1} \\ \left.\dfrac{d^p\lambda}{dp}\right|_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{R_T} - \dfrac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}{}^{\boldsymbol{T}}}{\partial p} \\ \boldsymbol{R_\alpha} - \dfrac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}{}^{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial p} \\ R_{E_v^p} - \dfrac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}{}^{E_v^p}}{\partial p} \\ -\dfrac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}{}^{\lambda}}{\partial p} \end{pmatrix}. \tag{4.43}$$

Die konkreten Ausdrücke auf der rechte Seite von (4.43) sind für das oben vorgestellte Deformationsgesetz in [goe01] im Detail angegeben. Die Implementierung in SPC–PMHP wurde abgeschlossen und erste Identifikationsberechnungen am Beispiel eines Zugstabes mit synthetischen Messwerten waren erfolgreich. Dabei zeigte sich im Falle kleiner Verzerrungen eine sehr gute Übereinstimmung mit Optimierungsergebnissen auf der Basis des im vergangenen Berichtszeitraum entwickelten und bewährten FEM-Programmes SPC–PMEP.

2.4.2 Teilaufgabe Schädigungsmechanik

In seiner Verallgemeinerung für geometrisch nichtlineare Aufgabenstellungen wird das Gurson–Tvergaard–Needleman Modell durch die Fließbedingung

$$\begin{aligned} F &= \left(\frac{q}{\sigma_M}\right)^2 + 2q_1 f^* \cosh\left(-\frac{3}{2}q_2\frac{p}{\sigma_M}\right) - \left(1 + q_3 f^{*^2}\right) = 0 \\ f^*(f) &:= \begin{cases} f & \forall f \le f_c \\ f_c + \dfrac{\frac{1}{q_1} - f_c}{f_F - f_c}(f - f_c) & \text{sonst} \end{cases} \\ \sigma_M &:= \sigma_0\left(\frac{\varepsilon_{pM}}{\varepsilon_0} + 1\right)^n; \quad p := -\frac{1}{3}I_{\boldsymbol{\tau}}; \quad q := \sqrt{-3II_{\boldsymbol{dev(\tau)}}} \end{aligned} \tag{4.44}$$

charakterisiert, wobei $I_{\boldsymbol{\tau}}$ für die erste Invariante des Kirchhoffschen Spannungstensors und $II_{\boldsymbol{dev(\tau)}}$ für die zweite Invariante des Deviators des Kirchhoffschen Spannungstensors stehen. Für die skalaren internen Variablen ε_{pM} (plastische Vergleichsdehnung des Matrixmaterials) und f (Porenkonzentration) werden die Evolutionsgleichungen

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\varepsilon_{pM} &= \lambda \frac{1}{\sigma_M(1-f)} \boldsymbol{\tau} : \frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{\tau}} \\
\frac{d}{dt} f &= \lambda \left[\frac{\mathcal{A}}{\sigma_M(1-f)} \boldsymbol{\tau} : \frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{\tau}} + (1-f) I_{\frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{\tau}}} \right] ; \\
& \qquad \mathcal{A} := \frac{f_N}{s_N \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_{pM} - \varepsilon_N}{s_N} \right)^2 \right]
\end{aligned} \tag{4.45}$$

angesetzt. Das Materialverhalten wird durch den Satz

$$q_1, \quad q_2, \quad q_3, \quad f_0, \quad f_c, \quad f_F, \quad \sigma_0, \quad \varepsilon_0, \quad n, \quad f_N, \quad s_N, \quad \varepsilon_N$$

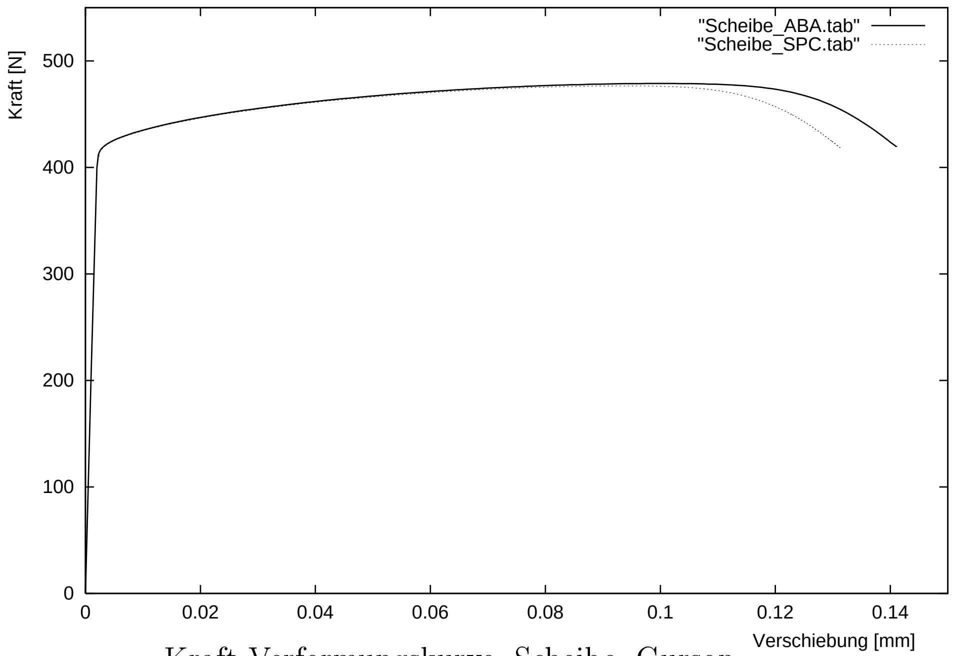
(q_1, q_2, q_3 – Parameter des GTN–Modells; f_0 – Anfangsporenkonzentration; f_c – kritischer Porenvolumenanteil; f_F – Porenvolumenanteil bei Versagen; σ_0 – Anfangsfließspannung; ε_0 – Anfangsfließdehnung; n – Verfestigungsparameter; f_N – porenbildender Volumenanteil; s_N – Standardabweichung; ε_N – Mittelwert) von 11 Materialparametern vervollständigt. Darüber hinaus gelten die Prinzipien der assoziierten Fließtheorie (4.4).

Da das GTN–Modell ohne Einschränkungen mit der in SPC-PMHP implementierten Materialklasse verträglich ist, bestand die Implementierung dieses speziellen Materialverhaltens ausschließlich in der Bedienung der universellen Materialschnittstelle von SPC-PMHP. Die im Projektantrag vorgesehene Verifikation wurde an Hand von Vergleichsrechnungen mit einem kommerziellen FEM–Programm vorgenommen [misp01].
Für die Vergleichsrechnungen wurden 8-Knotenelemente mit 9 Integrationspunkten verwendet. Die Materialparameter für das GTN–Modell sind in der folgenden Tabelle angegeben.

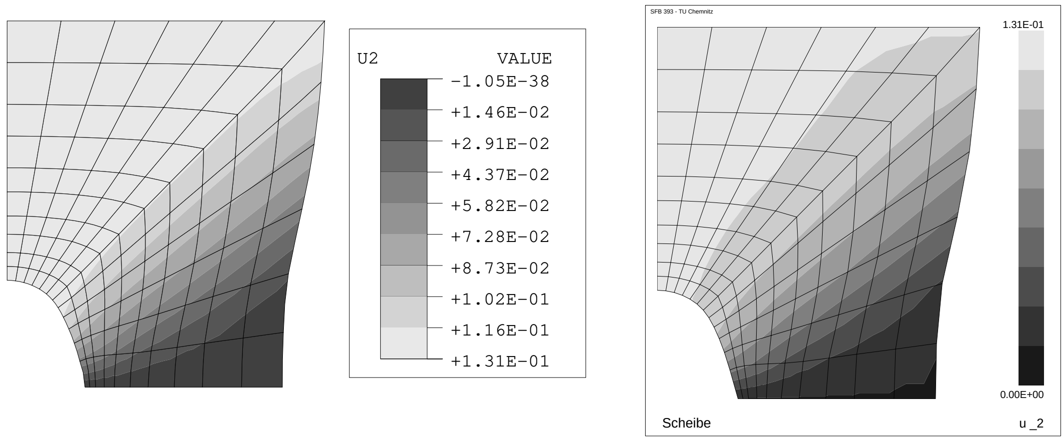
E	ν	q_1	q_2	q_3	f_0	f_c
210000	0.3	1.5	1.0	2.25	0.001	0.05
f_F	f_N	s_N	ε_N	σ_0	ε_0	n
0.3	0.01	0.1	0.3	451.4	0.3386	0.4896

Materialparameter, GTN–Modell

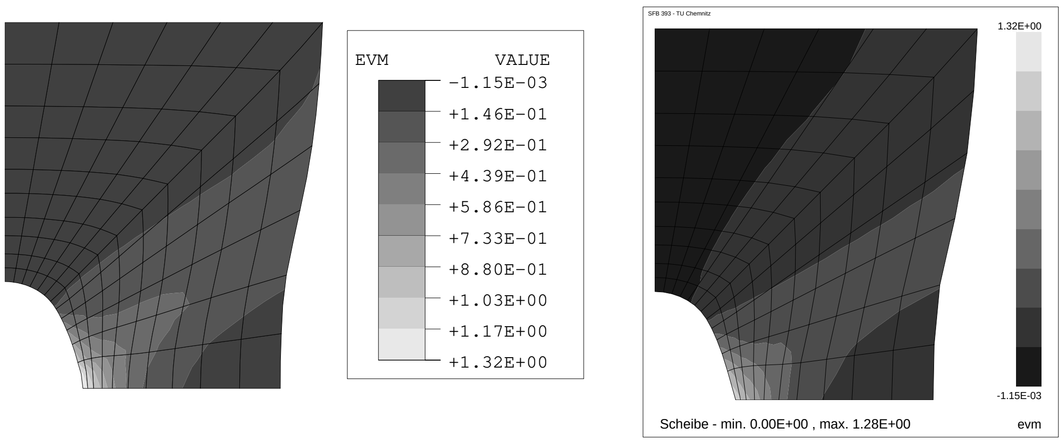
In den folgenden Darstellungen sind die Kraft–Verformungskurven, wie sie im Zugversuch gewonnen werden, sowie Konturplots der Verschiebungen ($u2$) in Belastungsrichtung für eine gelochte Scheibe aufgezeigt. Die Verfestigung kennzeichnet die plastische Vergleichsdehnung des Matrixmaterials (evm) und die Entfestigung die Porenkonzentration (f). In den Konturplots sind die Maxima und Minima von **SPC-PMHP** an denen von **ABAQUS** skaliert.



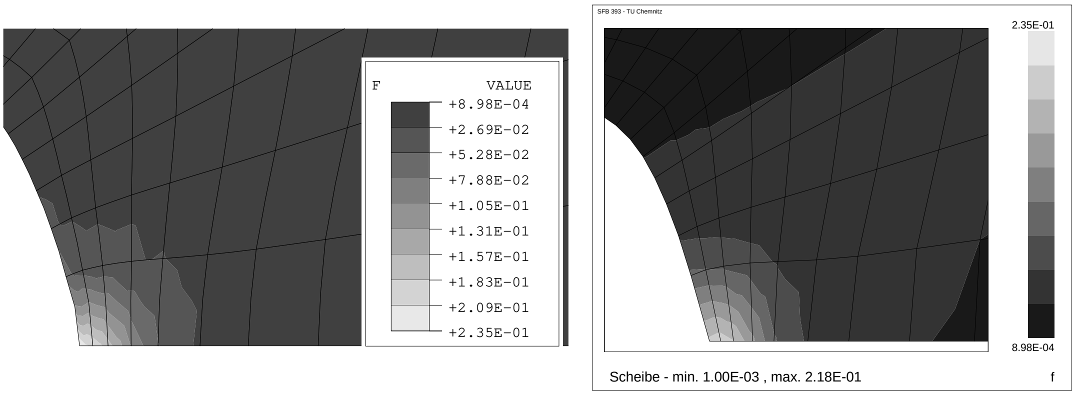
Kraft-Verformungskurve, Scheibe, Gurson



Verschiebungen $u2$, Scheibe, Gurson



Plastische Vergleichsdehnung evm, Scheibe, Gurson



Porenkonzentration f, Scheibe, Gurson

Bedingt dadurch, dass in **ABAQUS** nicht die Lie–Ableitung (vgl. (4.4)), sondern die Jaumann–Ableitung als objektive Zeitableitung verwendet wird, letztlich also in beiden Programmen ein unterschiedliches Materialverhalten realisiert ist, konnten die Ergebnisse nicht vollständig zur Deckungsgleichheit gebracht werden.

2.4.3 Teilaufgabe Netzadaption

In den letzten 15–20 Jahren sind selbstadaptive Diskretisierungsmethoden entwickelt worden, die sich bei dem nun erreichten Erkenntnisstand auch zum Einsatz für nichtlineare Aufgabenstellungen anbieten.

Am weitesten verbreitet sind a posteriori Fehlerschätzer und Indikatoren, die auf Grundlage der berechneten Lösung globale und lokale Informationen über den Fehler der numerischen Lösung liefern. Für lineare Probleme ist es möglich, eine numerische Lösung mit einem vorgegebenen Toleranzbereich und einem minimalen numerischen Aufwand zu erhalten. Bei der numerischen Simulation von quasistatischen Deformationsprozessen im Rahmen der ebenen finiten Elasto–Plastizität handelt es sich allerdings um nichtlineare Randwertprobleme

$$\begin{aligned} -\nabla\cdot\sigma(\nabla u) &= f \quad \text{in} \quad \Omega\subset R^2 \\ u &= u_0 \quad \text{auf} \quad \Gamma_D \\ n\cdot\sigma(\nabla u) &= g \quad \text{auf} \quad \Gamma_N \end{aligned} \tag{4.46}$$

mit der zusätzlichen Schwierigkeit, dass $\sigma(\nabla u)$ nicht explizit bekannt ist, sondern Differenzial–Algebraischen Gleichungen vom Index 1 genügt. Eine derartige Aufgabenstellung scheint sich auf den ersten Blick jeglicher tieferen mathematischen Analyse zu entziehen. So könnte die Idee entstehen, dass einzig heuristische Vorgehenweisen (z.B. Zienkiewicz–Zhu [zien92]) zu einem praktikablen a posteriori Fehlerindikator führen.

Eine genauere Analyse, gestützt auf die Überblicksdarstellung [verf96] von *Verfürth*, zeigt allerdings, daß eine explizite Darstellung für $\sigma(\nabla u)$ durchaus nicht erforderlich ist, um eine a posteriori Fehlerabschätzung für (4.46) bei Vorliegen finiter elastisch–plastischer Verzerrungen vornehmen zu können. So läßt sich zeigen, dass der Diskretisierungsfehler bis auf Konstanten durch die Größe η

$$\eta := \sqrt{\sum_{\Omega_T \subset \Omega} \eta_T^2} \tag{4.47}$$

nach oben und nach unten beschränkt ist. Der Beitrag der einzelnen finiten Elemente Ω_T ist unter der Voraussetzung, dass die Nährungslösung u_h des nichtlinearen Problems hinreichend nahe bei der exakten Lösung liegt, gegeben durch

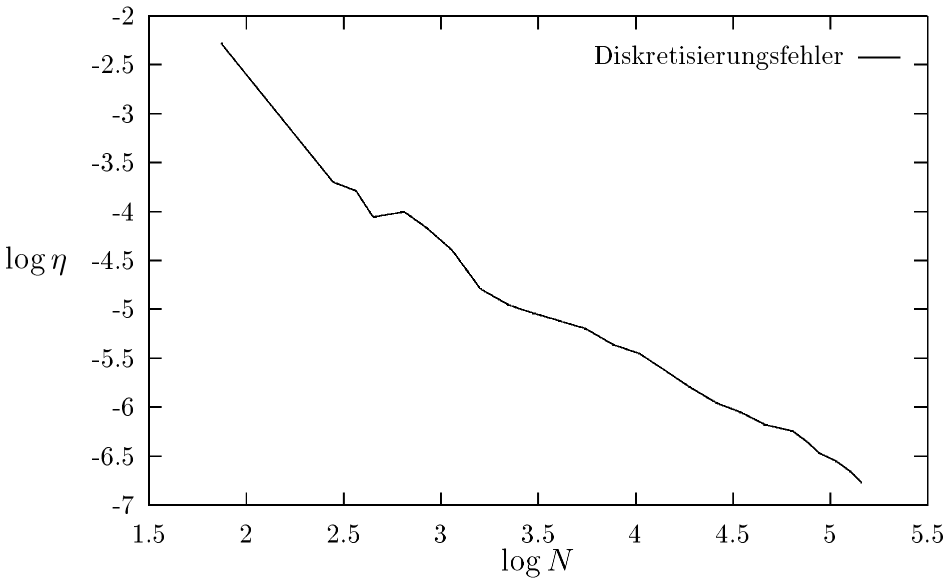
$$\begin{aligned} \eta_T^2 \approx \quad & h_T^2 \int_{\Omega_T} \langle \nabla \cdot \sigma(\nabla u_h) + f_h, \nabla \cdot \sigma(\nabla u_h) + f_h \rangle d\omega + \\ & \sum_{e \in \delta\Omega_T} h_e \int_e \langle [n_e \cdot \sigma(\nabla u_h)], [n_e \cdot \sigma(\nabla u_h)] \rangle d\gamma \end{aligned} \tag{4.48}$$

mit

$$[\phi(x)]_{x \in e} := \begin{cases} \lim\limits_{t \to 0} \phi(x - tn_e) - g_h & \forall e \in \Gamma_N \\ \lim\limits_{t \to 0} \phi(x - tn_e) - \lim\limits_{t \to 0} \phi(x + tn_e) & \text{sonst} \end{cases}$$

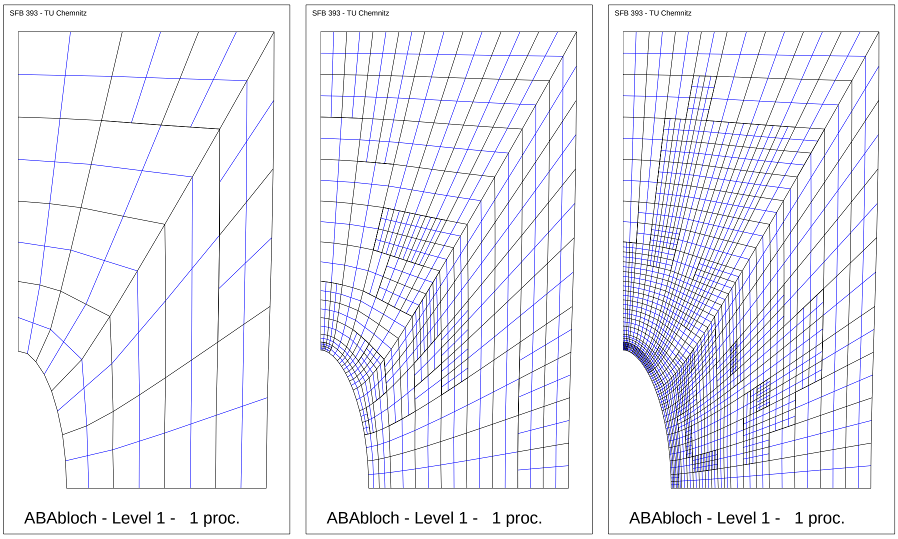
(n_e – Außennormale). Hierbei wurde vorausgesetzt, dass f und g hinreichend genau durch f_h und g_h approximiert werden. Der hier angegebene residuale Fehlerschätzer ist identisch mit dem in Tp A3 implementierten Schätzer für linear elastische Aufgabenstellungen.

Für erste Tests nichtlinearer Probleme wurde deshalb das Programm SPC–PM2Ad in seinem Anwendungsspektrum auf hyperelastisches Material erweitert. Um die Leistungsfähigkeit der modifizierten Version von SPC–PM2Ad zu illustrieren, ist examplarisch eine gelochte quadratische Scheibe unter einachsigem Zug selbstadaptiv vernetzt worden. In der doppelt logarithmischen Darstellung von η über der Knotenzahl N



ist bis ca. 3000 Knoten ein Fehler $O(h^2)$, wie er auch für die verwendeten 8–Knoten–Elemente zu erwarten ist, wiederzufinden. Vermutlich, bedingt durch die in der

Ausgangsvernetzung verwendeten verzerrten Elemente, setzt sich dieses Verhalten jedoch bei feineren Netzen nicht mehr fort.
Auch ein Blick auf die Folge automatisch verfeinerter Netze



zeigt neben einer dem Gradienten der Spannungen folgenden Verfeinerung noch zusätzliche in verzerrten Elementen.
Da, wie sich erwiesen hat, hiermit ein wirklicher Fehlerschätzer gefunden wurde, besteht kein Grund, noch zusätzliche Heuristiken zum Einsatz zu bringen. Die Berücksichtigung von plastischen Deformationen führt zu keinen zusätzlichen prinzipiellen Problemen, sondern ist eher eine softwaretechnische Aufgabe. Ein zusätzlicher Aufwand entsteht durch die Notwendigkeit der Projektion der elementbasierten Lösungsanteile (Spannungen, interne Variable) auf das feinere Netz. Vorbereitende Untersuchungen werden bis zum Abschluß des Bewilligungszeitraums durchgeführt.

Literaturverzeichnis

[bal65] Baltov, A., Sawczuk, A., A rule of anisotropic hardening, *Acta Mechanica* **1**, 81-92 (1965)

[ben98] Benedix, U., Görke, U.-J., Kreißig, R., Kretzschmar, S., *Local and global anlysis of inhomogeneous displacement fields for the identification of material parameters*, in: Computer Methods in Composite Materials VI, Proceedings of the CADCOMP 98, S.V. Hoa, W.P. De Wilde, W.R. Blain (eds.), Computational Mechanics Publications, Southampton, 159-168 (1998)

[ben00] Benedix, U., *Parameterschätzung für elastisch-plastische Deformationsgesetze bei Berücksichtigung lokaler und globaler Vergleichsgrößen*, Dissertation, TU Chemnitz, Institut für Mechanik, Bericht 4/00 (2000)

[boh97] Bohnsack, E., *Zur Identifikation von Verfestigungsparametern elastisch-plastischer Stoffgesetze an inhomogen verformten Proben*, Dissertation, TU Chemnitz-Zwickau, Institut für Mechanik, Bericht 1/97 (1997)

[buch98] Bucher, A., *Thermodynamisch konsistente konstitutive Gleichungen zur Beschreibung finiter elasto-plastischer Deformationen*, in: Modellierung und Identifikation, S. Hartmann, P. Haupt, 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)

[bu01a] Bucher, A., Görke, U.-J., Kreißig, R., Development of a generalized material interface for the simulation of finite elasto-plastic deformations, *Int. J. Sol. Struct.*, zur Veröffentlichung angenommen (2001)

[bu01b] Bucher, A., *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, erscheint 2001

[goe97] Görke, U.-J., Kreißig, R., *Einflußfaktoren bei der Identifikation von Materialparametern elastisch-plastischer Deformationsgesetze aus inhomogenen Verschiebungsfeldern*, TU Chemnitz-Zwickau, Preprint SFB393/97-04 (1997)

[go98a] Görke, U.-J., Benedix, U., Kreißig, R., *Einige Erfahrungen mit der Identifikation von Materialparametern als schlecht gestelltes inverses Problem*, in: Tagungsband zum 6. Workshop Numerische Methoden der Plastomechanik des Institutes für Mechanik der TU Hannover, D. Besdo (ed.), Hannover (1998)

[go00a] Görke, U.-J., Bucher, A., Kreißig, R., Michael, D., *Implicit integration of deformation laws for large elasto-plastic deformations*, in: Proceedings of the IV. IASS-IACM Colloquium, Chania-Kreta, (2000)

[go00b] Görke, U.-J., Bucher, A., Kreißig, R., Michael, D., *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)

[goe01] Görke, U.-J., Bucher, A., Kreißig, R., Michael, D., *Ein Beitrag zur Materialparameteridentifikation bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen durch Analyse inhomogener Verschiebungsfelder mit Hilfe der FEM*, TU Chemnitz, Preprint SFB393/01-03 (2001)

[krei92] Kreißig, R. *Einführung in die Plastizitätstheorie*, Fachbuchverlag, Leipzig (1992)

[krei98] Kreißig, R., Meyer, A., Michael, D., Görke, U.-J., *Effiziente parallele Algorithmen zur Simulation des Deformationsverhaltens von Bauteilen aus elastisch-plastischen Materialien*, Arbeitsbericht SFB393 für 1996-98, TU Chemnitz (1998)

[krei00] Kreißig, R., Benedix, U., Görke, U.-J., About some statistical aspects of the identification of parameters of elasto-plastic material behaviour, *Archive of Applied Mechanics*, zur Veröffentlichung angenommen (2000)

[lev44] Levenberg, K., A method for the solution of certain nonlinear problems in least squares, *Quart. Applied Mathematics* **2**, 164-168 (1944)

[mah97] Mahnken, R., Stein, E., Parameter identification for finite deformation elasto-plasticity in principal directions, *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.* **147**, 17-39 (1997)

[mah99] Mahnken, R., Kuhl, E., Parameter identification of gradient enhanced damage models with the finite element method, *Eur. J. Mech. A/Solids* **18**, 819-835 (1999)

[mah00] Mahnken, R., Aspects on the Finite-Element Implementation of the Gurson Model including Parameter Identification, *Int. J. Plast.* **15(11)**, 1111-1137 (1999)

[mar63] Marquardt, D.W., An algorithm for least squares estimation of nonlinear parameters, *SIAM J. Applied Mathematics* **11**, 431-441 (1963)

[mich98] D. Michael, M. Meisel, *Some remarks to large deformation elasto-plasticity (continuum formulation)*, TU Chemnitz-Zwickau, Preprint SFB393/98-28 (1998)

[mich01] D. Michael, *Kontinuumstheoretische Grundlagen und algorithmische Behandlung von ausgewählten Problemen der assoziierten Fließtheorie*, TU Chemnitz, Preprint SFB393/01-06 (2001)

[misp01] D. Michael, M. Springmann, *Zur numerischen Simulation des Versagens duktiler metallischer Werkstoffe (Algorithmische Behandlung und Vergleichsrechnungen)*, TU Chemnitz, Preprint SFB393/01-09 (2001)

[verf96] R. Verfürth, *A Review of A Posteriori Error Estimation and Adaptive Mesh–Refinement Techniques*, John Wiley & Sons and B.G. Teubner Publishers, Chichester, New York, Brisbane, Singapore, Stuttgart, Leipzig 1996.

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Entsprechend der Aufgabenstellung im Teilprojekt D1 des SFB393 der TU Chemnitz wurden die theoretischen Grundlagen der Parameteridentifikation für elastisch-plastische Deformationsgesetze bei großen Verzerrungen auf der Basis der Analyse inhomogener Verschiebungsfelder vorgestellt. Diese beinhalten die Entwicklung geeigneter, thermodynamisch konsistenter Deformationsgesetze und deren Integration, der Beziehungen für die semianalytische Sensitivitätsanalyse und der numerischen Algorithmen. Bezüglich der numerischen Methoden und deren programmtechnischer Realisierung konnte auf den Verfahren zur Bearbeitung von Problemen kleiner elastisch-plastischer Verzerrungen aufgebaut werden. Die Implementierung der entwickelten Algorithmen zur Materialparameteridentifikation bei finiten Verzerrungen wurde exemplarisch für ein elastisch-plastisches Materialmodell ohne Substruktur durchgeführt.

Ein entscheidendes Problem für die Materialparameteridentifikation bei Berücksichtigung geometrischer Nichtlinearitäten stellt die Entwicklung geeigneter Experimente dar, die den bekannten Meßverfahren zugänglich sind (dreidimensionale Analyse großer Verzerrungen). Da gegenwärtig keine realen Messwerte aus dem Bereich großer Verzerrungen verfügbar sind, werden die Untersuchungen zunächst mit synthetischen Messwerten fortgeführt. Erste Optimierungsrechnungen mit synthetischen Messwerten am Zugstab wurden erfolgreich mit Ergebnissen bei kleinen Verzerrungen verifiziert.

Es ist zu prüfen, in welchem Umfang reale Umformprozesse zum Zweck der Materialparameteridentifikation ausgewertet werden können. Das erfordert eine effektive numerische Behandlung von Problemen zur realistischen Simulation des mechanischen Modells. Eine offene Frage ist in diesem Zusammenhang die Bearbeitung der Kontaktproblematik, die gegenwärtig in SPC–PMHP nicht implementiert ist. Sie soll in einem weiteren Antragszeitraum auf der Basis moderner mathematischer Algorithmen bei Vorliegen der erforderlichen Vorarbeiten auf dem Gebiet der Gleichungslöser und der geeigneten Definition des Randwertproblems realisiert werden.

Teilprojekt D2

2.1 Teilprojekt D2

Effiziente parallele Algorithmen für die numerische Simulation 3–dimensionaler, stark phasengekoppelter, disperser Mehrphasenströmungen

2.1.1 Antragsteller

Dr.–Ing. Thomas Frank	Technische Universität Chemnitz Fakultät für Maschinenbau und Verfahrenstechnik Professur Technische Thermodynamik Forschungsgruppe Mehrphasenströmungen

2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. sc. nat. Klaus Bernert	Professur Technische Thermodynamik
DI Klaus Pachler	Forschungsgruppe Mehrphasenströmungen

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Die letzten zwei Jahrzehnte haben eine enorme Entwicklung im Bereich der numerischen Strömungsmechanik hervorgebracht. Zum einen sind Rechengeschwindigkeit und Speicherplatzangebot der Rechner um mehrere Größenordnungen gewachsen. Zum anderen gab es eine beständige Fortentwicklung der eingesetzten numerischen Simulationsverfahren bezüglich ihrer Effizienz und Genauigkeit sowie der zunehmenden Berücksichtigung komplexer physikalischer Wechselwirkungen.

Verfahren zur numerischen Simulation von phasengekoppelten, dispersen Mehrphasenströmungen unter Berücksichtigung von Stoff–, Impuls– und Wärmeübertragung zwischen den Phasen gehören zu den Anwendungen, die die höchsten Anforderungen an die Rechenleistung der Computersysteme stellen. Wegen der hohen Kosten, die mit dem Einsatz von Supercomputern verbunden sind, kam es in den letzten Jahren verstärkt zur Entwicklung von massiv parallelen Rechnerarchitekturen. Multiprozessorsysteme mit verteiltem Speicher (MIMD–Architekturen) erreichen durch den parallelen Einsatz vieler relativ einfacher Prozessoren eine Rechenleistung und Speicherkapazität, die die modernster Supercomputer zu übertreffen vermag. Um die potentiell sehr hohe Rechenleistung einer solchen Multiprozessorarchitektur bei der Berechnung strömungsmechanischer Problemstellungen auch wirklich zu erreichen, ist eine konzeptionelle Überarbeitung serieller Lösungsalgorithmen für ihren Einsatz auf einer bestimmten parallelen Hardwarearchitektur notwendig.

Als numerische Methode zur Berechnung von Einphasenströmungen kommt im vorliegenden Forschungsvorhaben ein Finite–Volumen–Verfahren zum Einsatz, welches über blockweise strukturierten Gitternetzen arbeitet. Für Verfahren dieses Typs hat sich die Methode der Gebietszerlegung als eine einfach zu realisierende und effizient anwendbare Parallelisierungsmethode etablieren können. Hierbei wird den Prozessoren der parallelen Maschine eine bestimmte Zahl von Gitterblöcken fest zugeordnet. Die Kopplung der Blöcke erfolgt über Datenaustausch innerhalb der Prozessoren und zwischen den Prozessoren.

Für die Berechnung von dispersen Mehrphasenströmungen auf massiv parallelen Rechnerarchitekturen waren bis vor kurzer Zeit noch keine Verfahren entwickelt bzw. veröffentlicht. Soweit zur Modellierung der dispersen Phase das Euler–Verfahren (Zwei–Fluid–Modell) herangezogen wird, sind die für Einphasenströmungen entwickelten Parallelisierungsverfahren unmittelbar übertragbar. Für das bei dispersen Mehrphasenströmungen häufig angewandte, und aus physikalischer Sicht vorteilhaftere Lagrange–Verfahren fehlten jedoch geeignete Ansätze zu dessen Parallelisierung. Auch heute sind neben den eigenen Veröffentlichungen (siehe Kapitel 2.4.3) nur wenige Arbeiten aus der internationalen Fachliteratur bekannt, die geeignete Parallelisierungsansätze für das Lagrange–Verfahren darstellen [2.13, 2.14, 2.15].

Für das Forschungsvorhaben D2 standen im Berichtszeitraum die folgenden Arbeiten im Mittelpunkt:

1. Erhöhung der Flexibilität und der parallelen Effizienz des parallelen Strömungslösers durch Übergang vom Ein-Block-Verfahren (jeder Prozessor bearbeitet genau einen Gitterblock) zu einem Multi-Block-Konzept.

2. Verbesserung der Effizienz des Strömungslösers mit Hilfe der Mehrgittertechnik.

3. Anpassung des Verfahrens zur Partikelberechnung an die aus dem Übergang zum Multi-Block-Konzept und der Implementierung des Mehrgitterverfahrens resultierende veränderte Speicherstruktur.

4. Erweiterung der Funktion des Programmsystems MISTRAL/PartFlow–3D auf instationäre Mehrphasenströmungen mit 2-Wege-Koppelung.

5. Einführung von skalaren Transportgleichungen als Tracer für Speciestransportvorgänge und einer Energiegleichung für instationäre Strömungen

Insgesamt hatten die Arbeiten das Ziel, ein effizientes und flexibles Verfahren zur Berechnung disperser Mehrphasenströmungen in komplexen Geometrien zu erarbeiten, mit dem die rechenintensive Simulation phasengekoppelter, disperser Mehrphasenströmungen auf einer breiten Palette von High–Performance–Computing (HPC)–Plattformen effektiv durchgeführt werden kann.

Die folgenden Kapitel zeigen die Vorgehensweise, und beschreiben den gegenwärtigen Stand der Realisierung der angegebenen Schwerpunkte. Des weiteren sei auf die nach 2.4.3 aufgeführten Veröffentlichungen verwiesen, in denen die wichtigsten Ergebnisse aus dem Teilprojekt D2 niedergelegt sind.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

2.3.1 Teilaufgabe Steigerung der Effizienz des Strömungslösers

Grundgleichungen

Die kontinuierliche Phase der betrachteten Strömungen besteht aus einem Newton'schen Fluid. Die Fluidströmung ist inkompressibel, turbulent, statistisch stationär und isotherm. Die Fluidturbulenz wird mit Hilfe eines k-ε-Modells modelliert. Unter diesen Annahmen können die zeitlich gemittelten Gleichungen zur Beschreibung der Fluidströmung in Form der folgenden verallgemeinerten Transportgleichung dargestellt werden:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho_F\, u_j^F\, \Phi\right) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\Gamma\, \frac{\partial \Phi}{\partial x_j}\right) = S_F + S_P, \quad j = 1, 2, 3. \tag{3.1}$$

Hierbei ist ρ_F die Dichte des Fluids, u_j^F sind die kartesischen Komponenten der Fluidgeschwindigkeit, Φ ist eine allgemeine Variable und Γ der zugehörige Transportkoeffizient. S_F beschreibt einen allgemeinen Quellterm, S_P modelliert die Wechselwirkung zwischen disperser und fluider Phase. Eine genauere Beschreibung der in Gleichung (3.1) auftretenden Größen wird durch Tabelle 2.1 gegeben, dabei bezeichnen ρ_F und μ die Dichte und die kinematische Viskosität des Fluids, p ist der Druck und f_i sind die Komponenten der pro Masseneinheit einwirkenden äußeren Kräfte.

Gleichung für	Φ	Γ	S_F	S_P
Masse	1	0	0	0
Impuls	u_i^F	μ_{eff}	$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\Gamma \frac{\partial u_j^F}{\partial x_i}\right) - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho_F f_i$	$S_{u_i}^P$
Turbulente kinetische Energie	k	$\frac{\mu_t}{\sigma_k}$	$P_k - \rho_F\, \varepsilon$	0
Dissipation von k	ε	$\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}$	$\frac{\varepsilon}{k}(c_{\varepsilon_1} P_k - c_{\varepsilon_2}\, \rho_F\, \varepsilon)$	0
$P_k = \mu_t \frac{\partial u_i^F}{\partial x_j}\left(\frac{\partial u_i^F}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^F}{\partial x_i}\right);\ \mu_{eff} = \mu + \mu_t,\ \mu_t = \rho_F c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$				
$c_\mu = 0.09,\ c_{\varepsilon_1} = 1.44,\ c_{\varepsilon_2} = 1.92,\ \sigma_k = 1.0,\ \sigma_\varepsilon = 1.3$				

Tabelle 2.1: Strömungsvariablen, Transportkoeffizienten und Quellterme

Numerische Lösung

Ausgangspunkt für die im Berichtszeitraum vorgenommenen Arbeiten war ein im Programmpaket MISTRAL/3D implementierter Strömungslöser mit folgenden Eigenschaften (vgl. [2.28]):

- Vernetzung des dreidimensionalen Lösungsgebietes durch ein blockstrukturiertes hexagonales Gitter

- Finite-Volumen-Dikretisierung der zu lösenden Gleichungen
- Iterative Lösung des Gleichungssystems durch das SIMPLE-Verfahren [2.6, 2.7]
- Verwendung des SIP-Verfahrens [2.12] als Gleichungslöser
- Parallelisierung des numerischen Verfahrens für Computersysteme mit MIMD-Struktur auf der Grundlage des Gebietszerlegungsverfahrens.

Zur Steigerung der Effizienz des beschriebenen Verfahrens wurde das bestehende Konzept an zwei Stellen erweitert. Ein erster Schritt diente der gleichmäßigeren Verteilung der Rechenarbeit auf die Prozessoren einer parallelen Rechenanlage und bestand in der Änderung des Grundsatzes „je Prozessor ein Block" auf das Multiblock-Prinzip, bei dem jeder Prozessor eine variable Anzahl von Blöcken nacheinander bearbeitet. Den zweiten Schwerpunkt bildete der Einsatz der Mehrgittertechnik zur Beschleunigung der Konvergenz der Verfahrens.

Multiblock-Konzept

Der entscheidende Schritt beim Übergang zum Multiblock-Konzept war die Umstellung der zuvor benutzten Speicherung von 3D-Variablen in separaten Feldern auf Strukturen, welche Pointer für alle zu einem Block gehörigen Variablen enthalten. Jeder Prozessor arbeitet über einem Feld von solchen Strukturen, wobei die Feldelemente den auf dem Prozessor liegenden Blöcken entsprechen. Durch die Abbildung einer zusätzlichen Arbeitsstruktur vom gleichen Typ auf die Strukturen für die einzelnen Blöcke wird die Arbeit der Prozessoren mit ihren Blöcken organisiert. Das folgende Programmstück zeigt eine typische Schleife für die Arbeit eines Prozessors:

```
for (n=1; n<=number_of_local_blocks; n++)
{   set_pointers_for_block(n);
    work_on_block(n);
}
```

Die Zuordnung der Blöcke zu den Prozessoren erfolgt statisch auf der Grundlage eines heuristischen Prinzips, welches aus der Optimierung von Maschinenbelegungen als LPT-Regel (largest processing time first) bekannt ist: Es wird vorausgesetzt, daß die Anzahl der Blöcke die Zahl der Prozessoren übersteigt. Die Blöcke werden nach der Zahl ihrer Kontrollvolumen geordnet. Nun wird, beginnend mit dem größten, ein Block nach dem anderen jeweils einem der Prozessoren zugeordnet, für den die Zahl der Kontrollvolumen aller schon zugeordneten Blöcke minimal ist.

Mehrgitterverfahren

Für die Anwendung der Mehrgittertechnik bestanden im Programmsystem MISTRAL/3D zwei Möglichkeiten, zum einen die Beschleunigung der äußeren SIMPLE-Iterationen, d.h. die Anwendung eines äußeren Mehrgitterverfahrens auf das gesamte Gleichungssystem, und zum anderen die Beschleunigung der Konvergenz der inneren Iterationen für die Druckkorrekturgleichung. Beide Möglichkeiten wurden, da sie sich nicht gegenseitig ausschließen, so implementiert, daß sie miteinander kombiniert werden können.

Grundlage für die Anwendung des Mehrgitterverfahrens war eine nochmalige Erweiterung der Speicherstruktur, um den Zugriff auf die verschiedenen Gitterebenen durch einfache Adressverschiebungen zu realisieren. Das äußere Mehrgitterverfahren benutzt das ursprüngliche SIMPLE-Verfahren als Glättungsverfahren und als Grobgitterlöser, Restriktion und Prolongation werden jeweils trilinear ausgeführt. Im inneren Mehrgitterverfahren für die Druckkorrektur werden die Gleichungen für die gröberen Gitter durch Addition der entsprechenden Feingittergleichungen ermittelt, da für die gröberen Gitter keine Differentialgleichung vorliegt. Das ursprünglich genutzte SIP-Verfahren dient als Glätter, als Grobgitterlöser wird ein mit einer unvollständigen Cholesky-Zerlegung vorkonditioniertes CG-Verfahren eingesetzt. Auch hier finden trilineare Interpolationen für Restriktion und Prolongation Verwendung.

2.3.2 Teilaufgabe Parallele Partikelberechnung

Zur Modellierung der Bewegung der dispersen Phase wird ein von der Forschungsgruppe in D2 entwickeltes 3–dimensionales Euler–Lagrange–Verfahren verwendet. Hierbei wird die Bewegung einer großen Anzahl diskreter Partikel berechnet, wobei jedes simulierte Partikel wiederum eine große Anzahl realer Partikel repräsentiert, die dieselben physikalischen Eigenschaften besitzen. Entlang einer so berechneten Trajektorie bewegen sich pro Zeiteinheit eine Anzahl Partikel N_P, d.h. jede Trajektorie repräsentiert einen bestimmten Anteil des gesamten Partikelmassenstroms $\dot{m}_{P,ges}$.

Unter der Annahme, daß die Dichte der dispersen Phase wesentlich größer als die Dichte der fluiden Phase ist ($\rho_P/\rho_F \gg 1$), sind die wichtigsten auf ein Partikel wirkenden Kräfte die Widerstandskraft, die Auftriebskraft durch die Rotation des Partikels (Magnus-Kraft), die Auftriebskraft durch Scherantrömung des Teilchens (Saffman-Kraft), die Gravitationskraft und der hydrostatische Auftrieb. Die Bewegungsgleichungen für die translatorische und rotatorische Bewegung einer Partikel lauten damit:

$$\frac{d}{dt}\,\vec{x}_P = \vec{v}_P \tag{3.2}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\,\vec{v}_P = & \frac{3}{4}\frac{\rho_F}{(\rho_P+\frac{1}{2}\rho_F)d_P}\Bigg(v_{rel}C_D(Re_P)\left[\vec{v}_F-\vec{v}_P\right] \\ & + \frac{v_{rel}}{\omega_{rel}}C_M(\sigma)\cdot\left[(\vec{v}_F-\vec{v}_P)\times(\vec{\omega}-\vec{\Omega})\right] \\ & + \frac{2\nu_F^{1/2}}{\pi|\vec{\Omega}|^{1/2}}C_A\left[(\vec{v}_F-\vec{v}_P)\times\vec{\Omega}\right]\Bigg) + \frac{\rho_P-\rho_F}{\rho_P+\frac{1}{2}\rho_F}\,\vec{g}\,, \end{aligned} \tag{3.3}$$

$$\frac{d}{dt}\,\vec{\omega} = -\frac{15}{16\pi}\frac{\rho_F}{\rho_P}\omega_{rel}\xi_m(Re_\omega)\left[\vec{\omega}-\vec{\Omega}\right]\ . \tag{3.4}$$

mit : $Re_P = \dfrac{d_P\,v_{rel}}{\nu_F}\ ,\quad Re_\omega = \dfrac{1}{4}\dfrac{{d_P}^2\omega_{rel}}{\nu_F}\ ,\quad \sigma = \dfrac{1}{2}\dfrac{d_P\omega_{rel}}{v_{rel}}\ ,$

$$\vec{\Omega} = \frac{1}{2}\mathrm{rot}\;\vec{v}_F\ ,\quad v_{rel} = |\vec{v}_F-\vec{v}_P|\ ,\quad \omega_{rel} = |\vec{\omega}-\vec{\Omega}|\ .$$

In diesen Gleichungen bezeichnet der Index F Fluidgrößen, der Index P Größen, die sich auf das Partikel beziehen, $\vec{\omega}$ ist die Rotationsgeschwindigkeit des Partikels, $\vec{\Omega}$ die Rotation des Fluides am Partikelort und ν_F die kinematische Viskosität des Fluides. Die Größen der Koeffizienten C_D, C_M, C_A und ξ_m können der Literatur entnommen werden [2.18, 2.10, 2.2].

Zur Modellierung der Partikel–Wand–Kollisionen wurde hier ein Wandrauhigkeitsmodell nach [2.9] verwendet. Die Modellierung von Partikel–Partikel–Kollisionen erfoglte mit Hilfe von Stoßwahrscheinlichkeitsmodellen nach Oesterle [2.3] und Sommerfeld [2.11]. Zur Modellierung des Einflusses der Fluidturbulenz auf die Partikelbewegung wurde das sogenannte Lagrangian-Stochastic-Deterministic (LSD) Tubulenzmodell verwendet [2.8]. Der Einfluß der dispersen Phase auf das Fluid wurde durch die Einführung von Quelltermen in die Fluidtransportgleichungen nach der Particle-Source-In-Cell (PSI-Cell) Methode [2.1] berücksichtigt. Eine detailliertere Beschreibung der eingesetzten Teilmodelle und des Lösungsverfahrens findet sich z.B. in [2.18, 3.5].

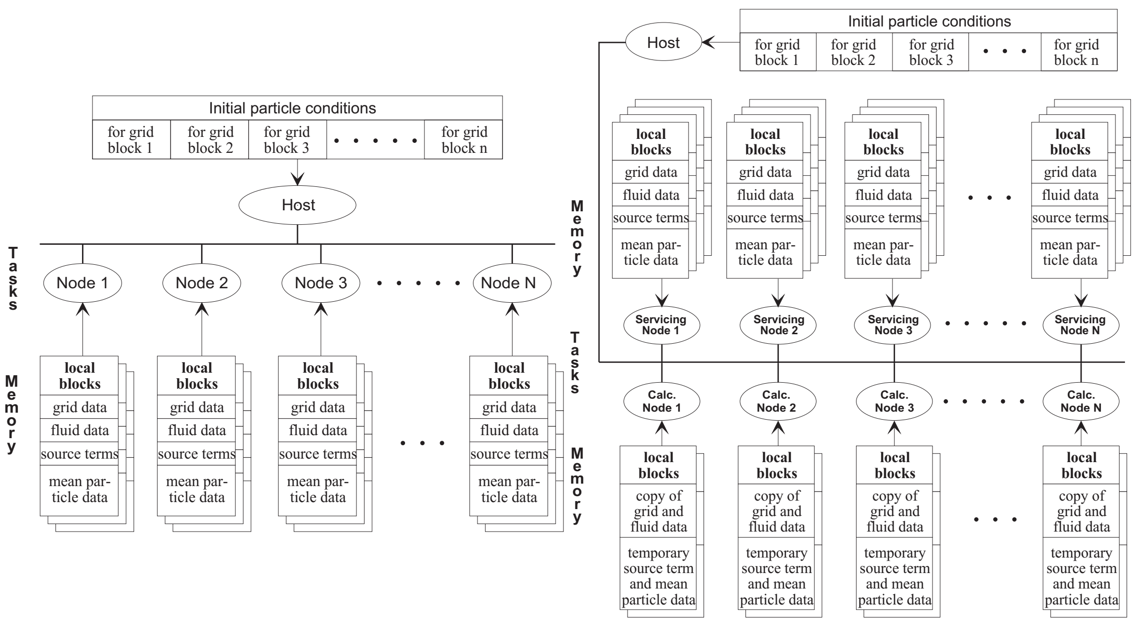


Abbildung 2.1: SDD– und DDD–Verfahren für die Parallelisierung des Lagrange'schen Berechnugnsverfahrens.

Parallelisierungsverfahren mit Statischer Domain Decomposition

Neben der Möglichkeit, die Berechnung der Fluid–Partikel–Strömung in einem seriellen Modus auszuführen, wurde zunächst für das 3–dimensionale Lösungsverfahren die sogenannte Statische Domain Decomposition (SDD) implementiert. Um das Lagrange-Verfahren auch auf massiv parallelen Rechnern mit ihrer pro Prozessorknoten beschränkten Speichergröße verwenden zu können, wurde zunächst das für den Navier–Stokes–Löser angewandte Prinzip der Gebietszerlegung auch auf das Lagrange–Berechnungsverfahren angewandt. Wie in Abb. 2.1 dargestellt, existieren zwei Arten von Prozessen: Ein Host-Prozeß und eine Anzahl von Node-Prozessen. Die Speicherstruktur für die für jeden der Node–Prozesse lokal und permanent gespeicherten Daten der Gittergeometrie und Fluidströmung entspricht dabei exakt derselben Struktur wie im Navier–Stokes–Löser. Eine Umverteilung der Datenstrukturen findet beim Übergang von der Berechnung der Fluidströmung zur Berechnung der Partikelbewegung nicht statt. Die Trajektorienberechnung wird von den Node-Prozessen durchgeführt, wobei ein Node alle Trajektoriensegmente berechnet, die die ihm zugeteilten Gitterblöcke durchqueren.

Der Host verteilt zu Beginn der Rechnung die Partikelstartbedingungen entsprechend den Startpositionen an die Node-Prozesse. Die Startbedingungen werden nur an solche Nodes gesendet, die die Daten des korrespondierenden Blockes gespeichert haben, in dem Partikelstartpositionen lokalisiert sind. Ein Node berechnet ein Trajektoriensegment vom Eintrittspunkt in den Block (Einströmrand oder Partitionsrand) bis zum Austrittspunkt aus dem Block (Ausströmrand oder Partitionsrand). Liegt der Austrittspunkt an einem Partitionsrand, so wird der Partikelstatus in diesem Punkt zunächst an den Host-Prozeß gesendet, der den Partikelstatus dann an den betreffenden Node-Prozeß weiterleitet. Dort wird dann die Trajektorienberechnung fortgesetzt. Diese Verfahrensweise wird wiederholt, bis alle Trajektorien eine Abbruchbedingung erreicht haben. Gleichzeitig zur Berechnung der Trajektorie erfolgt die Berechnung der Quelltermwerte für die Phasenwechselwirkungsterme.

Das SDD-Verfahren ist einfach zu implementieren, da es dieselbe Block–Prozessor–Zuordnung verwendet wie der parallelisierte Navier-Stokes-Löser. Der wesentliche Nachteil des SDD–Verfahrens besteht darin, daß keinerlei Mechanismen für eine Lastbalancierung existieren. Daraus resultierende ungleichmäßige Lastverteilungen zwischen den Prozessoren (mit den entsprechenden negativen Folgen für die parallele Effizienz des Verfahrens) kann resultieren aus :

1. Unterschiedliche Rechenleistung der rechnenden Prozessoren, z.B. bei heterogenen Workstation-Clustern.
2. Unterschiedlich große Blöcke des numerischen Gitters, d.h. verschiedene Anzahlen von Gitterzellen pro Prozessor.
3. Inhomogene Partikelverteilung im Strömungsgebiet, z.B. bei Freistrahlströmungen hinter Düsen, bei rezirkulierenden oder stark separierten Strömungen.
4. Partikel-Wand-Kollisionen, da in der Nähe der Wand der Integrationszeitschritt verkleinert wird. Außerdem erzeugt die Detektierung and Berechnung des Wandstoßes einen zusätzlichen Rechenaufwand.
5. Lokal höhere Konzentration der Partikelphase und daraus resultierende höhere Wahrscheinlichkeit von Partikel–Partikel–Kollisionen; dies führt zu lokal höherem Berechnungsaufwand auf dem betreffenden Prozessor.
6. Strömungsgebiete mit großen Gradienten der Fluidgeschwindigkeit und daraus resultierendem kleinen turbulenten Zeitmaß. Dies führt aus Gründen der Rechengenauigkeit ebenfalls zu einer Verkleinerung des Integrationszeitschritts in diesen Gebieten.

Die ersten beiden Punkte sind allen Domain Decomposition Verfahren gemeinsam und gelten auch für den parallelisierten Navier-Stokes-Löser. Die Punkte 3. - 6. gelten speziell für das SDD–Verfahren für das Lagrange'sche Berechnungsverfahren. Die dadurch verursachten Inhomogenitäten in der Verteilung des Rechenaufwands im Strömungsgebiet sind im allgemeinen zu Beginn der Rechnung nicht bekannt. Als Folge der statischen Zuordnung der Gitterblöcke zu den Prozessoren kann es zu einer inhomogenen Verteilung der Rechenlast unter den Prozessoren kommen, was die Effizienz der Parallelisierung reduziert.

Parallelisierungsverfahren mit Dynamischer Domain Decomposition

Das DDD–Parallelisierungsverfahren wurde entwickelt, um die angeführten Nachteile des SDD–Verfahrens hinsichtlich Lastbalancierung zu beseitigen. Abb. 2.1 zeigt das Prozessorschema dieses Verfahrens, das drei Klassen von unterschiedlich agierenden Prozessen aufweist : den Host-Prozess, die Service- und die eigentlichen Rechenprozesse. Dabei sind die sogenannten Service-Prozesse identisch mit den MPI-Prozessen, die innerhalb des Navier–Stokes–Lösers die Berechnung der Fluidströmung ausführen und operieren demzufolge auch auf denselben Datenstrukturen mit identischer Block–Prozessor–Zuordnung. Die Kommunikationsstruktur der Service–Prozesse ist als permanente Message–Loop ausgebildet, so daß diese Prozesse keine eigentliche Berechnungsarbeit leisten, sondern lediglich die Anforderungen der Rechenprozesse ständig entgegennehmen und beantworten. Die Rechenprozesse werden erst zur Laufzeit des Lagrange–Lösers in den Lösungsprozeß einbezogen und starten zunächst mit einer leeren Datenstruktur hinsichtlich lokal vorhandener Geometrie– und Fluidströmungsdaten. Nach der Zuteilung von Berechnungsaufgaben bzgl. der Partikelbewegung durch den Host-Prozess aquirieren diese Rechenprozesse dynamisch die hierzu benötigten Daten von demjenigen Service–Prozess, der in seiner lokalen Speicherstruktur über die entsprechenden Daten verfügt.

Die mittels standard-konformer MPI–Prozeduren empfangenen Daten werden dynamisch in die Block–Speicherstruktur des Rechenprozesses eingeordnet und stehen von nun an für einen bestimmten Zeitraum für Berechnungen der Partikelbewegung lokal zur Verfügung. Ändern sich die Berechnungsanforderungen an den Rechenprozess, so werden die Daten zunächst in einer Datenpipeline endlicher Länge aufbewahrt (Caching). Beim Überlauf dieser Datenpipeline werden die dynamischen Speicherstrukturen für die am längsten nicht mehr benötigten Geometrie– und Strömungsdaten aus der lokalen Speicherstruktur des Rechenprozesses entfernt.

Durch die Aufhebung des unmittelbaren Zusammenhangs zwischen dem Speicherort der Geometrie– und Fluidströmungsdaten und dem Ort der Partikeltrajektorienberechnung auf dem entsprechenden Gitterblock werden zunächst zwei wesentliche Dinge gegenüber dem SDD–Verfahren erreicht : 1. ein Trajektoriensegment auf einem bestimmten Gitterblock der Strömungsgeometrie kann durch einen beliebigen Rechenprozess des MIMD–Systems berechnet werden, und 2. liegen mehrere Anfangsbedingungen für ein und denselben Gitterblock vor, so sind diese von verschiedenen Rechenprozessen zeitgleich bearbeitbar. Die Folge ist eine dynamische Lastbalancierung des Parallelrechnersystems für den Lagrange'schen Berechnungsalgorithmus mit folgenden Eigenschaften :

- Unabhängigkeit der parallelen Effizienz des Lagrange'schen Berechnungsverfahrens von der konkreten Gebietszerlegung,
- Unabhängigkeit der Lastverteilung und damit der Effizienz des Algorithmus von der konkreten Fluid–Partikel–Strömung, wie z.B. von lokaler Phasentrennung/ –entmischung, nicht homogener Konzentrationsverteilung im Strömungsgebiet, lokal auftretender starker Partikel–Wand– oder Partikel–Partikel–Wechselwirkung,
- funktionierende Lastbalancierung auch auf heterogenen MIMD–Systemen wie z.B. Workstation–Clustern mit unterschiedlicher Rechenleistung der eingebundenen Prozessorknoten.

Es ist noch zu erwähnen, daß die Service-Prozesse und der Host-Prozess nicht auf eigenständigen physischen Prozessoren ausgeführt werden brauchen. Der Bedarf an Rechenleistung ist bei diesen Prozessen recht gering, so daß sich eine Superposition dieser Prozesse mit den N Rechenprozessen auf denselben N physischen Prozessoren ohne Einbuße an der Effizienz des DDD–Verfahrens bewährt hat, wenngleich Untersuchungen gezeigt haben, daß nicht alle MPI–Implementierungen eine solche Prozessüberlagerung auf einem physischen Prozessorknoten gleich gut unterstützen. Hier mußte LAM–MPI gegenüber MPICH in allen verfügbaren Versionen der Vorzug gegeben werden, da die Dämonprozesse von MPICH unabhängig von der tatsächlichen Rechenlast des MPI–Benutzer–Prozesses annähernd 100% der CPU–Leistung verbrauchen (siehe hierzu auch [3.7]).

2.3.3 Teilaufgabe Instationäre Mehrphasenströmungen

Die Instationärität einer Strömung wird von unterschiedlichen Kriterien beeinflußt. Die einfachsten Ursachen sind zeitlich veränderbare Randbedingungen (Einlaßmassenstrom) oder Geometrien (bewegter Kolben). Des weiteren gibt es Strömungen(vortex shading), die eine in der Zeit periodische Druckverteilung hinter der Ablösekante generieren. Bei Mehrphasenströmungen induziert die disperse Phase auf Grund der Wechselwirkung in der kontinuierlichen Phase eine transiente Änderung des Strömungsfelds.

Grundgleichungen

Es gelten die unter 2.3. definierten Annahmen, wobei für den Fall der instationären Strömungen Erweiterungen vorgenommen wurden. Die allgemeine Transportgleichung lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big(\rho_F\,\Phi\Big) + \frac{\partial}{\partial x_j}\Big(\rho_F\,u_j^F\,\Phi\Big) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\Gamma\,\frac{\partial \Phi}{\partial x_j}\right) = S_F + S_P,\quad j = 1,2,3. \qquad (3.5)$$

Gleichung (3.5) unterscheidet sich von Gleichung (3.1) durch den zusätzlichen ersten Term. S_F beschreibt einen allgemeinen Quellterm, S_P modelliert die Wechselwirkung zwischen disperser und fluider Phase, Eine genauere Beschreibung der in Gleichung (3.5) auftretenden Größen wird durch Tabellen 2.1 und 2.2 gegeben.

Gleichung	Φ	Γ	S_F	S_P
Masse	1	0	0	$\sum \frac{\partial m_k^P}{\partial t} N_k^P$
Impuls	u_i^F	μ_{eff}	$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\Gamma \frac{\partial u_j^F}{\partial x_i}\right) - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho_F f_i$	$\sum \frac{\partial (m_k^P u_k^P)}{\partial t} N_k^P$
Skalar	c_i	$\frac{\mu_t}{\sigma_c}$	0	$c_i \sum \frac{\partial m_k^P}{\partial t} N_k^P$
Enthalpie	h	$\frac{\mu_t}{\sigma_h}$	$\mu P_k/\mu_t + \rho_F \varepsilon$	0
$h = c_p T + \lvert u_i \rvert^2/2 + k, \quad \sigma_c = 1.0, \quad \sigma_h = 0.9, \quad 0 \le c_i \le 1$				

Tabelle 2.2: Strömungsvariablen, Transportkoeffizienten und Quellterme

Die Energiegleichung wird mittels der totalen Enthalpie h dargestellt und erlaubt eine einfache Koppelung mit der dispersen Phase. Die Quellterme S_F beinhalten den Beitrag für das viskose Heizen bei inkompressibler Strömung und den Einfluß der Dissipation nach dem k-ε-Modell.

Die Wechselwirkungsterme werden für jedes Rechenpartikel pro Kontrollvolumen berechnet und mit der physikalischen Partikelanzahl N_k^P multipliziert. Eine Skalargleichung wird zum Transport der Dampfphase verwendet. Eine weitere Skalargleichung ohne Quellterme wird als Tracer für die kontinuierliche Phase verwendet. Für Masse und Skalar wird der Massenübergang als Austauschterm berechnet.

Die Kopplung der Impulsgleichung läuft über den Austausch der Oberflächenkräfte (Widerstand, Druckgradient, virtuelle Masse), während die Körperkräfte (Gravitation, elektrische Ladung) unberücksichtigt bleiben. Die Diskretisierung erfolgt in einer semiimpliziten Weise [2.16], wobei sich die Geschwindigkeit der kontinuierlichen Phase in den Austauschtermen während der SIMPLE-Iterationen ändert, was eine Stabilisierung der Impulskoppelung bewirkt [2.32].

Instationärer Löser

Basis der Arbeiten war der stationäre Löser (siehe 2.3.1., 2.3.2., sowie [2.28]). Dieser wurde so erweitert, daß über einen Auswahlschalter der instationäre Löser optional aktiviert werden kann. Folgende Arbeiten wurden sowohl für die serielle als auch für die parallele Version von MISTRAL/PartFlow–3D durchgeführt:

- Implementation einer I/O-Prozedur, die das Modifizieren der wichtigsten Steuerparameter des Lösers in Abhängigkeit von der Realzeit der Berechnung ermöglicht
- Implementation von instationären Anfangsbedingungen für die disperse Phase
- Implementation einer Prozedur für die Verarbeitung der transienten Ausgabedaten der kontinuierlichen und der dispersen Phase im Zusammenhang mit dem kommerziellen Postprocessor Tecplot

- Erweiterung aller Erhaltungsgleichungen der kontinuierlichen Phase um den Instationärterm.
- Modifikationen im Partikellöser zur Abstimmung der Partikelintegrationszeit mit dem globalen, aktuellen Zeitschritt und zur Berücksichtigung von Partikel–Partikel–Kollisionen unter Verwendung der Modelle von Oesterle [2.3] und Sommerfeld [2.11].

Zeitdiskretisierung der kontinuierlichen Phase

Der Zeitterm in Gl. (3.5) wird als lokaler Term behandelt, wobei eine Mittelung über das Kontrolvolumen durchgeführt wird.

$$\int_V \frac{\partial(\rho_F\,\Phi)}{\partial t} dV = \overline{\frac{\partial(\rho_F\,\Phi)}{\partial t}} V \tag{3.6}$$

$$\text{mit} \quad \overline{\partial(\rho_F \Phi)/\partial t} \approx \partial(\rho_F \Phi_P)/\partial t$$

Diese Approximation für Φ auf der Basis der Finite–Volumen erlaubt eine Entwicklung nach der Taylor-Reihe für die Zeitkoordinate. Die Lösung zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ kann nur von einem früheren Zustand abhängen. Die Anzahl der verwendeten Stützstellen in der Zeit zur Approximation und die Wahl von Vorwärts- oder Rückwärtsdifferenzen bestimmen die Eigenschaften des Verfahrens [2.6]. Folgende 3 Verfahren werden unterschieden:

$$\int_t^{t+\Delta t} \Phi(t)dt \cong [\alpha\Phi^{t+\Delta t} + (1-\alpha)\Phi^t]\Delta t \qquad [0 \leq \alpha \leq 1] \tag{3.7}$$

- $\alpha = 0$ ...... explizites Verfahren (vorwärtiges Euler-Verfahren)
- $\alpha = 0.5$ ... zeitgemitteltes Verfahren (Crank-Nicolson-Verfahren)
- $\alpha = 1$ ...... implizites Verfahren (rückwärtiges Euler-Verfahren)

Die aktuelle Mistral-Implementation enthält ein implizites Verfahren($\alpha = 1$), daß sich durch seine Stabilität (keine Zeitschrittbegrenzung!) auszeichnet. Der Speicherplatzbedarf ist zwar höher gegenüber expliziten Verfahren, doch die größere Robustheit ist entscheidend.

Das Volumenintegral über die partielle Zeitableitung der Funktion $\Phi(t, X_i)$ wird durch die mit $1/\Delta t$ multiplizierte Differenz der zu den zwei Zeiten aus einer Volumenmittelung gebildeten Werten von Φ approximiert.

$$\frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \int_{V_P} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_F\,\Phi) dV_P dt \approx \frac{(V\rho_F\,\Phi)_P^{t+\Delta t} - (V\rho_F\,\Phi)_P^t}{\Delta t} \tag{3.8}$$

Die Gleichung (3.5) in linearisierter Form für primitive Variablen lautet für das Kontrolvolumen um den Zentralpunkt P:

$$A_P\Phi_P = \sum_{nb} A_{nb}\Phi_{nb} + S_\Phi \tag{3.9}$$

A_{nb} sind die Nachbarkoeffizienten und resultieren aus Konvektion und Diffusion. Der Zeitterm wird wie der Quellterm behandelt, wobei folgende Linearisierung über den Iterationsschritt n verwendet wird:

$$S(\Phi) = S_0^n + A_{S,P}^n(\Phi_P^{n+1} - \Phi_P^n) \quad \text{mit } A_{S,P}^n \approx \frac{\partial S^n}{\partial \Phi} \quad \text{und } A_{S,P}^n < 0 \tag{3.10}$$

Der Polkoeffizient A_P setzt sich aus Gl. (3.7) und Gl. (3.10) wie folgt zusammen:

$$A_P = \sum_{nb} A_{nb} + \frac{(\rho_F V)_P^{t+\Delta t}}{\Delta t} - A_{S,P}^n V_P \tag{3.11}$$

Der lineare Quellterm lautet:

$$S_\Phi = (S_0 - A_{S,P}^n \Phi) V_P + \frac{(\rho_F \Phi V)_P^t}{\Delta t} \tag{3.12}$$

Literaturverzeichnis

[**Zitierte Fremdliteratur**]

[2.1] Crowe, C.T., Sharma, M.P., Stock, D.E.: *The Particle–Source–In Cell (PSI–Cell) Model for Gas–Droplet Flows*, Trans. of ASME, J. Fluids Eng., Vol. 99, 1977, pp. 325–332.

[2.2] Crowe, C.T., Sommerfeld, M., Tsuj, Y.: *Multiphase Flows with Droplets and Particles*, CRC Press, Boca Raton, 1997.

[2.3] Fohanno, S., Oesterle, B.: *Analysis of the Effect of Collisions on the Gravitational Motion of Large Particles in a Vertical Duct*, Int. J. Multiphase Flows, Vol. 26, No. 2, pp. 267-292 (2000).

[2.4] Durst, F., Fischer, M., Jovanovic, J., Kikura, H., Lange, C.: *LDA measurments in the wake of a circular cylinder*, Notes in Numerical Fluid Dynamics,Ed. by Hirschel, Vieweg-Verlag .

[2.5] Turek, M., Schäfer, S.: *Benchmark Computations of Laminar Flow around a Cylinder*, Preprint 96-03(SFB359), Heidelberg (1996).

[2.6] Patankar, S.V.: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, McGraw–Hill, New York., 1980

[2.7] Perić, M.: *Ein zum Parallelrechnen geeignetes Finite–Volumen–Mehrgitterverfahren zur Berechnung komplexer Strömungen auf blockstrukturierten Gittern mit lokaler Verfeinerung*, Abschlußbericht zum DFG–Vorhaben Pe 350/3–1 im DFG–Habilitandenstipendiumprogramm, Stanford University, USA. 1992

[2.8] Schönung, B.: *Comparison of Different Dispersion Models for Particles in Lagrangian and Eulerian Prediction Codes*, Proceedings of the International Conference on Fluid Mechanics, Peking, July 1.-4., 1987, Peking University Press, China.

[2.9] Sommerfeld, M.: *Modelling of particle–wall collisions in confined gas–particle flows*, Int. Journal of Multiphase Flows, Vol. 18, No. 6, 1992, pp. 905–926.

[2.10] Sommerfeld, M.: *Modellierung und numerische Berechnung von partikelbeladenen turbulenten Strömungen mit Hilfe des Euler–Lagrange–Verfahrens,* Habilitationsschrift, Universität Erlangen/Nürnberg, Shaker Verlag, Aachen (1996).

[2.11] Sommerfeld, M.: *Inter-Particle Collisions in turbulent flows: a stochastic Lagrangian Model,* Conf. Turbulence and Shear Flow Phenomena, 1st Int. Symposium, Santa Barbara, CA, USA, Sept. 1999.

[2.12] Stone, H.L.: *Iterative solution of implicit approximations of multidimensional partial differential equations*, SIAM J. Numer. Anal., 5, 530-558, 1968.

[2.13] Tsuji, Y.: *Discrete Element Modelling of Clusters in Gas–Solid Flows,* Proc. 2nd Int. Symposium on Numerical Methods for Multiphase Flows, ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, San Diego, CA, USA, July 7–11, 1996, FED–Vol. 236, Vol. 1, p. 3.

[2.14] Tysinger, T.L., Missaghi, M.: *A Combined Shared–Memory and Distributed–Memory Model for Computation of Coupled Lagrangian Dispersed Phase and Eulerian Gas Phase Combustion,* Proc. Int. Conf. on Recent Developments and Advances Using Parallel Computers, "Parallel CFD '97", Manchester, England, May 19–21, 1997.

[2.15] Yonemura, S., Tanaka, T., Tsuji, Y.: *Cluster Formation in Gas–Solid Flow Predicted by the DSMC Method,* Proc. Int. Symposium on Gas–Solid Flows, ASME Fluids Engineering Conference, Washington D.C., USA, 1993, FED–Vol. 166, pp. 303–309.

[2.16] Beshay, K. R.: *Computer Modelling of Diesel Spray Dispersion and Evaporation,* PhD. Thesis, Imperial College London, (1985).

[**Veröffentlichungen zu eigenen Vorarbeiten (vor 1999)**]

[2.17] Bernert, K.: *τ-Extrapolation – Theoretical Foundation, Numerical Experiment and Application to Navier-Stokes Equations,* SIAM J. Sci. Comput. Vol. 18, No. 2, 1997.

[2.18] Frank, Th.: *Numerische Simulation der feststoffbeladenen Gasströmung im horizontalen Kanal unter Berücksichtigung von Wandrauhigkeiten,* Dissertation, Techn. Universität Bergakademie Freiberg, 1992.

[2.19] Frank, Th., Schade, K.P., Petrak, D.: *Numerical Simulation and Experimental Investigation of a Gas–Solid Two–Phase Flow in a Horizontal Channel,* Int. J. Multiphase Flow, Vol. 19, No. 1, 1993, pp. 187–198.

[2.20] Frank, Th.: *Comparison of three parallelization methods for calculation of disperse multiphase flows using the Lagrangian approach,* Proc. 3rd Int. Conf. "Parallel CFD '96", Implementations and Results Using Parallel Computers, Capri, Italy, May 20–23, 1996.

[2.21] Frank, Th. Wassen, E.: *Parallel Solution Algorithms for Lagrangian Simulation of Disperse Multiphase Flows,* Proc. 2nd Int. Symposium on Numerical Methods for Multiphase Flows, ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, San Diego, CA, USA, July 7–11, 1996, FED–Vol. 236, Vol. 1, pp. 11–20.

[2.22] Frank, Th. Wassen, E.: *Parallele Algorithmen für die numerische Simulation von Mehrphasenströmungen in komplexen 3–dimensionalen Geometrien,* Abschlußbericht zum DFG–Forschungsvorhaben im Normalverfahren, Projektnr.: Fr 1069/3-1, TU Chemnitz–Zwickau, FG Mehrphasenströmungen, Chemnitz, 1. Juni 1997.

[2.23] Frank, Th. Wassen, E., Yu, Q.: *A 3–dimensional Lagrangian Solver for Disperse Multiphase Flows on Arbitrary, Geometrically Complex Flow Domains using Block–structured Numerical Grids,* 7th Int. Symposium on Gas-Particle Flows, ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, Vancouver, BC, Canada, June 22–26, 1997, CD–ROM Proceedings, FEDSM97–3590.

[2.24] Frank, Th. Wassen, E.: *Parallel Efficiency of PVM– and MPI–Implementations of two Algorithms for the Lagrangian Prediction of Disperse Multiphase Flows,* JSME Centennial Grand Congress 1997, ISAC '97 Conference on Advanced Computing on Multiphase Flow, Tokyo, Japan, July 18–19, 1997.

[2.25] Frank, Th. Wassen, E., Yu, Q.: *Ein blockstrukturiertes Verfahren zur Berechnung disperser Gas–Feststoff–Strömungen in komplexen 3–dimensionalen Geometrien,* VDI–Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen, GVC–Jahrestagung 1997, Prozeß– und Umwelttechnik, Dresden, 24.–26. September 1997. In Chemie–Ingenieur–Technik, Vol. 69, Nr. 9/97, pp. 1270–1271.

[2.26] Frank, Th. Wassen, E., Yu, Q.: *Lagrangian Prediction of Disperse Gas–Particle Flow in Cyclon Separators,* ICMF '98 – 3rd International Conference on Multiphase Flow 1998, Lyon, France, June 8.–12., 1998, CD–ROM Proceedings, Paper No. 217, pp. 1–8.

[2.27] Frank, Th. Wassen, E., Yu, Q.: *Numerische Untersuchung der Strähnenbildung und Erosion in 3–dimensionalen Gas–Feststoff–Strömungen,* 49. Berg– und Hüttenmännischer Tag, TU Bergakademie Freiberg, Germany, 18./19. Juni 1998, in: Freiberger Forschungshefte.

[2.28] Frank, Th. Wassen, E., Yu, Q.: *Numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern,* Arbeits- und Ergebnisbericht 1996 - 1997 - 1998, SFB 393, TU Chemnitz (1998)

[2.29] Frank, Th., Schulze, I.: *Numerical simulation of gas–droplet flow around a nozzle in a cylindrical chamber using Lagrangian model based on a multigrid Navier–Stokes solver,* Proc. Int. Symposium on Numerical Methods for Multiphase Flows, ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, Lake Tahoe, NV, USA, June 19–23, 1994, FED–Vol. 185, pp. 93–107.

[2.30] Schade, K.–P., Th. Frank, Th., Hädrich, Th., Petrak, D.: *An Experimental and Numerical Study of the Two Phase Flows in Sprays with Hollow Cone Nozzles and Full Cone Nozzles,* PARTEC'95 — International Congress for Particle Technology, 11th Europe an Conference of ILASS–Europe on Atomization and Sprays, 21.–23. March 1995, Nürnberg, Germany.

[2.31] Wassen, E., Frank, Th., Yu, Q.: *A Comparison of Parallel Algorithms for the Numerical Simulation of Multiphase Flows,* The 1. Euro–Conference on Parallel and Distributed Computing for Computational Mechanics. Lochinver, Scotland, April 26 – May 1st, 1997.

[2.32] Brandstätter, W., Landertshamer, F., Pachler, K.: *Recent Findings Regarding High Pressure Diesel Spray Simulations,* ILASS–Europe on Atomization and Sprays, 6.–8. July 1998, Manchester, England.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe Steigerung der Effizienz des Strömungslösers

Multiblock-Konzept

Mit dem Multiblock-Konzept entspricht das Programmsystem wesentlich besser den Anforderungen der Praxis als zuvor. Im Gegensatz zu einigen akademischen Testbeispielen ist bei realen Anwendungsaufgaben die Zahl der Blöcke im Ergebnis der Gittergenerierung relativ groß (häufig zwischen 100 und 200) und übersteigt die Anzahl der effektiv einsetzbaren Prozessoren (32 bis 64). Durch das implementierte heuristische Verfahren zur Lastbalancierung wurde in allen Fällen eine gute bis sehr gute Verteilung der Blöcke auf die Prozessoren erreicht, bei Anwendungsaufgaben ergeben sich für Strömungsberechnungen auf 32 Prozessoren parallele Effizienzen um 0.6. Die Einarbeitung weiterer Optimierungskriterien, z.B. durch den Versuch, benachbarte Blöcke nach Möglichkeit auf den gleichen Prozessor zu legen, ist denkbar, stößt durch die feste Vorgabe der Blöcke jedoch auf sehr enge Grenzen und wurde deshalb nicht untersucht.

Mehrgitterverfahren

Zuerst wurde das Mehrgitterverfahren zur Beschleunigung der Konvergenz der inneren Iteration für die Druckkorrektur implementiert. Im Ergebnis zeigte sich, daß dadurch nicht nur die innere Iteration wesentlich effizienter wurde, sondern daß gleichzeitig die für das ursprüngliche SIMPLE-Verfahren typische langsame und nichtmonotone Abnahme der Residuen für das Gesamtsystem in ein wesentlich schnelleres monotones Fallen der Residuen überging. Für die Berechnung einer statistisch stationären turbulenten Strömung in einem graden Kanal mit quadratischem Querschnitt konnte so bei 64*64*256=1 048 576 finiten Volumen die Rechenzeit auf 8 Prozessoren auf reichlich 6% verringert werden (vgl. Abb. 2.2).

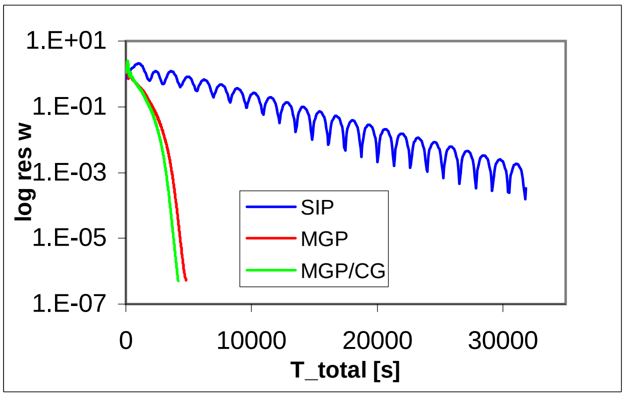


Abbildung 2.2: Konvergenz des SIMPLE-Verfahrens mit unterschiedlichen Lösungsverfahren für die Druckkoreekturgleichung; SIP – SIP-Verfahren, MGP – Mehrgitterverfahren, MGP/CG – MGP-Verfahren mit vorkonditionierter CG-Iteration auf dem gröbsten Gitter

Mit der Anwendung des Mehrgitterverfahrens auf die äußere Iteration und damit auf das Gesamtsystem der zu lösenden Gleichungen wurde eine weitere Beschleunigung der Konvergenz ereicht. Bei der zuvor angeführten Testaufgabe ergab sich eine nochmalige Verringerung der Rechenzeit auf ein Viertel des Wertes für das verbesserte SIMPLE-Verfahren (s. Abb. 2.3). Neben dem Mehrgitterverfrahren wurde auch das Full-Multigrid-Verfahren erfolgreich getestet, darüber hinaus besteht die Möglichkeit, Testrechnungen auf den im Mehrgitterverfahren verwendeten gröberen Gittern auszuführen.

Durch eine Reihe von Testrechnungen wurden die Eigenschaften des Mehrgitterverfahrens untersucht. So konnte gezeigt werden, daß die Zahl der Iterationen für eine vorgegebene Genauigkeit unabhängig von der Feinheit des Gitters ist und mit der Anzahl der Blöcke nur geringfügig steigt. Ein Vergleich der parallelen Effizienz zwischen einer CRAY-T3E (TU Dresden) und dem Chemnitzer Linux-Cluster CLIC (TU Chemnitz) fällt wegen des schnelleren Kommunikations-Netzwerks eindeutig zugunsten der CRAY aus. Auf dem CLIC mit FastEthernet werden gute parallele Effizienzen erreicht (0.5 bis 0.8), solange die Anzahl der finiten Volumen je Prozessor bei 50000 und darüber liegt. Eine ausführlichere Darstellung der ausgeführten Tests mit weiteren Grafiken und Tabellen ist in ([3.8]) veröffentlicht.

Neben der ober angeführten einfachen Kanalströmung wurden Strömungen in ei-

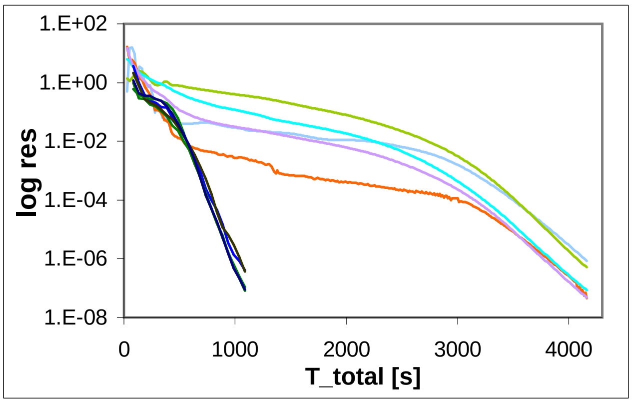


Abbildung 2.3: Konvergenz des Eingitterverfahrens (graue Kurven) und des Mehrgitterverfahrens (scharz), beide mit innerem Mehrgitterverfahren für den Druck, Residuen für u, w, Masse, k, ϵ

nem gekrümmten Kanal, in mehrfach abgewinkelten Kanälen, in Rohrverzweigungen und in Zyklonen bei Verwendung von bis zu 3 174 400 finiten Volumen auf maximal 128 Prozessoren berechnet. In allen Fällen erbrachte die Mehrgittertechnik eine signifikante Verringerung der Rechenzeiten gegenüber dem ursprünglichen Verfahren.

2.4.2 Teilaufgabe Parallele Partikelberechnung

Die Implementierung der in Abschnitt 2.3.2 und 2.3.2 beschriebenen Parallelisierungsverfahren für das Euler–Lagrange–Verfahren basieren auf explizitem Message Passing und einer auf Standard–MPI basierenden eigenen Kommunikationsschnittstelle. Im Ergebnis entstand ein Programmsystem, das mit sehr geringem Anpassungsaufwand auf die unterschiedlichsten Parallelrechenrsysteme portiert werden kann, wie dies im zurückliegenden Zeitraum mit Cray–T3D/T3E, SGI Origin 2000, Parsytec–GC und verschiedenen Cluster–Systemen mit den unterschiedlichsten Kommunikationsnetzwerken (SCI, Myrinet, GigaNet, FastEthernet) vorgenommen wurde.

Für die Bewertung der parallelen Effizienz der SDD– und DDD–Verfahren wurde zum einen die Cray–T3E der TU Dresden (64 DEC Alpha 21164 Prozessoren, 128 Mb Knotenspeicher, 3d–Torus–Verbindungsnetzwerk) verwendet. Demgegenüber standen zunächst ein lokal verfügbares Athlon–Prozessor–Cluster mit maximal 12 Prozessoren (512 Mb Knotenspeicher, FastEthernet–Netzwerk). Die Untersuchungen für größere Knotenanzahlen wurden letztendlich auf dem Chemnitzer Linux–Cluster (CLIC) mit bis zu 128 Prozessoren durchgeführt.

Für die vergleichenden Untersuchungen wurden zwei Testfälle definiert, bei denen es sich um eine Gas–Partikel–Strömung in einem dreifach gekrümmten Kanal mit quadratischem Querschnitt handelt. Im Testfall 1 sind die Kanalkrümmer mit jeweils 4 Krümmerschaufeln ausgestattet, die eine Entmischung beider Phasen weitgehend verhindern, so daß eine hinsichtlich der Partikelkonzentrationsverteilung weitgehend homogene Strömung die Folge ist. Im 2. Testfall sind die Krümmerschaufeln nicht vorhanden. Die Folge sind Sekundärströmungen nach jedem der drei Kanalkrümmer, die eine starke Entmischung der Partikelphase bewirken. Im Vergleich dieser beiden Testfälle ist die dynamische Lastbalancierung des DDD–Verfahrens gut zu beurteilen. Das ursprünglich aus 21 respektive 9 Gitterblöcken bestehende Gitternetz mit $80 \times 80 \times 496 = 3\,174\,400$ Gitterzellen wurde für die Untersuchungen einheitlich in 64 Gitterblöcke unterteilt, die je nach verwendeter Parallelrechner–Partition auf die Prozessoren des MIMD–Systems verteilt wurden. Für jede der Berechnungen wurden 5000 Partikeltrajektorien mit einer homogenen Partikelkonzentrationsverteilung im Einströmgebiet berechnet.

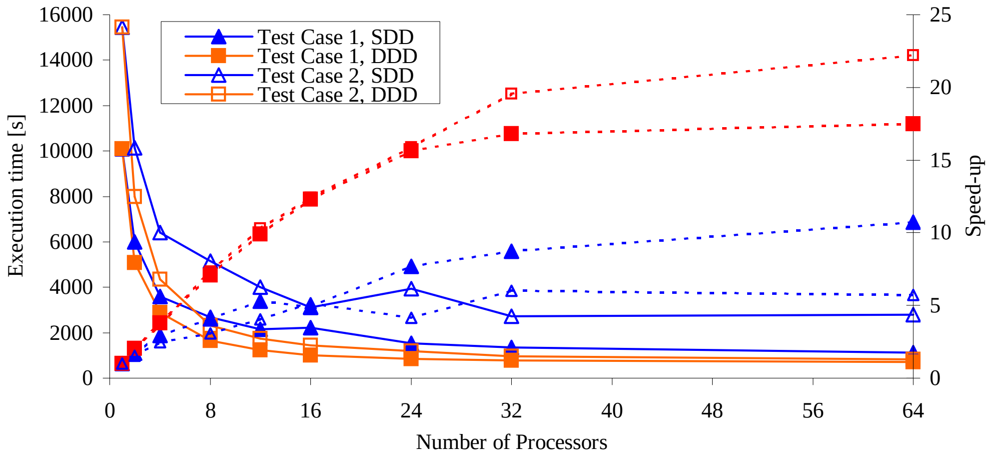


Abbildung 2.4: Ausführungszeit und Speed–up in Abhängigkeit von der Anzahl der Prozessoren; Vergleich der Effizienz der beiden Parallelisierungsverfahren für beide Testfälle.

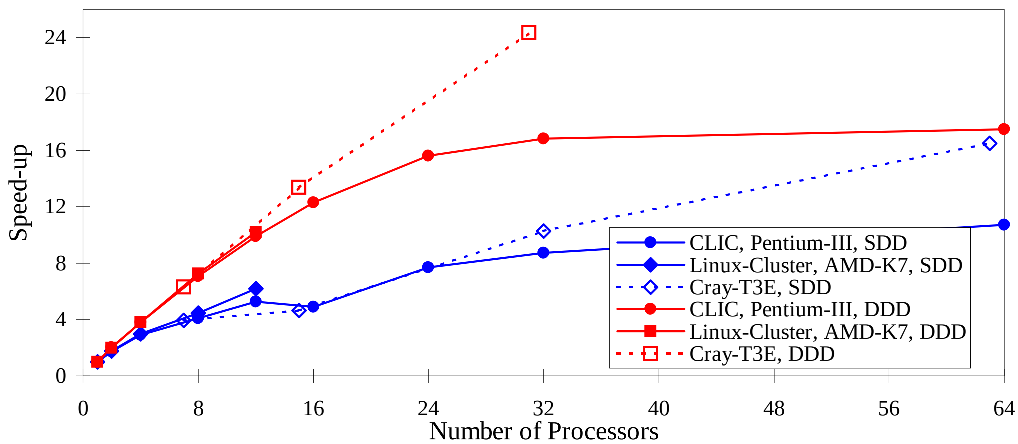


Abbildung 2.5: Vergleich der Parallelisierungsverfahren auf dem Chemnitzer Linux–Cluster (CLIC)und der Cray–T3E der TUD; Speed–up für den Testfall 1.

Abb. 2.4 zeigt die absoluten Ausführungszeiten und die daraus resultierenden Speed–up Ergebnisse für Berechnungen beider Testfälle mit den SDD– und DDD–Verfahren auf einer variierenden Anzahl von Prozessoren. Abb. 2.4 zeigt die deutliche Reduzierung der absoluten Berechnungszeiten, die zunächst mit beiden Parallelisierungsverfahren erreicht werden kann. Aus den Daten für den resultierenden

Speed–up der Berechnugnen wird jedoch der klare Vorteil des DDD–Verfahrens gegenüber dem SDD–Verfahren deutlich. Des weiteren geht aus den beiden Kurven für das DDD–Verfahren hervor, daß die Berechnungen mit diesem Verfahren für beide Testfälle annähernd dieselbe absolute Ausführungszeit benötigten, d.h. die Berechnung ist tatsächlich annähernd unabhängig von der Art der Fluid–Partikel–Strömung. Hier weisen die Ergebnisse für das SDD–Verfahren einen deutlichen Unterschied auf.

Abb. 2.5 zeigt die Ergebnisse des direkten Vergleichs zwischen den 3 verschiedenen verwendeten Parallelrechnersystemen für die Berechnungen des 1. Testfalls. Während aus verständlichen Gründen die Ergebnisse für den CLIC und das Athlon–basierende Workstation–Cluster annähernd übereinstimen, ist der Einfluß des Hochgeschwindigkeits–Kommunikationsnetzwerkes der Cray–T3E deutlich zu sehen. So ist ein annähernd linearer Anstieg des Speed–up's für die Testfall–rechnungen auf der Cray bis zu den maximal verwendeten 32 Prozessoren zu beobachten. Auf den Workstation–Clustern mit FastEthernet–Kommunikationsnetzwerk wurden absolut geringere Speed–up–Werte erzielt. Darüber hinaus ist für den Testfall der weitgehend homogenen Fluid–Partikel–Strömung der Übergang in die Stagnation (Sättigung) für Prozessorzahlen größer 32 zu beobachten (Hierbei muß angemerkt werden, daß für die vorliegenden Daten wegen Problemen in der Hardware–Bereitstellung zunächst noch das sogenannte Service–Netzwerk für die Knoten–Kommunikation verwendet werden mußte. Auch der Einsatz von Kanalbündelung der beiden am CLIC vorhandenen FastEthernet–Netzwerke z.B. mittels der SCORE–Libraries kann zu einer weiteren positiven Veränderung dieser Ergebnisse noch beitragen.)

Weitere und detailliertere Untersuchungen, die die Eignung der entwickelten SDD– und DDD–Verfahren für die Berechnung disperser Mehrphasenströmungen auf MIMD– und speziell auf Workstation–Cluster–Systemen dokumentieren, finden sich in den Veröffentlichungen der Forschungsgruppe Mehrphasenströmungen [3.6, 3.8, 3.5, 3.14, 3.15, 3.3].

2.4.3 Teilaufgabe Instationäre Mehrphasenströmungen

Der instationäre Löser wurde implementiert und an einem Rechnungs–Messungsvergleich, der auf einem Laborexperiment [2.3] beruht, erprobt. Des Weiteren ist die Berechnung eines DFG–Benchmarks in Vorbereitung, der ein laminares Vortexshading hinter einem Zylinder zeigt[2.5]. Als Vergleichsgrößen werden die gemittelte Strouhal–Zahl, Lift- und Dragkoeffizient verwendet. Außerdem wurden Profile der gemittelten Fluidgeschwindigkeiten mit LDA vermessen [2.4].

Das Experiment von Fohanno besteht aus einem vertikalen, sich nach unten verengenden, Glaskanal, der mit 3mm Glaskugeln von oben nach unten durchströmt wird. Die Kanaleinschnürung verursacht starke Wand–Partikelinteraktion, die wiederum intensive Partikel–Partikelkollision bewirkt. Die Streichlinien der Partikel werden in einem Lichtschnitt photographisch ermittelt und mit einer nachfolgenden Bildverarbeitung ausgewertet.

Die Ergebnisse der Validierung anhand des Laborexperiments wurden in [3.6] und [3.12] diskutiert. Abbildung 2.6 zeigt die mittleren Partikelgeschwindigkeiten bzw.

deren RMS Werte in einer Schnittebene des vertikalen, konvergenten Kanals. Die mittleren Geschwindigkeiten stimmen recht gut überein, während es bei den RMS–Werten Abweichungen in den absoluten Werten gibt. Die Übereinstimmung der Trends der RMS–Werte sind jedoch ausreichend. Die Abweichungen können aus Unterschieden bei der Berechnung der Partikel–Wandkollisionen kommen, die wiederum in Abweichungen von der idealen Kugelform der Glaspartikeln im Experiment zu suchen wären. Um eine ausreichend große Anzahl von Rechenpartikeln für die Mittelungsprozesse zur Verfügung zu haben wurden bis zu 100 000 Partikel simultan berechnet. Skalierungstests haben gezeigt, daß erst bei etwa 700 000 Partikel der Speicher der zehn Athlon Prozessoren mit 512 MB RAM voll ausgeschöpft wird. Die Simulation wurde nach dem DDD–Verfahren (siehe 2.4.2) auf zehn AMD 600 MHz und Fast–Ethernet–Netzwerk (100Mbit/s) unter Berücksichtigung von Phasenkoppelung, Wand- und Partikel–Partikelkollision durchgeführt.

Es zeigt sich, daß die Recheneffizienz im instationären Modus recht unterschiedlich zum stationären Modus ist. Die Kriterien, die die parallele Effiziens im Wesentlichen beeinflussen sind die Netzwerkbandbreite und der Rechenaufwand pro Partikel. Im aktuellen Fall — kalte Strömung kein Phasen- oder Wärmeübergang, sehr geringe Relativgeschwindigkeit zwischen Gas und Partikeln (Stokes–Zahl$\gg 1$) — ist der Rechenaufwand ein Minimum und damit für die Effizienz der ungünstigste Fall. Es wurde für das DDD–Verfahren eine parallele Effizienz von 10% erreicht, was sich bei großen Relativgeschwindigkeiten und kleiner Stokes–Zahl auf 60-70% erhöhte. Die Lastaufteilung ist ab einer Mindestlast von 2500 Partikeln bei minimaler Rechenlast pro Partikel als optimal zu bezeichnen.

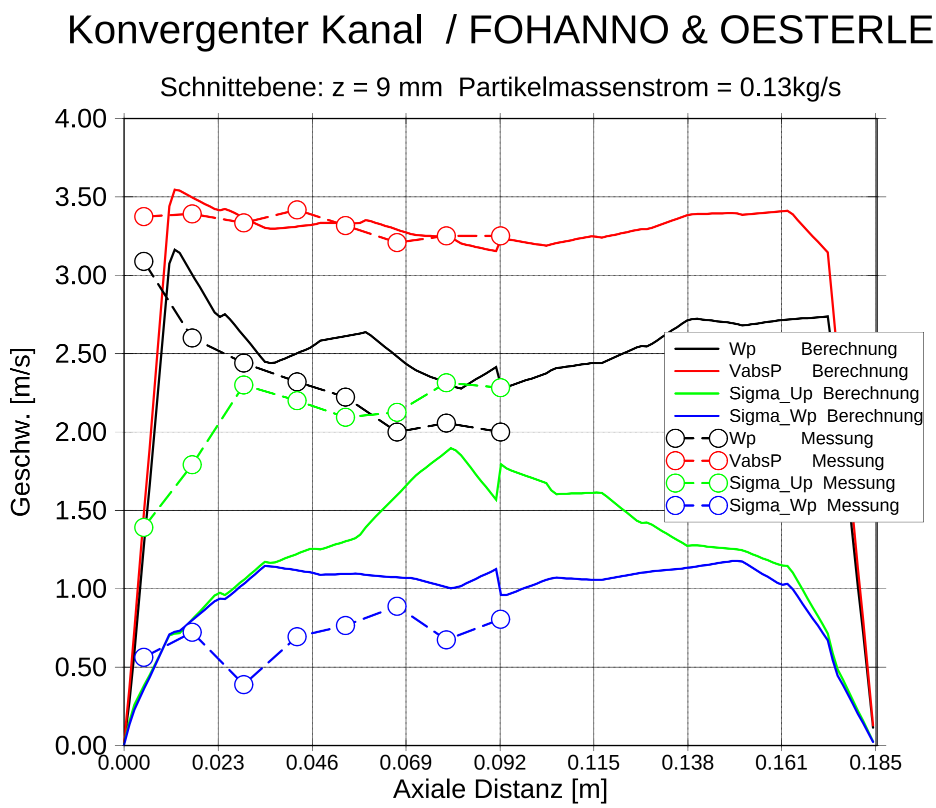


Abbildung 2.6: Vergleich Rechnung Messung mit dem instationären Löser.

Literaturverzeichnis

[Dissertationen]

[3.1] E. Wassen: *Entwicklung paralleler Algorithmen zur numerischen Simulation von Gas-Partikel-Strömungen unter Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen*, Diss., TU Chemnitz, 1998.

[Begutachtete Publikationen]

[3.2] Frank, Th., Bernert, K., Schneider, J.: *Numerische Untersuchungen der Gas–Partikel–Strömung in symmetrischen Doppelzyklon–Abscheidern*, VDI Berichte, Nr. 1511, 1999.

[3.3] Wassen E., Frank Th.: *Simulation of cluster formation in gas-solid flow induced by particle-particle collisions, Chemnitz University of Technology*, Chemnitz, Germany, March 1999, pp. 1-20. Published in International Journal of Multiphase Flow (March 2001) Volume 27, Issue 3, pages 437-458.

[3.4] Frank, Th., Schneider, J., Yu, Q. Wassen, E.: *Experimental and Numerical Investigation of Particle Separation in a Symmetrical Double Cyclone Separator*, 8th Int. Symposium on Gas–Particle Flows, ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, San Francisco, CA, U.S.A., July 18–22, 1999, CD–ROM Proceedings, Paper No. FEDSM99–7865, pp. 1–10.

[3.4] Frank Th., Schneider J., Bernert K.: *Numerische Untersuchung der Gas–Partikel–Strömung in symmetrischen Doppelzyklonabscheidern.* VDI–Gesellschaft Energietechnik und VDI–Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen, VDI–Forum "Zyklonabscheider in der Energie– und Verfahrenstechnik", 27./28. Oktober 1999, Leverkusen, Germany.

[3.5] Frank Th.: *Application of Eulerian–Lagrangian Prediction of Gas–Particle Flows to Cyclone Separators*, VKI, Von Karman Institute for Fluid Dynamics, Lecture Series Programme 1999–2000, "Theoretical and Experimental Modeling of Particulate Flow", Bruessels, Belgium, 03.–07. April 2000.

[3.6] Pachler K., Bernert K., Frank Th., Schneider H.: *Simulation von Mehrphasenströmungen auf Parallelrechnern und deren Anwendung in der Verfahrenstechnik*, CHC-2000, 2. Chemnitz / Hamburger Colloqium, Auslegung und Modellierung energetischer Anlagen und Systeme, Technische Universität Hamburg-Harburg, Deutschland, 16./17. November 2000.

[3.7] Frank, Th., Bernert, K., Schneider, H., Pachler, K.: *Efficient Parallelization of Eulerian–Lagrangian Approach for Disperse Multiphase Flow Calculation on MIMD Computer Architectures,* IEEE International Conference on Cluster Computing — CLUSTER 2000, November 28.–December 2., 2000, Chemnitz, Germany.

[3.8] Bernert, K., Frank, Th., Schneider, H., Pachler, K.: *Multi–Grid Acceleration of a SIMPLE-Based CFD-Code and Aspects of Parallelization*, IEEE International Conference on Cluster Computing – CLUSTER 2000, November 28.–December 2., 2000, Chemnitz, Germany.

[Sonstige Publikationen]

[3.9] Frank Th.: *Simulation von Strömungen in der Verfahrenstechnik auf Clustercomputern*, Kolloqium anläßlich der Einweihung des Chemnitzer Linux-Clusters (CLIC) TU Chemnitz, Germany, 11. Oktober 2000.

[3.10] Frank Th., Wassen E., Bernert K., Yu Q.: *Numerische Berechnung der Partikelbewegung und -abscheidung in Zyklonen*, Internationales Innovationsseminar 2000 zu Magdeburg INNSA - Innovation Relay Centre, tti Magdeburg Berechnung Verfahrenstechnischer Prozesse / Computational Process Engineering Magdeburg, 26.-27. Oktober 2000.

[3.11] Meyer A., Frank Th.: *Parallel Computing in Chemnitz und das Beispiel einer Anwendung bei Mehrphasenströmungen*, WIR - Sachsen, 1. Kolloquium Wissenschaftliches Rechnen in Sachsen ZHR der TU Dresden, 4. Dezember 2000.

[3.12] Pachler K., Bernert K., Frank Th.: *Simulation einer instationären Gas–Partikel–Strömung unter Berücksichtigung von Kollision, Wandstoß und Phasenswechselwirkung*, Sitzung der GVC–Fachausschüsse "Mehrphasenströmungen" und "Mischvorgänge", 1.–2. März 2001, Wernigerode, Germany.

[3.13] Schneider H., Frank Th., Schade K.-P., Bernert K., Hädrich Th., Erdmann H.-J.: *Numerical and Experimental Study of the Gas-Particle Flow in Pipework and Flow Splitting Devices of Coal-Fired Power Plant*, PARTEC 2001 - International Congress for Particle Technology Session 12, Multiphase Flow/CFD, Nürnberg, Germany, 27-29 March 2001.

[**Eingereichte Publickationen**]

[3.14] Bernert, K., Frank, Th., Schneider, H., Pachler, K.: *Numerical Simulation of Disperse Multiphase Flows with an Application in Power Engineering*, 3rd International Symposium on Computational Technologies for Fluid/Thermal/Chemical Systems with Industrial Applications, July 22-26, 2001, Atlanta, Georgia, USA; to appear in ASME Conference Proceedings.

[3.15] Frank Th., Bernert K., Pachler K., Schneider H.: *Aspects of Efficient Parallelization of Disperse Gas-Particle Flow Predictions using Eulerian-Lagrangian Approach*, ICMF 2001 - 4th International Conference on Multiphase Flow, Paper No. 311, pp. 1-13, New Orleans, Louisiana, U.S.A., May 27 - June 1, 2001.

[3.16] Schade K.-P., Schneider H., Frank Th., Erdmann H.-J., Hädrich Th., Bernert K.: *Experimental and Numerical Investigation of Particle Erosion Caused by Pulverized Fuel in Channels and Pipework of Coal-Fired Power Plant*, ICMF 2001 - 4th International Conference on Multiphase Flow, Paper No. 325, pp. 1-12, New Orleans, Louisiana, U.S.A., May 27 - June 1, 2001.

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Im Berichtszeitraum sind im Teilprojekt D2 eine Reihe substantieller Fortschritte für die parallele numerische Simulation disperser Mehrphasenströmungen erzielt worden. Im Ergebnis können mit dem erarbeiteten Euler–Lagrange–Verfahren sowohl stationäre als auch instationäre Aufgabenstellungen aus der Praxis mit guter paralleler Effizienz auf Rechnerplattformen mit MIMD-Architektur bearbeitet werden. Mit den erreichten Fortschritten in der Bearbeitung des Forschungsvorhabens ergeben sich die nachfolgenden Fragestellungen für weitergehende Untersuchungen.

1. Ein erster Schwerpunkt der geplanten Arbeit ist die Zusammenführung der bisher überwiegend getrennt behandelten Algorithmen zur Berechnung der kontinuierlichen und der dispersen Phase. Ziel ist eine enge iterative Kopplung der beiden Verfahren einschließlich der erforderlichen Konvergenzkontrolle, um eine effiziente Berechnung komplexer stationärer Strömungsvorgänge disperser Mehrphasenströmungen mit starken Phasenwechselwirkungen (2–Wege–Kopplung auf Grund von Masse-, Impuls- und Wärmeübertragung zwischen den beteiligten Phasen) untersuchen zu können.

2. Eine notwendige Voraussetzung hierfür sind Verbesserungen des für die Berechnung der kontinuierlichen Phase implementierten Mehrgitterverfahrens bezüglich seiner Robustheit und der Kontrolle der Steuerparameter, um die Konvergenz des Verfahrens bei Berücksichtigung der stark schwankenden Phasenwechselwirkungsterme zu gewährleisten.

3. Einen weiteren Schwerpunkt bildet die Fortführung der begonnenen Arbeiten zur Berechnung instationärer Mehrphasenströmungen auf Parallelrechnern. Hier sind weitere Entwicklungen bezüglich der Phasenwechselwirkungen (Turbulenz, Masse–, Impuls– und Wärmeübertragung) und der Übergang zu einem Diskretisierungsschema mit 2. Genauigkeitsordnung in der Zeit notwendig.

4. Begleitende aber dennoch außerordentlich notwendige Arbeiten betreffen die weitere Optimierung der eingesetzten Parallelisierungstechniken und die Beseitigung serieller „Flaschenhälse“ in den Pre- und Postprozessorschritten.

   Ein absehbarer Effektivitätsgewin liegt u.a. in der Beschleunigung der für sehr große Partikelkollektive und für instationäre Simulationen sehr zeitintensiven initialen Partikellokalisierung auf großen blocktrukturierten Gitternetzen. Weitere Verbesserungen sind in der Handhabung der für die Lösung von Aufgabenstellungen aus der Praxis notwendigen sehr großen Datenmengen erforderlich. Das betrifft insbesondere die Simulation von hochtransienten Vorgängen (Datenaustausch zwischen den Teilen des Lösungsverfahrens, Auswertung) sowie generell die Daten–Ein- und -Ausgabe. Hier ist eine Parallelisierung erforderlich, weil die für die Ein- und Ausgabe benötigte Zeit für große Problemstellungen einen nicht mehr zu vernachlässigenden Teil der Nutzungsdauer eines MIMD–Rechnersystems einnimmt.

5. Ein letzter Schwerpunkt liegt in der Behandlung einer Reihe von komplexen und realitätsnahen Problemstellungen mit dem Ziel, die Eignung und Robustheit der eingesetzten Lösungsverfahren nachzuweisen und Rückschlüsse auf notwendige Weiterentwicklungen der Parallelrechnerarchitekturen, Kommunikationsstrukturen und Solvertechniken zu ermöglichen. In diesem Zusammenhang sollen in Zusammenarbeit mit Prof. Rehm (B9) auf Cluster–Architekturen mit Hochgeschwindigkeits–Kommunikationsnetzwerken unterschiedlicher Art und Struktur typische Anwendungsfälle bezüglich ihres Kommunikationsverhaltens vergleichend untersucht werden.

Teilprojekt D3

2.1 Teilprojekt D3

Effiziente numerische Algorithmen zur Simulation komplexer strömungsmechanischer Aufgaben auf MIMD–Parallelrechnern

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Arnd Meyer
Technische Universität Chemnitz
Fakultät für Mathematik
Professur Numerische Analysis

2.1.2 Projektbearbeiter

Dr.-Ing. Stefan Meinel
Technische Universität Chemnitz
Fakultät für Mathematik
Lehrstuhl für Numerische Analysis

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Die grundlegende Zielstellung des Projektes ([Mey98b]) bestand im weiteren Ausbau der in (parallelen) Experimentalprogrammen (CF3D, CF2D) implementierten Algorithmen zur Simulation gekoppelter Strömungs- und Transportvorgänge.
Aufbauend auf den Ergebnissen der vorangegangenen Projektphase ([Mey98a]) sollte sich die Untersuchungen und Entwicklungen auf folgende Schwerpunkte konzentrieren:

- Übertragung adaptiver Verfahren auf die Algorithmen zur Strömungssimulation. Ausgangspunkt hierfür sollten die in Entwicklung befindlichen adaptiven Verfahren aus dem Teilprojekt A3 für elliptische Modellgleichungen sein.
- Entwicklung eines Programmzweiges zur Simulation von turbulenten Strömungen, modelliert mit dem $k - \varepsilon$ - Modell.
- Exemplarische Behandlung von komplexen 3D-Testbeispielen mit dem Ziel, die Genauigkeit, Effizienz und Robustheit der eingesetzten Verfahren nachzuweisen und Rückschlüsse auf notwendige Weiterentwicklungen der Algorithmen, der Gleichungslöser und der Kommunikationsschnittstelle zu ermöglichen.

Die vorgesehenen Aufgabenstellungen wurden im Berichtszeitraum nur in erheblich eingeschränktem Umfang bearbeitet.
Im Bewilligungsschreiben der DFG vom 2.12.1998 wurde eine Neuausrichtung der

Forschungsarbeiten angeregt, die auf die Kopplung der vorher in den Projekten D1 (Festkörperdeformation) und D3 bearbeiteten Fragestellungen abzielte. Um eine gewisse Abgrenzung und Spezifizierung dieser äußerst vielschichtigen Problematik vorzunehmen, waren umfangreiche Recherchen vorliegender Arbeiten aus der Literatur und der Kontakt mit anderen Forschungsgruppen und Anwendern erforderlich. Die angestellten Überlegungen und Voruntersuchungen mündeten in eine Projektskizze, die der DFG am 4.10.1999 zugeleitet wurde. Die in der Skizze vorgeschlagene Modifizierung des Arbeitsplanes wurde von den Gutachtern jedoch nicht bestätigt, es erfolgte keine Freigabe der Fördermittel für die Jahre 2000/2001 und die Bearbeitung des Projektaufgaben konnte daher nach dem 31.12.1999 nicht weitergeführt werden.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

Die Arbeiten des Jahres 1999 konzentrierten sich auf folgende Fragen:

- Weiterführende Untersuchungen und Zusammenfassung der Ergebnisse zur Problematik der Strömungssimulation für dichteveränderliche Medien ([Mei00]).
- Recherche zur Thematik „Kopplung Fluidströmung - Festkörperdeformation“ und Ausarbeitung einer Projektskizze ([Mey99])
- Weiterentwicklung und Testung des 3D-Experimentalsystemes anhand des DFG - Strömungsbenchmarks und anderer Testobjekte

Die Untersuchung von Strömungen mit veränderlicher Dichte, jedoch niedriger Machzahl, bildete einen unverzichtbaren Baustein auf dem Wege der Erarbeitung eines Simulationssystems für gekoppelte Strömungs- und Transportprozesse. Wichtige Anwendungsproblemklassen, insbesondere die Simulation von Verbrennungsvorgängen, erscheinen ohne diese Modellerweiterung nicht behandelbar.
Die Tatsache, dass zwischen den traditionell deutlich getrennten Verfahrensklassen der kompressiblen und der inkompressiblen Strömungen der Berechnung von Strömungen mit niedriger Machzahl eine besondere, bisher weitgehend unterschätzte Bedeutung zukommt, wurde etwa zeitgleich auch von anderen Forschungsgruppen wahrgenommen (siehe [BR98], [GKMR96], [LG96], [Hori92]).
Die vorgesehene Erweiterung des von uns bevorzugten Druckiterationsverfahrens zur Entkopplung des instationären Strömungsproblems auf Vorgänge mit Dichteänderlichkeit, die 1996/97 als Teilaufgabe in Angriff genommen wurde, erwies sich als deutlich problematischer als zunächst angenommen. Die Ursache hierfür liegt in einer numerischen Instabilität, die durch die notwendige Berücksichtigung der Zeitableitung der Dichte in das Projektionsverfahren eingeschleppt wird und deren theoretische Aufklärung nach unserer Kenntnis erstmals in [VTM99] gelungen ist.

Die von den DFG-Gutachtern nachdrücklich angeregte Hinwendung zu Problemen der Fluid-Festkörper-Kopplung erforderte eine intensive Literaturrecherche zu diesem von uns bisher nicht bearbeiteten Problemkreis. Mit Forschungsgruppen aus

den Sonderforschungsbereichen 379 und 404 konnten Interessenten und Gesprächspartner für diese anspruchsvolle Aufgabe gefunden werden.
Für die auf der Seite der Strömungsmechanik kurz- und mittelfristig zu lösenden Aufgaben wurde ein relativ detaillierter Arbeitsplan erstellt. Kernpunkt hierbei war die Umsetzung des ALE(arbitrary-Lagrange-Euler)-Konzeptes in dem bestehenden Algorithmus. Vorarbeiten hierfür sind bereits erfolgt und flossen u.a. in die Simulation mikromechanischer Strömungen mit bewegten Wänden (siehe z.B. [DSMMDKB98]) ein.
Eine Schlüsselstellung in den vorgesehenen Forschungsarbeiten nahmen auch Überlegungen zum Kopplungsverhalten der Feldprobleme für das Fluid und für die Festkörperdeformation ein. Die Frage der Konvergenz der Iteration der gekoppelten Rechnung stellt sich vor allem bei bestimmten kritischen Konstellationen von Fluidviskosität und Festkörpersteifigkeit. Neben weiteren interessanten Ansätzen aus der Fachliteratur (siehe z.B. [SAW97]) verdient hierbei, aus unserer Sicht, vor allem die im SFB 404 entwickelte Methodik unter Verwendung eines globalen Gradientenverfahrens ([WMR99]) Beachtung. Eine genauere Ausgestaltung und Bewertung dieser Fragestellungen könnte jedoch erst in einem fortgeschritteneren Stadium der Forschungsarbeit vorgenommen werden.

Im Jahre 1999 sollte die Implementierung und Testung des 3D-Programmmodules planmäßig zu einem vorläufigen Abschluss gebracht werden. Diese Arbeiten wurden wesentlich beeinträchtigt durch die unzureichenden Hardwareressourcen des verfügbaren Parallelrechners (Parsytec GC PowerPlus) und dessen Totalausfall ab August 1999. Es erfolgte die Umsetzung der Programmpakete auf linuxbasierte Systeme, wodurch auch die Betrachtung von Testbeispielen von realitätsbezogener Größe möglich wurde.

Literaturverzeichnis

[BR98] M. Braak, R. Rannacher
Adaptive finite element methods for low-Mach-number flows with chemical reactions
Lecture Series 1999-03, v. Karman Institute, 1999.

[DSMMDKB98] R. Dudek, A. Schubert, S. Meinel, B. Michel, L. Dorfmüller, P.M. Knoll, J. Baumbach
Flow characterization and thermo-mechanical response of anisotropic conductive films
Proc. Third Int. Conf. on Adhesives in Electronics, Binghamton, NY, Sept. 28-30, p. 68-75, 1998.

[GKMR96] K.J. Geratz, R. Klein, C.D. Munz, S. Roller
Multiple Pressure Variable (MPV) approach for low Mach number flows based on asymptotic analysis
Notes on Numerical Fluid Mechanics, Vol. 52, Vieweg 1996.

[LG96] C.H. Li, R. Glowinski
Modelling and numerical simulation of Low-Mach-number compressible flows
Int J. Num. Meths. in Fluids, 23:77–103, 1996.

[Hori92] Y. Horibata
Numerical solution of a Low-Mach-number flow with a large temperatur variation
Computers Fluids, Vol.21, No.2: 185–200, 1992

[Mey98a] A. Meyer
Effiziente numerische Algorithmen zur Simulation komplexer strömungsmechanischer Aufgaben auf MIMD–Parallelrechnern.
Zwischenbericht zum Teilprojekt D3, Zeitraum 1996 – 1998, DFG-Sonderforschungsbereich 393 TU Chemnitz, 1998.

[Mey98b] A. Meyer
Effiziente numerische Algorithmen zur Simulation komplexer strömungsmechanischer Aufgaben auf MIMD–Parallelrechnern.
Finanzierungsantrag zum Teilprojekt D3, Zeitraum 1999 – 2000, DFG-Sonderforschungsbereich 393 TU Chemnitz, 1998.

[Mey99] A. Meyer
Projektskizze zum Teilprojekt D3, DFG-Sonderforschungsbereich 393 TU Chemnitz, 4.10.1999.

[Mei00] S. Meinel
Untersuchungen zu Druckiterationsverfahren für dichteveränderliche Strömungen mit niedriger Machzahl
Preprint SFB 00-16, März 2000

[ST96] M. Schäfer, S. Turek
Benchmark Computation of Laminar Flow Around a Cylinder
Preprint 96-03 des SFB 359, Universität Heidelberg 1996.

[SAW97] S.D. Senturia, N. Aluru, J. White
Simulating the Behavior of MEMS devices: Computational method and needs
IEEE Comp. Sci. & Engng., 30-42, 1997.

[VTM99] B. Van‘t Hof, J.H.M. Ten Thije Boonkkamp, R.M.M. Matthej
Pressure Correction for laminar combustion
Combust. Sci. and Tech., Vol. 149, 201–223, 1999.

[WMR99] W.A. Wall, D.P. Mok, E. Ramm
Partitioned analysis approach for the transient, coupled response of viscous fluids and flexible structures
In: ECCM‘99 - Proc. European Conf. on Comp. Mech., Munich, 1999.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe Strömungen mit niedriger Machzahl

Die Ergebnisse sind in [Mei00] ausführlich dargestellt und algorithmisch im 2D-Programmsystem CF2D implementiert. Eine Animation der schwerkraftgetriebenen Durchmischung zweier Gase mit stark unterschiedlichen Dichten kann im Internet unter [MP99] abgerufen werden.

2.4.2 Teilaufgabe Kopplung Fluid-Festkörper

siehe Projektskizze [Mey99]

2.4.3 Teilaufgabe Testung CF3D

Es wurde ein Anzahl von Testbeispielen untersucht, um in erster Linie bestehende Fehler und Defizite im Programmpaket zu lokalisieren und zu beheben. Zur Validierung wurde u.a. der DFG-Strömungsbenchmark ([ST96]) herangezogen, wobei FEM-Netze von ca. 300000, 2.3 Mill. und 24 Mill. Knotenpunkten zum Einsatz gelangten. Die Anstömungs-Reynoldszahl wurde auf einen Wert von $Re = 200$ eingestellt, um deutlich instationäre Strömungsverhältnisse zu bewirken. Auf der Basis der außerordentlich feinen Diskretisierung, konnten interessante und hochkomplexe Details der Strömung sichtbar gemacht werden. Eine vollständige Periodizität der Wirbelbewegung wurde auch nach einer Simulationszeit von ca. 25 s nicht festgestellt (siehe auch [MP99]). Die vorliegenden Ergebnisse dieser Untersuchungen, die auf einem CLIC-Teilcluster mit 128 Pentium-III-Prozessoren erzielt wurden, konnten bei der Inbetriebnahme des Chemnitzer LINUX-Clusters ([Mei00a]) gezeigt werden.

Literaturverzeichnis

[DSMMDKB98] R. Dudek, A. Schubert, S. Meinel, B. Michel, L. Dorfmüller, P.M. Knoll, J. Baumbach
Flow characterization and thermo-mechanical response of anisotropic conductive films
Proc. Third Int. Conf. on Adhesives in Electronics, Binghamton, NY, Sept. 28-30, p. 68-75, 1998.

[Mey99] A. Meyer
Projektskizze zum Teilprojekt D3, DFG-Sonderforschungsbereich 393 TU Chemnitz, 4.10.1999.

[MP99] S. Meinel, M. Pester
Examples for animated solutions of flow simulations.
`http://www.tu-chemnitz.de/~pester/exmpls.html`

[Mei98] S. Meinel
Untersuchungen zur Strömungssimulation auf dem Parallelrechner
Chemnitzer FEM-Symposium, TU Chemnitz, 7.9-9.9.1998.

[Mei99] S. Meinel
Untersuchungen zur Strömungssimulation im Teilprojekt D3
Seminar des SFB 393, TU Chemnitz, Januar 1999.

[Mei00] S. Meinel
Untersuchungen zu Druckiterationsverfahren für dichteveränderliche Strömungen mit niedriger Machzahl
Preprint SFB 00-16, März 2000

[Mei00a] S. Meinel
CLIC - neue Perspektiven für die 3D - Strömungssimulation
Inbetriebnahme des Chemnitzer Linux - Clusters, TU Chemnitz, 11.10.2000.

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Im Teilprojekt D3 ist ein leistungsfähiges Programmpaket für die Simulation zwei- und dreidimensionaler Strömungs- und Transportprobleme entstanden, das auf dem zur Zeit modernsten Parallelrechnersystemen der TU Chemnitz verfügbar ist. Es existiert ein erhebliches Potential an Erfahrungen mit komplexen strömungsmechanischen Problemstellungen in Zusammenhang mit der Simulation aus Hochleistungsrechnern.
In diesem Projekt mit breitem Anwendunghintergrund wurden theoretische Ergebnisse der zentralen Projektes A3 genutzt, validiert und weiterentwickelt. Die in der Strömungssimulation erkannten Notwendigkeiten gaben wichtige Hinweise für die Weiterentwicklungen auf dem Gebiet der Löserentwicklung.
Durch das Auslaufen der Projektförderung sind inhaltliche Ziele des im Berichtszeitraum 1999-2001 vorerst nicht erreicht worden. Dies betrifft vor allem den Ausbau der Simulationsprogramme für turbulente Strömungen, die Einbeziehung adaptiver Methoden und die in der Projektskizze [Mey99] ins Auge gefasste ALE-Option. Die vorliegenden Ergebnisse stellen jedoch einen fundierten Ausgangspunkt für die numerische Simulation von komplexen Strömungsvorgängen dar, die etwa in einem geeigneten Anwendungsprojekt integriert sein könnten.

Kapitel 3

Gesamtdokumentation der Aktivitäten

3.1 Aktivitätenliste

3.1.1 Seminare, Vorträge und Präsentationen in Chemnitz

Datum	Leitung/Referenten, Einrichtung	Thema (Bemerkung)
22.04.1998	Dr. B. Sandow, FU Berlin-Dahlem	Experimentelle Untersuchungen am Metall-Isolator-Übergang.
06.05.1998	Prof. W. Weber, Universität Dortmund	Magnetismus in Übergangsmetallen: lokalisierte oder itinerante Spins?
13.05.1998	Dr. H.-P. Breuer, Universität Freiburg	Die Dynamik offener Quantensysteme und stochastische Prozesse im Hilbertraum.
10.06.1998	O. Halfpap, Universität Hamburg	Wechselwirkungsunterstützter Transport.
17.06.1998	Dr. Chr. Pfleiderer, Universität Karlsruhe	Der ferromagnetische Quantenphasenübergang.
24.06.1998	Prof. H. Grabert, Universität Freiburg	Einzelladungsphänomene in metallischen Nanostrukturen.
03.07.1998	Dr. A. Wixforth,TU München	Nanoebenen in Halbleitermikrostrukturen.
08.07.1998	Dr. D. Weinmann, Universität Augsburg	New results for interacting electrons in disordered systems.
07.09.1989	Prof. D. Hähnel, Universität Duisburg	Numerische Simulation reaktiver Strömungen. (FEM Symposium)
07.09.1998	Prof. G. Lube, Universität Göttingen	A domain decomposition method for turbulent steady incompressible flows using a $[k - \epsilon]$ model. (FEM Symposium)
07.09.1998	Dr. J. Reichenbach, TU Chemnitz	FEM bei Strömungsproblemen viskoelastischer Fluide. (FEM Symposium)
07.09.1998	Dr. F. Schieweck, Universität Magdeburg	Nichtkonforme Finite Elemente höherer Ordnung zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen. (FEM Symposium)
07.09.1998	Dr. V. John, Universität Magdeburg	Parallele Mehrgitterverfahren für inkompressible Navier-Stokes Gleichungen. (FEM Symposium)
07.09.1998	Dr. B. Höhn, Universität Freiburg	Numerik für die Marangonikonvektion. (FEM Symposium)
07.09.1998	F. Kickinger, Universität Linz (Österreich)	Mesh Generation in Fluid Dynamics. (FEM Symposium)
07.09.1998	Dr. St. Meinel, TU Chemnitz	Untersuchungen zur Strömungssimulation auf dem Parallelrechner. (FEM Symposium)

Datum	Leitung/Referenten, Einrichtung	Thema (Bemerkung)
08.09.1998	Prof. R. Verfürth, Universität Bochum	A posteriori Fehlerschätzer für nichtlineare Probleme. (FEM Symposium)
08.09.1998	Dr. St. Funken , Universität Kiel	Zuverlässige und effiziente a-posteriori Fehlerabschätzung für die Finite Elemente Methode. (FEM Symposium)
08.09.1998	Prof. H.-G. Roos, TU Dresden	Robuste Diskretisierung von Konvektions–Diffusions–Gleichungen. (FEM Symposium)
08.09.1998	Dr. Th. Apel, TU Chemnitz	Behandlung von Randschichten und Eckensingularitäten bei einem Reaktions-Diffusions-Problem. (FEM Symposium)
08.09.1998	Dr. G. Kunert, TU Chemnitz	A posteriori error estimation for anisotropic tetrahedral finite element meshes. (FEM Symposium)
08.09.1998	Dr. G. Zumbusch, Universität Bonn	Parallele Lastverteilung und effiziente Speichertechniken für adaptive PDE Löser. (FEM Symposium)
08.09.1998	Dr. R. Diekmann, Universität – GH Paderborn	Lastverteilung für parallele adaptive DD-Vorkonditionierer. (FEM Symposium)
08.09.1998	Dr. Chr. Becker, Universität Heidelberg	Some software and algorithmic concepts of FEAST. (FEM Symposium)
08.09.1998	Dr. B. Erdmann, FU Berlin-Dahlem	Parallelisierung des adaptiven Finite-Elemente-Codes KARDOS für nichtlineare Evolutionsgleichungen. (FEM Symposium)
08.09.1998	Dr. St. Lang, Universität Stuttgart	UG - A Parallel Software-Platform for Adaptive Computations on Unstructured Multigrids. (FEM Symposium)
08.09.1998	Dr. M. Rücker, TU München	Parallelisierung der p-Version der FEM für Anwendungen im Bauingenieurwesen. (FEM Symposium)
08.09.1998	Dr. B. Schupp, Universität Freiburg	Objektorientierter Entwurf für adaptive parallele Strömungssimulation. (FEM Symposium)
08.09.1998	Dr. G. Berti, TU Cottbus	Konzepte und Softwarekomponenten für verteilte Anwendungen. (FEM Symposium)
09.09.1998	Prof. R.W.H. Hoppe, Universität Freiburg	Adaptive Multilevel Finite Element Methods for Electromagnetic Field Computation. (FEM Symposium)

Datum	Leitung/Referenten, Einrichtung	Thema (Bemerkung)
09.09.1998	Dr. K.G. Siebert, Universität Freiburg	Adaptive finite elements for phase transition problems with convection: Application to single crystal growth by the vertical Bridgman method. (FEM Symposium)
09.09.1998	F.-Chr. Otto, Universität Göttingen	A posteriori estimates for a non-overlapping domain decomposition method. (FEM Symposium)
09.09.1998	A. Thiele, Universität Magdeburg	Lösung von Gleichungen der annularen Chromatographie mittels adaptiver FEM. (FEM Symposium)
09.09.1998	Prof. G. Bader, TU Cottbus	Adaptive Lösung hyperbolischer Erhaltungsgleichungen. (FEM Symposium)
21.10.1998	Dr. F. Evers, Universität Karlsruhe	Dynamische Leitfähigkeit von composite fermions bei halbem Füllfaktor.
21.10.1998	Dr. R.A. Römer, TU Chemnitz	Wechselwirkende Elektronenflocken.
28.10.1998	Prof. B. Kramer, Universität Hamburg	Ramanstreuung an Quantendrähten.
28.10.1998	Prof. B. Kramer, Universität Hamburg	Quantentransport in eindimensionalen korrelierten Elektronensystemen.
11.11.1998	Dr. H.-P. Eckle, University of Jyvaskyla, Finnland	Dauerströme in eindimesionalen integrablen Modellen.
25.11.1998	Dr. V. A. Malyshev, Vavilov State Optical Institute, St. Petersburg (Rußland)	Weakly localized 1D Frenkel excitons.
26.11.1998	Dr. U. Feudel, Universität Potsdam	Komplexes Verhalten in multistabilen Systemen.
27.11.1998	Dr. D. Helbing, Universität Stuttgart	Kollektive Phänomene in getriebenen Vielteilchensystemen.
27.11.1998	Dr. R. Ketzmerick, Universität Göttingen	Quantensignaturen chaotischer Dynamik in mesoskopischen Systemen.
02.12.1998	Dr. Chr. Koch, Humboldt-Universität Berlin	Signaturen von Chaos in einem verallgemeinerten Spin-Boson-Modell.
09.12.1998	Dr. P. Bialas, Universität Bielefeld	Crumpling phase transition in random graphs.
15.12.1998	Dr. T. Dittrich, Universidad de los Andes, Bogota (Kolumbien)	Spektrale Statistik chaotischer Systeme mit und ohne räumliche Ordnung.

Datum	Leitung/Referenten, Einrichtung	Thema (Bemerkung)
16.12.1998	Dr. R. Rentzsch, FU Berlin-Dahlem	The Metal-Insulator Transition in Doped Semiconductors - Hopping, quantum Corrections and Scaling.
12.01.1999	Dr. P. Kopietz, Universität Göttingen	Symmetrien und Elektron-Elektron-Wechselwirkungen in Metallen.
13.01.1999	Dr. F. Milde, TU Chemnitz	The Anderson model of localization with anisotropic hopping.
20.01.1999	C. Schuster, Universität Augsburg	Random and periodic lattice distortions in an one-dimensional Fermi-system.
26.01.1999	Dr. P. Reimann, Universität Augsburg	Kollektiver Transport durch spontane Symmetriebrechung.
27.01.1999	Dr. M. Janssen, Universität Köln	Statistics of point-contact coductances in the Chalker-Coddington network model.
30.01.1999	Dr. St. Meinel, GfI e.V. Chemnitz	Untersuchungen zur Strömungssimulation im Teilprojekt D3.
02.02.1999	Prof. A. Pikovski, Universität Potsdam	Die Synchronisation chaotischer Systeme.
05.02.1999	Dr. D. Michael, TU BA Freiberg	Über die Geometrie inkompatibler Konfigurationen.
14.04.1999	Prof. U. Behn, Universität Leipzig	Strukturbildung bei stochastischer Anregung.
21.04.1999	Dr. R. Pai, Goa University, Goa (Indien)	DMRG for disordered interacting quantum systems.
27.04.1999	V. Uski, TU Chemnitz	Perturbation theory for the many-particle systems at finite temperature.
28.04.1999	Dr. S. Kettemann, Universität Hamburg	Exact Results on Anderson Localization in 2D and the Integer Quantum Hall Transition.
29.04.1999	Dr. F. Petruccione, Albert-Ludwigs Universität Freiburg	Monte-Carlo Methoden für das Nicht-Gleichgewicht: Master-Gleichungen und komplexe Systeme.
06.05.1999	Dr. H. Kantz, MPI für Physik komplexer Systeme, Dresden	Nichtlineare Zeitreihenanalyse: Brücke zwischen Theorie und Anwendungen.
20.05.1999	Dr. R. Kühn, Universität Heidelberg	Ein neuer Blick auf Tieftemperaturanomalien in Gläsern.
28.05.1999	Chr. Perez, Universidad Concepcion (Chile)	Biorthogonal wavelet approximation for the coupling of FEM-BEM.
02.06.1999	Prof. M. Schreckenberg, Universität Duisburg	Nichtlineare dynamische Prozesse im Verkehrsfluß.

Datum	Leitung/Referenten, Einrichtung	Thema (Bemerkung)
11.06.1999	Prof. A. Meyer, TU Chemnitz	Arten von DD-Herangehensweisen zur Kopplung zweier Teilgebiete.
16.06.1999	Prof. H.A. Weidenmüller, MPI für Kernphysik, Heidelberg	Zufallsmatrizen.
16.06.1999	Prof. H.A. Weidenmüller, MPI für Kernphysik, Heidelberg	Quantum dots.
22.06.1999	P. Cain, TU Chemnitz	The Chalker-Coddington Network Model.
25.06.1999	Prof. V. Mehrmann, Prof. F. Tröltzsch, TU Chemnitz	Optimalsteuerung und Systemreduktion bei partiellen Differentialgleichungen.
23.06.1999	Prof. M. Raikh, University of Utah (USA)	Renormalization group studies of the Quantum-Hall effect.
30.06.1999	Dr. U. Gerland, Universität Karlsruhe	Spectral statistics and dynamical localization: Sharp transition in a generalized Sinai billiard.
06.07.1999	Dr. G. Uhrig, Universität zu Köln	Magnetisch getriebene Gitterverzerrungen: Solitonen in Spin-Peierls Systemen.
07.07.1999	Dr. P. Biswas, S.N. Bose National Centre For Basic Sciences, Salt Lake City (Indien)	Electronic Structure of random alloys: An augmented space recursive approach.
07.07.1999	Prof. G. Radons, Fraunhofer-Institut für Produktionstechnik und Automatisierung, Stuttgart	Von Phasenraumstrukturen zur Dynamik von Schockwellen: Anwendung auf Erosionsprozesse beim Wasserstrahlschneiden.
07.07.1999	Dr. O. Steinbach, Universität Stuttgart	Kopplung von FEM und BEM via fiktivem Gebiet.
09.07.1999	S. Beuchler, TU Chemnitz	Experimente zur p-Version der Finite-Elemente-Methode , Diskussion zu Teilgebietslösern der p-Methode.
14.07.1999	Prof. H. Frahm, Universität Hannover	Korrelierte Elektronen in einer Dimension: Aspekte der Spin-Ladungstrennung.
21.07.1999	Prof. W. Janke, Universität Leipzig	Spin Systems on Quenched Gravity Graphs and Other Random Lattices.
13.09.1999	Prof. P. Wriggers, Universität Hannover	Zur Auswahl von finiten Elementen fuer strukturmechanische Berechnungen. (FEM Symposium)

Datum	Leitung/Referenten, Einrichtung	Thema (Bemerkung)
13.09.1999	Dr. D.P. Mok, Universität Stuttgart	Iterative Substrukturalgorithmen fuer die Finite Elemente Analyse dynamischer Ein- und Mehrfeldsysteme. (FEM Symposium)
13.09.1999	Dr. O. Steinbach, Universität Stuttgart	Zur Kopplung von FEM und BEM: Formulierung und Löser. (FEM Symposium)
13.09.1999	Dr. Chr. Bourgeois, TU Chemnitz / Universität Valenciennes (Frankreich)	Multiscale methods for the heat equation. (FEM Symposium)
14.09.1999	Prof. H.-G. Roos, TU Dresden	Layer adapted meshes for convection-diffusion problems: some new convergence results and superconvergence. (FEM Symposium)
14.09.1999	Dr. G. Kunert, TU Chemnitz	Anisotropic error estimation for a singularly perturbed reaction-diffusion equation. (FEM Symposium)
14.09.1999	St. Gräf, Universität Würzburg	On a posteriori error estimators in the finite element method on anisotropic meshes. (FEM Symposium)
14.09.1999	Dr. Th. Apel, TU Chemnitz	Nichtkonforme anisotrope finite Elemente. (FEM Symposium)
14.09.1999	Dr. J. Schöberl, Universität Linz (Österreich)	Anisotropic Mixed Finite Elements for Reissner Mindlin Plate Models. (FEM Symposium)
14.09.1999	Prof. St.M. Holzer, Universität Stuttgart	Modellieren und effizientes Rechnen mit hp-FE-Methoden in der Strukturanalyse. (FEM Symposium)
14.09.1999	A. Düster, TU München	Die p-Version der FEM für physikalisch nichtlineare Probleme der Strukturmechanik. (FEM Symposium)
14.09.1999	S. Beuchler, TU Chemnitz	Vorkonditionierungsansatz bei der p-Version der FEM. (FEM Symposium)
15.09.1999	Dr. Chr. Pflaum, Universität Würzburg	Expression Templates für partielle Differentialgleichungen. (FEM Symposium)
15.09.1999	Prof. S.V. Nepomnyaschikh, AdW Novosibirsk (Rußland)	Preconditioning operators for elliptic problems with bad parameters. (FEM Symposium)
15.09.1999	U. Reichel, TU Chemnitz	Numerische Simulation des Setzungsverhaltens von Feinschlämmen. (FEM Symposium)

Datum	Leitung/Referenten, Einrichtung	Thema (Bemerkung)
15.09.1999	B. Hackl, Universität Linz (Österreich)	Numerical Simulation of Body-Body Contact Problems. (FEM Symposium)
21.09.1999	A. Hellmich, TU Chemnitz	Numerische Tests verschiedener Glättungsoperatoren in einem parallelen additiven Mehrgitterverfahren.
13.10.1999	Prof. P. Ziesche, MPI für Physik komplexer Systeme Dresden	Maße für die Korrelationsstärke und das Calogero-Sutherland-Modell.
22.10.1999	Dr. W. Seiler, Universität Mannheim	Vervollständigung allgemeiner Systeme von Differentialgleichungen.
29.10.1999	Dr. O. Ernst, TU BA Freiberg	Ergänzung des Mehrgitterverfahrens durch Krylov-Unterraumverfahren zur Lösung der Helmholtz-Gleichung.
29.10.1999	Dr. B. Nkemzi, University of Buea (Kamerun)	Fourier finite element method for the Lamé equations – The reason why it worked.
03.11.1999	Prof. G. Radons, Fraunhofer Institut für Produktionstechnik und Automatisierung, Stuttgart	Quantum Chaos.
05.11.1999	Prof. A. Meyer, TU Chemnitz	Varianten von Gebietszerlegungsverfahren.
10.11.1999	Dr. P. Schwab, Universität Augsburg	Dephasing of electrons in disordered metals.
11.11.1999	P. Tichy, Karls-Universität Prag (Tschechien)	The shadow vector in the Lanczos method.
12.11.1999	Dr. Th. Apel, TU Chemnitz	Über einige weniger bekannte Approximationsresultate.
26.11.1999	G. Freiling, Duisburg	Matrix-Riccati-Differentialgleichungen.
01.12.1999	D. Lenz, Universität Frankfurt	Hierarchien in Sturmschen dynamischen Sytemen und gleichmäßige spektrale Eigenschaften eindimensionaler Quasikristalle.
02.12.1999	S. Beuchler, TU Chemnitz	Lösungsverfahren in der p-Version der FEM.
03.12.1999	H. Harbrecht, TU Chemnitz	Biorthogonal wavelet approximation for the coupling of FEM-BEM.
03.12.1999	Dr. S. Goedecker, MPI Stuttgart	How to achieve high performance in scientific calculations on modern computer.

Datum	Leitung/Referenten, Einrichtung	Thema (Bemerkung)
10.12.1999	Dr. M. Kuhn, Universität Linz (Österreich)	Coupling of FEM and BEM for 3D Magnetic Field Problems.
17.12.1999	Prof. S. Nicaise, Université de Valenciennes (Frankreich)	Edge elements on anisotropic meshes and approximation of the Maxwell equations.
07.01.2000	A. Fechner, Universität Hamburg	Local fields in correlated electron systems.
07.01.2000	Prof. S. Suga, Department of Applied Physics, Osaka University (Japan)	Elementary excitation for the single impurity Anderson model in magnetic fields.
14.01.2000	A. Shleykel, Universtät Rostov am Don (Rußland)	Vibration-convection in a layer with free boundary.
19.01.2000	Prof. P. Wölfle, Universität Karlsruhe	Composite Fermions in Quantenhallsystemen nahe halber Füllung: Klassischer Transport im Zufallsmagnet.
20.01.2000	K. Pietsch, TU Chemnitz	FEM-Mortaring nach der Methode von Nitsche.
21.01.2000	Prof. J. Schmidt, TU Dresden	Clough-Tocher Splines mit Anwendungen bei restringierter Approximation.
26.01.2000	Dr. V. Kostrykim, Institut für Lasertechnik, Aachen	Random Schrödinger operators.
02.02.2000	Prof. D. Vollhardt, Universität Augsburg	Mott, Hubbard und der Metall-Isolator-Übergang.
02.02.2000	Prof. R. Schneider, TU Chemnitz	Wavelets and partial differential equations.
09.02.2000	M. Ndawana, University of Zambia, Lusaka (Sambia)	Energy level statistics of a critical random matrix ensemble.
16.02.2000	Xi-Wen Guan, Jilin University (China)	Osp (2\2) supersymmetric correlated electron model with boundary fields.
26.04.2000	Dr. A. Franz, TU Chemnitz	Random Walks on Fractals.
28.04.2000	M. Bebendorf, Universität Saarbrücken	Approximation von Randelementmatrizen.
28.04.2000	M. Petzoldt, WIAS/ Berlin	Singularitäten bei Interfaceproblemen und ihre Behandlung mit a posteriori Fehlerschätzern.

Datum	Leitung/Referenten, Einrichtung	Thema (Bemerkung)
03.05.2000	Prof. H. Spohn, TU München	Skaleninvarianz bei Wachstumsprozessen und zufällige Matrizen.
05.05.2000	M. Bollhöfer, TU Chemnitz	Verbindungen zwischen unvollständigen Dreieckszerlegungen und approximativen Inversen. (6. Südostdeutsches Kolloquium zur Numerischen Mathematik)
17.05.2000	Dr. R. Loll, Albert Einstein-Institut, Potsdam	Quantum gravity and the statistical mechanics of random geometries.
24.05.2000	Prof. P. Thomas, Philipps-Universität Marburg	Ultra fast current generation and subsequent dynamics in disordered semiconductors.
26.05.2000	S. Derezin, TU Chemnitz	Dislocations and disclinations in the Mindlin-Reissner plate theory.
03.06.2000	Dr. J.M. Melenk, MPI Leipzig	hp-FEM for singularly perturbed reaction-diffusion equations in curvilinear polygons.
16.06.2000	Dr. U. Benedix, TU Chemnitz	Parameterschätzung für elastisch-plastische Deformationsgesetze bei Berücksichtigung lokaler und globaler Vergleichsgrößen.
28.06.2000	A. Wensauer, Universität Regensburg	Lateral gekoppelte Quantendots.
30.06.2000	M. Tůma, Karls-Universität Prag (Tschechien)	Factorized Block Approximate Inverse Preconditioning.
07.07.2000	H.–J. Flad, MPI Leipzig	Wavelet Expansions of Correlated Wavefunctions.
07.07.2000	S. Seeger, TU Chemnitz	Gaskinetische Modelle der Dynamik von Fluiden und deren numerische Simulation.
23.08.2000	Dr. R.N. Nabben, Universität Bielefeld	Eine algebraische Konvergenztheorie der Schwarz-Iterationsverfahren bei Gebietszerlegungsmethoden.
25.09.2000	A. Engel, Universität Magdeburg	Spieltheorie und statistische Mechanik. (HERAEUS 2000)
25.09.2000	H.-J. Korsch, Universität Kaiserslautern	Chaotische Billards. (HERAEUS 2000)
25.09.2000	Prof. M. Feistauer, Karls-Universität Prag (Tschechien)	Numerical Approximations of Compressible Flow. (FEM Symposium)

Datum	Leitung/Referenten, Einrichtung	Thema (Bemerkung)
25.09.2000	Prof. L. Tobiska, Universität Magdeburg	Finite Element Methods and Ferrofluids. (FEM Symposium)
25.09.2000	U. Risch, Universität Magdeburg	The Residual Free Bubble Method for Bilinear Finite Elements. (FEM Symposium)
25.09.2000	R. Hartmann, Universität Heidelberg	Adaptive Discontinuous Galerkin finite element methods for conservation equations. (FEM Symposium)
25.09.2000	Dr. B. Khoromskij, MPI-Leipzig	On H-Matrix FE Approximation to Nonlocal (Integral) Operators. (FEM Symposium)
26.09.2000	Prof. Z. Bittnar, Karls-Universität Prag (Tschechien)	Parallel Computations in Material Modeling. (FEM Symposium)
26.09.2000	Dr. P. Jimack, University Leeds (UK)	A Parallel Domain Decomposition Preconditioner for Three-Dimensional Problems. (FEM Symposium)
26.09.2000	Prof. B. Heinrich, TU Chemnitz	Nitsche type mortaring for elliptic problems. (FEM Symposium)
26.09.2000	Dr. O. Steinbach, Universität Stuttgart	Hybrid Coupled Domain Decomposition Methods. (FEM Symposium)
26.09.2000	Prof. S. Nicaise, Universität Valenciennes (Frankreich)	Refined mixed finite element method for the Boussinesq equations in polygonal domains. (FEM Symposium)
26.09.2000	Dr. J.M. Melenk, MPI Leipzig	Efficient quadrature in hp-FEM. (FEM Symposium)
26.09.2000	Dr. Chr. Wieners, Universität Heidelberg	Efficient and reliable approximations for elliptic eigenvalue problems. (FEM Symposium)
26.09.2000	Dr. Th. Apel, TU Chemnitz	How to calculate singularity exponents? (FEM Symposium)
26.09.2000	Prof. M. Schreckenberg, Universität Duisburg	Statistische Physik des Verkehrs. (HERAEUS 2000)
26.09.2000	K. Binder, Universität Mainz	Finite Size Scaling. (HERAEUS 2000)
27.09.2000	F. Schwabl, TU München	Selbstorganisation und Kritikalität. (HERAEUS 2000)
27.09.2000	E. Runge, Humboldt-Universität Berlin	Zufallsaspekte in optischen Spektren. (HERAEUS 2000)

Datum	Leitung/Referenten, Einrichtung	Thema (Bemerkung)
27.09.2000	Dr. M. Krizek, Akademie der Wissenschaften, Prag (Tschechien)	Nonobtuse tetrahedral partitions and the discrete maximum principle. (FEM Symposium)
27.09.2000	Dr. G. Kunert, TU Chemnitz	Mesh generation and error estimation on anisotropic meshes. (FEM Symposium)
27.09.2000	Dr. F. Hülsemann, Universität Erlangen-Nürnberg	On the computational cost of a local r-refinement method for variational problems. (FEM Symposium)
28.09.2000	Prof. M. Schreiber, TU Chemnitz	Anderson–Modell der Lokalisierung. (HERAEUS 2000)
28.09.2000	U. Grimm, TU Chemnitz	Periodizität und Unordnung. (HERAEUS 2000)
28.09.2000	Dr. W. Ebeling, Humboldt-Universität Berlin	Nichtlineare Dynamik aktiver Brownscher Teilchen. (HERAEUS 2000)
29.09.2000	M. Ausloos, Universität Liege	Financial Time Series and statistical Mechanics. (HERAEUS 2000)
30.09.2000	J. Voit, Universität Bayreuth	Statistische Mechanik von Kapitalmärkten. (HERAEUS 2000)
02.10.2000	Dr. A. Bunde, Universität Gießen	Langzeitkorrelationen in der Natur. HERAEUS 2000
02.10.2000	Prof. K. H. Hoffmann, TU Chemnitz	Optimierung mittels physikalischer Methoden. (HERAEUS 2000)
02.10.2000	Dr. I. Morgenstern, Universität Regensburg	Methoden der stat. Physik zur Optimierung. (HERAEUS 2000)
02.10.2000	Dr. P. Rujan, Universität Oldenburg	Kombinatorische Optimierungsprobleme. (HERAEUS 2000)
04.10.2000	Dr. P. Grassberger, FZ Jülich, NRW	Go with the winners - The Simulation. (HERAEUS 2000)
04.10.2000	Dr. W. Kinzel, Universität Würzburg	Neuronale Netze. (HERAEUS 2000)
05.10.2000	Dr. Th. Vojta, TU Chemnitz	Quanten-Phasenübergänge. (HERAEUS 2000)
05.10.2000	Dr. B. Kramer, Universität Hamburg	Energieniveaustatistik und Quanten-Phasenübergänge. (HERAEUS 2000)
06.10.2000	Dr. R.A. Römer, TU Chemnitz	Perkolation und Renormierung am Quanten-Hall-Übergang. (HERAEUS 2000)

Datum	Leitung/Referenten, Einrichtung	Thema (Bemerkung)
11.10.2000	Dr. P. Blaudeck, K. H. Hoffmann, TU Chemnitz	Analyse der Struktur von Zustandräumen physikalischer Systeme. (Inbetriebnahme des Chemnitzer Linux-Clusters)
11.10.2000	Dr. Th. Frank, TU Chemnitz	Simulation von Strömungen in der Verfahrenstechnik auf Clustercomputern. (Inbetriebnahme des Chemnitzer Linux-Clusters)
11.10.2000	Dr. St. Meinel, GfI e.V. Chemnitz	CLIC – Neue Perspektiven für die 3D–Strömungssimulation. (Inbetriebnahme des Chemnitzer Linux-Clusters)
11.10.2000	Dr. V. Andrei Malyshev, Ioffe Institut, St. Petersburg (Russland)	Acceptor impurities in semiconductors; ground states wavefunctions and characteristics.
13.10.2000	Prof. J.B. Anderson, Pennsylvania State University (USA)	Quantum Monte Carlo: From a few electrons to a few thousand.
18.10.2000	A. Chudnovski, Universität Halle	Kondo versus non-Kondo regimes in quantum dots.
20.10.2000	Dr. K. Eppler, TU Chemnitz	Randvariationsansätze für Gebiets- bzw. Gestaltsoptimierung.
25.10.2000	Prof. P. Stollmann, TU Chemnitz	Lokalisierung: Die Perspektive der Mathematik.
27.10.2000	Prof. R. Schneider, TU Chemnitz	The Discontinuous Galerkin Scheme – Part I.
01.11.2000	Dr. S. Flach, MPI f. Physik komplexer Systeme Dresden	Discrete Breathers-from Macroscale to Nanoscale Localization.
03.11.2000	Prof. R. Schneider, TU Chemnitz	The Discontinuous Galerkin Scheme – Part II.
08.11.2000	S. Warzel, Universität Erlangen-Nürnberg	Rigorose Aussagen zur Zustandsdichte zufälliger Schrödinger Operatoren.
10.11.2000	Prof. R. Schneider, TU Chemnitz	Multiscale bases for the discontinuous Galerkin scheme.
15.11.2000	Dr. A. Fledderjohann, Universität Wuppertal	Ground state properties of antiferromagnetic spin-1/2 Heisenberg systems in external fields.
17.11.2000	Maharavo Randrianarivony, Madagaskar	Macroelement Technique to prove Stability of low order Elements for the Stokes Equation – Part I.
24.11.2000	S. Derezin, TU Chemnitz	An introduction to MITCn elements for Mindlin-Reissner plates – Part I.

Datum	Leitung/Referenten, Einrichtung	Thema (Bemerkung)
24.11.2000	Dr. D. Heidrich, Universität Leipzig	Potential energy surface analysis. (Workshop “Energy Landscapes”)
24.11.2000	Dr. W. Quapp, Universität Leipzig	Potential energy surface analysis: mathematical foundations. (Workshop “Energy Landscapes”)
24.11.2000	Dr. E. Wales, Cambridge University (UK)	Energy landscapes: from glasses to biomolecules via clusters. (Workshop “Energy Landscapes”)
24.11.2000	Dr. J. Doye, Cambridge University (UK)	Global optimization and the relation to the underlying energy landscape. (Workshop “Energy Landscapes”)
24.11.2000	Dr. C. Tsallis, Centr. Fis. Rio de Janeiro (Brasilien)	Nonextensive statistical mechanics, metaequilibrium and optimizaion techniques. (Workshop “Energy Landscapes”)
24.11.2000	Dr. P. Jund, Universite Montpellier (Frankreich)	Computer investigation of the energy landscape of amorphous silica. (Workshop “Energy Landscapes”)
24.11.2000	Dr. S. Woodley, Royal Inst. London (UK)	Crystal structure prediction using a genetic algorithm. (Workshop “Energy Landscapes”)
24.11.2000	Dr. A. Möbius, Prof. M. Schreiber, Prof. K. H. Hoffmann, TU Chemnitz/IFW Dresden	Optimization by thermal cycling. (Workshop “Energy Landscapes”)
25.11.2000	Dr. P. Sibani, Odense Universiteit (Holland)	Landscape structure and dynamics of glassy systems. (Workshop “Energy Landscapes”)
25.11.2000	Dr. P. Blaudeck, K. H. Hoffmann, TU Chemnitz	Simplifying Energy Landscapes. (Workshop “Energy Landscapes”)
25.11.2000	Dr. C. Schön, MPI Stuttgart	Structure prediction of crystalline and amorphous systems. (Workshop “Energy Landscapes”)
25.11.2000	Dr. A. Heuer, Universität Münster	Computer simulation of glass-forming liquids. (Workshop “Energy Landscapes”)
25.11.2000	Dr. J. Hesser, Universität Mannheim	Protein structure prediction. (Workshop “Energy Landscapes”)
25.11.2000	Dr. S. Kobe, TU Dresden	Walking in the energy landscape of t-J spin glass. (Workshop Energy Landscapes)

Datum	Leitung/Referenten, Einrichtung	Thema (Bemerkung)
25.11.2000	Dr. O.V. Kirillova, Universität St. Petersburg (Rußland)	A model of communication networks with emergent dynamical structure. (Workshop “Energy Landscapes”)
25.11.2000	Prof. M. Schreiber, Dr. T. Vojta, Dr. A. Möbius, TU Chemnitz/IFW Dresden	Correlated electrons in the quantum Coulomb glass. (Workshop “Energy Landscapes”)
30.11.2000	Dr. Th. Frank, TU Chemnitz	Efficient Parallelization of Eulerian–Lagrangian Approach for Disperse Multiphase Flow Calculation on MIMD Computer Architectures. (CLUSTER2000)
01.12.2000	Dr. K. Bernert, TU Chemnitz	Multi–Grid Acceleration of a SIMPLE–Based CFD–Code and Aspects of Parallelization. (CLUSTER2000)
01.12.2000	S. Derezin, TU Chemnitz	An introduction to MITC-elements for Mindlin-Reissner plates – Part II.
01.12.2000	F. Seifert, TU Chemnitz	Proposing a Mechanism for Reliably Locking VIA Communication Memory in Linux. (CLUSTER2000)
06.12.2000	Dr. M. Vojta, Universität Augsburg	Impurities and quantum magnetism in the high-Tc cuprates.
08.12.2000	Pijus Kandi De, TU Chemnitz	An introduction to mortaring in discontinuous PDE problems.
15.12.2000	Dr. K. Neymeyr, Universität Tübingen	Konvergenztheorie vorkonditionierter Verfahren für Eigenwertprobleme elliptischer Differentialoperatoren.
15.12.2000	Dr. G. Kunert, TU Chemnitz	A robust local problem error estimator for a singularly perturbed problem on anisotropic finite element meshes.
20.12.2000	Prof. P. van Dongen, Johannes-Gutenberg Universität Mainz	Stark korrelierte Elektronen im Festkörper.
22.12.2000	Maharavo Randrianarivony, Madagaskar	Macroelement Technique to prove Stability of low order Elements for the Stokes Equation – Part II.
12.01.2001	Aihui Zhou, Chinese Academy of Science, Peking (China)	A posteriori Estimates for Discontinuous Galerkin Methods.
16.01.2001	P. Cain, TU Chemnitz	Macroscopic inhomogeneities at the quantum Hall transition.

Datum	Leitung/Referenten, Einrichtung	Thema (Bemerkung)
19.01.2001	Dr. A. Buchleitner, MPI für Physik komplexer Systeme, Dresden	Chaotic ionization of non-classical alkali Rydberg states - Computational Physics meets experiment.
19.01.2001	S. Beuchler, TU Chemnitz	Preconditioning for the p-version of the FEM.
23.01.2001	V. Uski, TU Chemnitz	Wave function statistics in the Anderson model of localization.
24.01.2001	Dr. Parthapratim Biswas, University of Utrecht (Niederlande)	Efficient tight binding Monte Carlo structural sampling applied to a-Si.
30.01.2001	C. Villagonzalo, TU Chemnitz	Thermoelectric Transport at the Metal-Insulator Transition.
31.01.2001	Chr. Koch, Fritz-Haber-Institut Berlin	Quantum dissipative dynamics with a surrogate Hamiltonian.
20.02.2001	Dr. S. Pereverzev, Kiew Institute of Mathematics (Ukraine)	An adaptive discretization for noisy pseudodifferential equations of a negative order.
02.03.2001	Prof. B. Heinrich, TU Chemnitz	Nitsche Methoden und Mortarisierung.
16.03.2001	Prof. P. Oswald, Bell Laboratories (USA)	Averaging subdivision on triangulations.
21.03.2001	Dr. H. Baaser, TU Darmstadt	Grenzen und Einschränkungen von FE-Analysen mit schädigungsmechanischen Werkstoffgesetzen.

3.1.2 Übersicht über Workshops und Tagungen

Im Berichtszeitraum wurden vom Sonderforschungsbereich die folgenden Workshops und Tagungen ausgerichtet. Ihr Inhalt und die Teilnehmer sind in den entsprechenden Tagungsmaterialien und in den Webseiten

(erreichbar über: `http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/seminar`)

dokumentiert.

[1] 07.–09.09.1998, Chemnitzer FEM-Symposium 1998.

[2] 25. und 26. März 1999, 2. Workshop Cluster-Computing, Fakultät für Informatik, Professur Rechnerarchitektur, Technische Universität Chemnitz, in Zusammenarbeit mit der Universität Karlsruhe (gleichzeitig Tagungsort)

[3] 25.03.–28.03.1999, "Recent Advances in Analytical and Numerical Treatment of Operator Equations", 11. TMP Tagung Mathematische Physik gemeinsam mit P. Junghanns und B. Silbermann.

[4] 12.04.–16.04.1999 Minisymposium "Wavelets", GAMM - Tagung in Metz, gemeinsam mit C. Schwab.

[5] 13.–15.09.1999, Chemnitzer FEM-Symposium 1999.

[6] 06.01.–07.01.2000, Workshop on Structured Matrices, Technische Universität Chemnitz, Chemnitz.

[7] 14. und 15. April 2000, Workshop "Calculation of corner singularities in elasticity", Technische Universität Chemnitz, Chemnitz.

[8] 5. Mai 2000, 6. Südostdeutsches Kolloquium zur Numerischen Mathematik, Technische Universität Chemnitz, Chemnitz.

[9] 25.–27.09.2000, Chemnitzer FEM-Symposium 2000.

[10] 23.11.–25.11.2000, "International Workshop on Energy Landscapes", Institut für Physik, Technische Universität Chemnitz, Chemnitz.

[11] 28.11.–01.12. 2000, CLUSTER2000 — IEEE International Conference on Cluster Computing, Fakultät für Informatik, Professur Rechnerarchitektur, Technische Universität Chemnitz

[12] 25.01.–26.01.2001 Workshop "Wavelets and Electronic Structure Calculation", Chemnitz;
"Fast Methods for Integral Equations" GAMM - Tagung in Zürich, gemeinsam mit S. Sauter und C. Schwab.

[13] 12.02.–15.02.2001 Minisymposium "Wavelets", Technische Universität Chemnitz, Chemnitz.

Von Teilprojekten des Sonderforschungsbereichs wurden im Berichtszeitraum folgende Beiträge in Ausstellungen und auf Messen ausgerichtet.

[1] W. Rehm, Vorstellung erster Prototypen einer VIA-SCI Karte mit Basisfunktionalität auf der CeBIT 2000 in Kooperation mit der TBZ-PARIV GmbH Chemnitz.

[2] M. Trams, CLUSTER2000 — IEEE International Conference on Cluster Computing, 28.Nov.–1.Dez. 2000, Chemnitz, Poster Presentation: Design Choices and First Results of Our VIA-Capable PCI-SCI Bridge.

3.1.3 Gästeprogramm, wissenschaftliche Kontakte

3.1.3.1 Gastwissenschaftler:

Stefan Sauter, Universität Leipzig, 29.01.1999

Prof. Daniel Hershkowitz, Technion, Haifa, 14.01.1999

Prof. Dietmar Kröner, Karlsruhe, 07.01.–08.01.1999

Dr. Werner Haas, Universität Linz, 11.01.–12.01.1999

Prof. Lutz Tobiska, Otto–von–Guericke–Universität Magdeburg, 21.01.1999, 25.09.–27.09.2000

Prof. Miroslav Fiedler, Universität Prag, 19.01.–01.02.1999

Dr. Wen–Wei Lin, Tsinghua University, Taiwan, 26.01.1999

Stefan Sauter, Universität Leipzig, 28.01.–29.01.1999

Prof. Sergei Nepomnyaschikh, Rußland, 02.02.–30.09.1999

Andreas Rössle, Universität Stuttgart, 12.03.–13.03.1999

Dr. Ivica Djurdjevic, Universität Stuttgart, 12.03.–13.03.1999

Dr. Peter Jimack, Universität Leeds, 14.–19.03.1999, 8.–11.08.1999, 7.–12.11.1999, 16.–20.04.2000, 10.–15.09.2000, 11.–16.03.2001

Prof. Dietrich Breass, Bochum, 16.03.1999

Prof. Gohberg, Israel, 18.03.–24.03.1999

Gabriel Gattica, Universidad de Concepcion, Chile, 17.03.-01.04.1999

Salim Meddahi, Universidad de Concepcion, Chile, 17.03.-01.04.1999

Klaus Giebermann, Bonn, 24.03.–26.03.1999, 17.05.-21.05.1999

Prof. Roland Duduchava, University of Tiflis, 28.03.-06.04.1999, 30.01.–08.02.2000

Rainer Schlundt, WIAS Berlin, 30.04.1999

Arne Barinka, Universität Aachen, 02.05.-07.05.1999, 23.08.-27.08.1999, 07.02.–10.02.2000

Dr. Jürgen Fuhrmann, WIAS Berlin, 28.05.1999

Prof. Klaus Beyer, Universität Leipzig, 18.06.1999

V. Makarov, Rußland, 18.06.1999

A. Timokhar, Rußland, 18.06.1999

Yuri Tkacheev, Rußland, 01.07.–02.08.1999

Olaf Steinbach, Stuttgart, 06.07.–08.07.1999

Prof. Anna-Margarete Sändig, Univerisät Stuttgart, 15.07.–17.07.1999, 14.04.–15.04.2000

Niloufer Mackay, Western Michigan University, 08.07.–18.07.1999

D. Steven Mackay, Kalamazoo College, 08.07.–18.07.1999

Saluuat Ghassan, Syrien, 01.09.–30.09.1999

Diana Estevez Schwarz, Berlin, 06.09.–09.09.1999

Prof. Stefan Holzer, Universität Stuttgart, 14.09.–15.09.1999

Prof. Peter Wriggers, Hannover, 13.09.1999

Prof. Martin Berzins, Universität Leeds, 26.09.–1.10.1999

Serguei Solovov, Rußland, 01.10.–30.11.1999, 03.04.–30.06.2000

Dr. Boris Khoromskij, Universität Leipzig, 15.10.1999

Dr. Angelika Pawell, TU Cottbus, 15.10.1999

Prof. Dr. Gerhard Freiling, Universität Duisburg, 25.11.1999–27.11.1999

Dr. Wolfgang Seiler, Universität Mannheim, 21.10.–23.10.1999

Dr. Boniface Nkemzi, University of Buea, Kamerun, 24.10.–30.10.1999

Petr Tichy, Prag, 09.11.–12.11.1999

Prof. Dr. Heike Faßbender, TU München, 05.01.2000—08.01.2000

Dr. Peter Benner, Universität Bremen, 05.01.2000–08.01.2000

Christine Boigelot, Universite de Liege, 22.11.–25.11.1999

Maharavo Randrianarivony, Universität Antananerive, Madagaskar, 01.11.-15.11.1999

Sviatoslav Derezine, Rußland, 01.11.–31.12.1999, 01.01.-30.05.2000

Oliver Ernst, Dresden, 29.10.1999

Klaus Hackl, Ruhr-Universität Bochum, 02.12.–03.12.1999

Prof. David Watkins, Washington State University, Pullman, USA, 01.12.-31.12.1999, 01.01.–31.01.2000, 01.03.–31.03.2000

Vadim Bakirof, Rußland, 11.01.–10.02.2000

Alexey Shleikel, Rußland, 04.01.–29.01.2000

Prof. Vavrin Zdenek, Prag, 06.01.–08.01.2000

Harald Wimmer, Universität Würzburg, 06.01.–08.01.2000

Prof. Ralph Byers, Lawrence, USA, 04.01.–13.01.2000

Vadim Olschewski, Atlanta, USA, 06.01.–09.01.2000

Prof. Jochen Schmidt, Universität Dresden, 21.01.–22.01.2000

Carsten Wolters, Universität Leipzig, 28.01.2000

Mahadevan Ganesh, Australien, 06.02.–08.02.2000

Ivan Graham, Bath, 07.04.2000

Olaf Steinbach, Universität Stuttgart, 14.04.–15.04.2000

Gregor Schmidlin, Schweiz, 09.04.–13.04.2000

Jürgen Roßmann, Universität Rostock, 13.04.–15.04.2000

Heiko Andrä, Universität Karlsruhe, 14.04.–15.04.2000

Christian Perez, Universidad Concepcion, Chile, 18.04.–17.06.2000

Uwe Reichel, SAP Walldorf, 14.04.–15.04.2000

Prof. Kirillova, National Academy of Scienses of Belarus, 14.05.-17.05.2000

Dr. Sergej Rjasanow, Universität Saarbrücken, 28.04.2000

Prof. Dominique Leguillon, Paris, 13.–16.04.2000

Prof. Rafail Garbasov, Belarus State University, 14.05.–17.05.2000

Mario Bebendorf, Universität Saarbrücken, 28.04.–29.04.2000

Martin Petzoldt, WIAS Berlin, 28.04.2000

Atanas Dimitrov, Universität Karlsruhe, 13.04.–15.04.2000

Prof. Petro Petkov, TU Sofia, Bulgarien,

Prof. Michael Konstantinov, TU Sofia, Bulgarien,

Stephan Schneider, TU München, 08.06.–09.06.2000

Miroslav Tůma, Institute of Computer Science Prag, Tschechien, 29.06.-01.07.2000

Prof. Knyazev, Denver, 25.06.–27.06.2000

Heinz-Jürgen Flad, MPI Leipzig, 07.07.2000

Johannes Tausch, Southern Meredith University, USA, 26.07.–29.07.2000

Dr. Klaus Neymeyr, Universität Tübingen, 14.12.2000–16.12.2000

Dr. Reinhard Nabben, Universität Bielefeld, 22.8.–23.08.2000

Prof. Bittnar, Prag, 25.09.–27.09.2000

Prof. Krizek, Prag, 24.09.–27.09.2000

Miroslav Feistauer, Prag, 24.09.–27.09.2000

Alexander Rusakow, Rußland, 20.11.–09.12.2000

Prof. Hans Schneider, University of Wisconsin, USA, 19.11.–26.11.2000, 03.12.–09.12.2000

auswärtige Teilnehmer des FEM Symposiums vom 7.–19. September 1998 (noch nicht im Bericht für 1996–1998 enthalten):

Prof. Dr. Georg Bader, TU Cottbus

Dr. Christian Becker, Universität Heidelberg

Volker Behns, Universität Magdeburg

Dr. Guntram Berti, TU Cottbus

Ralf Deiterding, TU Cottbus

Dr. Ralf Diekmann, Universität Gesamthochschule Paderborn

Dr. Bodo Erdmann, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

Dr. Stefan Funken, Universität Kiel

Prof. Dr. Dieter Hänel, Universität Duisburg

Dr. Burkhard Höhn, Universität Freiburg

Prof. Dr. Ronald W. H. Hoppe, Universität Augsburg

Dr. Volker John, Universität Magdeburg

Ferdinand Kickinger, Johannes Kepler Universität Linz, Österreich

Dr. Klaus-Dieter Krannich, TU Cottbus

Dr. Klaus-Jürgen Kreul, TU Cottbus

Dr. Stefan Lang, Universität Stuttgart

Prof. Dr. Gert Lube, Universität Göttingen

Gunar Matthies, Universität Magdeburg

Frank-Christian Otto, Universität Göttingen

Prof. Dr. Hans-Görg Roos, TU Dresden

Dr. Martin Rücker, TU München

Dr. Friedhelm Schieweck, Universität Magdeburg

Dr. Bernhard Schupp, Universität Freiburg

Dr. Kunibert G. Siebert, Universität Freiburg

Torsten Steidten , TU Bergakedemie Freiberg

Angela Thiele, Universität Magdeburg

Prof. Dr. Rüdiger Verfürth, Ruhr-Universität Bochum

Dr. Gerhard Zumbusch, Universität Bonn

auswärtige Teilnehmer des FEM Symposiums vom 13.–15. September 1999:

Alexander Düster, TU München

Steffen Gräf, Universität Würzburg

Benjamin Hackl, Universität Linz, Österreich

Carsten Hahn, Universität Hannover

Prof. Dr. Stefan M. Holzer, Universität Stuttgart

Dr. Peter Jankowski, Schmidt Bank, Hof/Saale

Dr. Torsten Linss, TU Dresden

Daniel P. Mok, Universität Stuttgart

Prof. Dr. Sergei V. Nepomnyaschikh, Russische Akademie der Wissenschaften, Novosibirsk, Rußland

Dr. Christoph Pflaum, Universität Würzburg

Prof. Dr. Hans-Görg Roos, TU Dresden

Dr. Joachim Schöberl, Universität Linz, Österreich

Torsten Steidten, TU-BA Freiberg

Dr. Olaf Steinbach, Universität Stuttgart

Prof. Dr. David Watkins, Universität Seattle, USA

Prof. Dr. Peter Wriggers, Universität Hannover

auswärtige Teilnehmer des FEM Symposiums vom 25.–27. September 2000:

Prof. Dr. Zdenek Bittnar, Karls–Universität Prag, Tschechien

Prof. Dr. Miloslav Feistauer, Karls–Universität Prag, Tschechien

Carsten Hahn, Universität Hannover

Ralf Hartmann, Universität Heidelberg

Dr. Frank Hülsemann, Universität Erlangen–Nürnberg

Dr. Peter Jimack, Universität Leeds, Großbritannien

Dr. Michael Jung, TU Dresden

Dr. Boris Khoromskij, MPI-Leipzig

Dr. Michal Krizek, Akademie der Wissenschaften, Prag, Tschechien

Jaroslav Kruis, Karls–Universität Prag

Dr. Markus Melenk, MPI-Leipzig

Prof. Dr. Serge Nicaise, Serge, Universität Valenciennes, Frankreich

Uwe Risch, Universität Magdeburg

Torsten Steidten, TU BA Freiberg

Dr. Olaf Steinbach, Universität Stuttgart

Prof. Dr. Lutz Tobiska, Universität Magdeburg

Dr. Christian Wieners, Universität Heidelberg

Daniel Balkanski, Bourgas Free University, Bulgarien, 04.03.1999 – 31.01.2000

Song Yuan, Shenyang Institute of Computing Technology of Chinese Academy of Science, China, 01.10.1999 – 10.06.2000

Khaled Ragab, Ain Shams University, Kairo , Ägypten, 13.10.1999 – 30.06.2000

Dr. Andrzej Eilmes, Jagiellonian University, Krakow, Polen, 01.06.–12.06.1998, 03.11.–16.11.1999

Ivan Kondov, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgarien, 17.06.–16.10.1998

Dr. Xi-Wen Guan, Jilin University, Qingdao, China, 06.07.–31.12.1998, 03.12.1999–30.04.2000

Rastko Sknepnek, University of Belgrade, Belgrad, Jugoslawien, 28.09.–26.11.1999

Dr. Ramesh V. Pai, Goa University, Goa, Indien, 01.03.–30.04.1999

Prof. Dr. Mikhail Raikh, Dept. of Physics, University of Utah, Salt Lake City, USA,
15.05.–29.05.1999, 16.06.–27.06.1999, 14.03.–17.03.2000, 08.07.–16.07.2000

Dr. Parthapratim Biswas, Calcutta, Indien bzw. Debye Institute and Institute for Theoretical Physics, Utrecht University, Utrecht, Niederlande, 01.06.–31.08.1999 bzw. 22.01–25.01.2001

Huiqiu Yuan, Xiangton University, Hunan, China, 01.06.–30.09.1999

Alejandro Arturo Homs Puron, Universidad Politecnica de Valencia, Valencia, Spanien, 29.07–02.09.1999

Dr. Stefan Goedecker, MPI-FKS, Stuttgart, 02.12.–03.12.1999

Macleans Ndawana, University of Zambia, Lusaka, Sambia, 17.01.–31.03.2000

Dr. Xiao-Guang Wang, Laboratory of Optical Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, China, 01.03.–31.05.2000

Dr. Rajesh Narayanan, University of Oxfort, Oxford, Großbritannien, 02.04.–08.04.2000

Dr. Smaine Bekhechi, Universidad Mohammed V-Agdal, University of Rabat, Marocco, 18.04.–17.08.2000

Dr. Pavel Herman, University of Education, Hradec Kralove, Tschechien, 22.05.–22.07.2000, 04.09.–30.09.2000

Igor D. Vragowicz, University of Novi Sad, Belgrad, Jugoslawien, 04.06.–31.08.2000

Alexey Novikov, Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry, Moskau, Rußland, 17.7.–17.10.2000

Dr. Andrei Victor Malyshev, A.F. Ioffe Physical Technical Institute, St. Petersburg, Rußland, 04.10.–31.12.2000

Prof. James B. Anderson, Department of Chemistry, Pennsylvania State University, USA, 13.10.2000

Alexander Terentyev, University of Latvia, Riga, Lettland, 06.11.2000–31.01.2001

Dr. Andreas Buchleitner, MPI für Physik komplexer Systeme, Dresden, 19.01.2001

Jonathan Carter, Imperial College London, Großbritannien, 24.02.–03.03.2001

Prof. Angus MacKinnon, Imperial College London, Großbritannien, 05.03.–08.03.2001

Antonio Rodriguez, Universidad Politechnica de Madrid, Spanien, 10.07.–16.07.2001

Augusto Ribeiro, 07.08.2001–07.10.2001, Imperial College London, Großbritannien

Dr. Jens Siewert, 18.10.–22.10. 1999, DCMFI, University of Catania, Italien

Prof. Christopher Essex, University Ontario, Kanada, 09.04.-23.04.1999

Dr. Gino Siragusa, San Diego University, USA, 26.04.-30.04.1999

Prof. Viorel Badescu, Universität Bukarest, Rumänien, 05.06.-20.06.1999

Prof. Bjarne Andresen, Kopenhagen Universiteit, Dänemark, 18.10.-22.10.1999

Prof. Paolo Sibani, Odense Universiteit, Dänemark, 04.12.–08.12.1999

Prof. Sujata Tarafdar, University of Calcutta, Indien, 07.12.–15.12.1999

Dr. Yin Shi, Universität Erlangen, 24.04.–25.04.2000

Prof. Andreas Engel, Universität Magdeburg, 24.09.–26.09.2000

Prof. Kurt Binder, Universität Mainz, 25.09.–27.09.2000

Prof. Hans-Jürgen Korsch, Universität Kaiserslautern, 25.09.–27.09.2000

Prof. Michael Schreckenberg, Universität Duisburg, 25.09.–28.09.2000

Prof. Erich Runge, Humboldt-Universität Berlin, 25.09.–29.09.2000

Prof. Franz Schwabl, TU München, 25.09.–29.09.2000

Prof. Peter Grassberger, FZ Jülich, 25.09.–06.10.2000

Prof. Werner Ebeling, Humboldt-Universität Berlin, 28.09.–30.09.2000

Prof. Marcel Ausloos, Universität Liege, Belgien, 28.09.–02.10.2000

Prof. Johannes Voit, Universität Bayreuth, 28.09.–01.10.2000

Prof. Armin Bunde, Universität Gießen, 01.10.–03.10.2000

Prof. Pal Rujan, Universität Oldenburg, 01.10.–03.10.2000

Prof. Ingo Morgenstern, Universität Regensburg, 01.10.–06.10.2000

Prof. Wolfgang Kinzel, Universität Würzburg, 03.10.–06.10.2000

Prof. Bernhard Kramer, Universität Hamburg, 03.10.–06.10.2000

Dr. Sergej Amelkin, Universität Pereslavl, Russ. Föd., 01.10.2000–30.09.2001

Prof. Paolo Sibani, Odense Universiteit, Dänemark, 20.11.–25.11.2000

Prof. Christopher Essex, University Ontario, Kanada, 02.07.–15.07.2000

Dr. J. Doye, Cambridge University, England, 23.11.–25.11.2000

Dr. P. Jund, Universite Montpellier 2, Frankreich, 23.11.–25.11.2000

Dr. O. V. Kirillova, Universität St Petersburg, Russ. Föd., 23.11.–25.11.2000

Prof. C. Tsallis, Centr. Fis. Rio de Janeiro, Brasilien, 23.11.–25.11.2000

Prof. E. Wales, Cambridge University, England, 23.11.–25.11.2000

Dr. S. Woodley, Royal Institute London, England, 23.11.–25.11.2000

Dr. D. Heidrich, Universität Leipzig, 23.11.–25.11.2000

Dr. J. Hesser, Universität Mannheim, 23.11.–25.11.2000

Dr. A. Heuer, Universität Münster, 23.11.–25.11.2000

Dr. S. Kobe, TU Dresden, 23.11.–25.11.2000

Dr. J. Krawczyk, TU Dresden, 23.11.–25.11.2000

Dr. A. Möbius, IFW Dresden, 23.11.–25.11.2000

Dr. W. Quapp, Universität Leipzig, 23.11.–25.11.2000

Dr. C. Schön, MPI Stuttgart, 23.11.–25.11.2000

Prof. Peter Salamon, San Diego University, USA, 11.01.–24.01.2001

Prof. Dr. J. Betten, RWTH Aachen, 16.–17.07.1998

Prof. Dr. A.E. Tekkaya, Middle East Technical University Ankara, Türkei, 08.–10.11.1998

Prof. Dr. R.V. Goldstein, Russian Academy of Science, Institute for Problems of Mechanics 21.04.–30.04.1999

Prof. Dr. D. Besdo, Universität Hannover, 06.–07.05.1999

Dr. O. Ghouati, Universiteé de Franche–Comté Besancon, Frankreich, 30.06.–02.07.1999

Prof. Dr. P. Haupt, Universität Gesamthochschule Kassel, 15.–16.07.1999

Dr. G. Sallat, Assad Academy Aleppo, Syrien, 02.09.–02.10.1999.

Dr. V. Bakirov, Russian Academy of Science, Institute for Problems of Mechanics 01.01.–31.01.2000

Prof. Dr. O.T. Bruhns, Ruhr–Universität Bochum, 22.–23.06.2000.

Prof. Dr. H. Buggisch, Universität Karslruhe, 02.–03.11.2000.

Dr. A. Rusakov, Samara State Aerospace University, Russia, 18.11.–09.12.2000 und 08.01.–13.03.2001

Dr. H. Baaser, TU Darmstadt, Fachbereich Mechanik, 19.03.–23.03.2001

3.1.3.2 Eigene Forschungsaufenthalte im Berichtszeitraum (mit Vorträgen)

3.1.3.2.1 Kongreß-, Vortrags- und Kontaktreisen nach Übersee und Osteuropa

Th. Apel, 06.–08.12.2000, Karls-Universität Prag, Tschechien; Vortrag: Error estimates for finite element methods with anisotropic meshes.

A. Meyer, 20.04.2000, Karls-Universität Prag, Tschechien; Eingeladener Vortrag: Parallel Solving Finite Element Equations via DD–Data–Splitting.

V. Mehrmann, 23.10.–25.10.2000, SIAM meeting on Applied Linear Algebra, Raleigh, NC, USA; Hauptvortrag: Numerical solution of large scale structured eigenvalue problems.

V. Mehrmann, 25.03.–27.3.1999, Mathematical Journey through Analysis, Matrix Theory and Scientific Computation, Conference Kent State University, USA; Eingeladener Vortrag: The recursive inverse eigenvalue problem.

V. Mehrmann, 14.06.–18.06.1999, XIV Householder Symposium, Whistler, BC Canada; Eingeladener Vortrag: Numerical computation of deflating subspaces for structured pencils.

V. Mehrmann, 23.08.–26.08.1999, IEEE Conf. on Computer Aided Control Systems Design, Kona, Hawaii; Eingeladene Vorträge: a) Numerical solution of linear quadratic control problems for descriptor systems, b) On Invariant Subspaces of Hamiltonian Matrices.

V. Mehrmann, 01.06.1998, KITCS Special Seminar, University of Kansas; Vortrag: Analysis and Numerical Solution of Control Problems in Descriptor Form.

V. Mehrmann, 29.09.1999, Mathematics Colloquium, Univ. Poznan, Polen; Vortrag: The recursive inverse eigenvalue problem.

M. Bollhöfer, 10.06.–12.06.1999, Sparse 99 Conference, Minneapolis, MN, USA; Vortrag: A new approach to algebraic multilevel methods based on sparse approximate inverses.

M. Bollhöfer, 14.06.–18.06.1999, XIV Householder Symposium, Whistler, BC Canada; Vortrag: A new approach to algebraic multilevel methods based on sparse approximate inverses.

M. Bollhöfer, 23.10.–25.10.2000, Seventh SIAM Conference on Linear Algebra, Raleigh, NC, USA; Vortrag: ILUs and factorized sparse approximate inverses — strong relations and applications.

R. Schneider, 27.9.–1.10.1999, Sydney, Deutsch Australischer Workshop über Numerical Analysis of Boundary Integral Methods and Application; Vortrag: Biorthogonal Wavelet Bases for Boundary Integral Equations.

R. Schneider, 25.10.–27.10.1999, University of Texas at Austin, USA, Konferenz: SES Jahrestagung; Vortrag: Wavelet Approximation for Boundary Integral Equations.

R. Schneider, 28.10.1999, New Methodist University, Dallas; Vortrag: Wavelet Approximation for the BEM-FEM coupling.

R. Schneider, 29.10.1999, University of New Mexico at Albuquerque; Vortrag: Wavelet Matrix Compression.

R. Schneider, 25.11.–26.11.1999 Karls Universität Prag; Vortrag: Wavelet Approximation for the BEM-FEM coupling.

R. Schneider, 14.–27.5.2000, Chinese Academy of Science, Peking; Vorträge: a)Wavelets and partial differential equations; b) Biorthogonal wavelet bases for integral equations; c) The fast evaluation of nonlinear functionals of wavelet expansions.

F. Tröltzsch, 10.05.–12.05.1999, 6th SIAM Conference on Optimization, Atlanta; Vortrag: Fast solution of a state-constrained parabolic control problem.

R. A. Römer, 03.06.–07.06.1999, University of Exeter, Great Britain; Eingeladener Vortrag: Interacting electron flakes.

C. Villagonzalo, 06.12.1999, Imperial College, London, Großbritannien; Vortrag: Thermoelectric transport properties in disordered systems near the Anderson transition.

C. Villagonzalo, 04.03.1999, Low-Temperature Condensed Matter Group seminar, City College of New York, USA; Eingeladener Vortrag: Thermoelectric transport properties in disordered systems near the Anderson transition.

R. A. Römer, 21.10.–23.9.1999, University of Ruhuna, Matara, Sri Lanka.

R. A. Römer, 13.09.1999, Sri Lanka Association for the Advancement of Science, University of Colombo, Sri Lanka; Eingeladener Vortrag: Fractals in disordered systems.

R. A. Römer, 14.11.–28.11.1999, Department of Physics, University of Utah, Salt Lake City USA; Eingeladener Vortrag: The disordered two-interacting-particle problem.

P. Cain, 05.02.1999–06.03.1999, Department of Physics, University of Utah, Salt Lake City, USA.

V. Uski, 04.08.1999–11.08.1999, 22nd International Conference on Low Temperature Physics, Helsinki University of Technology, Finnland.

P. Cain, 12.11.1999–08.12.1999, Department of Physics, University of Utah, Salt Lake City, USA.

P. Cain, 05.12.2000–18.12.2000, Department of Physics, University of Utah, Salt Lake City, USA.

R. A. Römer, 02.11.–14.11.2000, Department of Physics, University of Utah, Salt Lake City, USA.

Th. Vojta, 04.09.1998–30.09.1998, University of Oregon, Eugene, USA; Vortrag: Computer simulations of disordered interacting electrons.

Th. Vojta, 17.02.1999 –20.02.1999, University of Massachusetts, Amherst, USA; Vortrag: Quantum phase transitions in electronic systems.

Th. Vojta, 21.02.1999 –27.02.1999, University of Oregon, Eugene, USA; Vortrag: Quantum phase transitions in electronic systems.

Th. Vojta, 28.2.1999 –03.03.1999, University of California, Riverside, USA; Vortrag: Quantum phase transitions in electronic systems.

Th. Vojta, 12.07.1999–28.07.1999, Aspen Center of Physics, USA.

Th. Vojta, 04.08.1999–04.09.1999, Department of Physics, University of Oregon Eugene, USA.

Th. Vojta, 17.07.2000–13.08.2000, Department of Physics, University of Oregon Eugene, USA.

Th. Vojta, 13.08.2000–27.08.2000, Aspen Center of Physics, USA.

Th. Vojta, 31.08.2000–01.09.2000, International Conference on Teaching Computational Physics, Trest, Tschechien; Vortrag: Solid State Physics on the Computer – Overview and Example: Hopping Conductivity.

Th. Vojta, 28.02.2001–04.03.2001, University of Missouri, Rolla, USA; Vortrag: Quantum phase transitions in electronic systems.

K.H. Hoffmann, 04.07.-19.07.1999, Telluride, USA.

K.H. Hoffmann, 22.11.-28.11.1999, San Diego, USA.

K.H. Hoffmann, 28.11.-04.12.2000, San Diego, USA.

K.H. Hoffmann, 11.03.-16.03.2001, Ventura, USA.

M. Schreiber, 21.07.–31.07.1998, Physics Department, El Minia University, El Minia, Ägypten; Seminarvortrag: Localisation of electronic states in disordered materials.

M. Schreiber, 02.11.–09.11.1998, 3rd International Conference Excitonic Processes in Condensed Matter (EXCON'98), Boston, USA; Vorträge: Photo-Induced Intermolecular Charge Transfer in Porphyrin Complexes; Formation of Electron Hole Pairs in a One-Dimensional Random Environment.

M. Schreiber, 22.05.–30.05.1999, 12th International Conference Dynamical Processes in Excited States of Solids, Humacao, Puerto Rico, USA; Vortrag: Models of charge transfer in porphyrin complexes.

M. Schreiber, 20.06.–28.06.1999, Polish-Israeli-German Symposium Dynamical Processes in Condensed Molecular Systems, Krakau, Polen; Vortrag: Models for charge transfer in porphyrin complexes.

M. Schreiber, 07.08.–25.08.2000, 2000 International Conference Excitonic Processes in Condensed Matter, Osaka, Japan; Vortrag: Interacting electrons in parabolic quantum dots: energy levels, addition energies, and charge distributions.

M. Schreiber, 01.09.–02.09.2000, Summerschool Teaching Computational Physics, Trest, Tschechien; Vortrag: Solid State Physics on the Computer - Example: Anderson Localization.

M. Schreiber, 15.09.–21.09.2000, 25th International Conference Physics of Semiconductors, Osaka, Japan; Vortrag: Aharonov-Bohm oscillations in the exciton luminescence from a semiconductor nanoring.

Th. Frank, July 18–22, 1999, 8th Int. Symposium on Gas–Particle Flows, ASME Fluids Engineering, Division Summer Meeting, San Francisco, CA, USA; Vortrag: Separation in a Symmetrical Double Cyclone Separator.

Th. Frank, May 27 - June 1, 2001, ICMF 2001 — 4th International Conference on Multiphase Flow, New Orleans, Louisiana, USA; Vortrag: Aspects of Efficient Parallelization of Disperse Gas-Particle. Flow Predictions using Eulerian-Lagrangian Approach.

K. Bernert, July 22-26, 2001, 3rd International Symposium on Computational Technologies for Fluid/Thermal/Chemical Systems with Industrial Applications, Atlanta, Georgia, USA; Vortrag: Numerical Simulation of Disperse Multiphase Flows with an Application in Power Engineering.

3.1.3.2.2 Weitere Forschungsaufenthalte

1998

M. Jung, 17.4.1998, 4. Südostdeutsches Kolloquium zur Numerischen Mathematik, Brandenburgische Technische Universität Cottbus; Vortrag: Iterationsverfahren mit additiven Vorkonditionierern.

Th. Apel, 05.–06.05.1998, Universität Magdeburg; Vortrag: Anisotrope finite Elemente: lokale Abschätzungen und Anwendungen.

Th. Apel, 10.–24.06.1998, Universität Valenciennes, Frankreich.

Th. Apel, 20.09.–01.10.1998, Universität Valenciennes, Frankreich.

M. Jung, 05.–08.10.1998, 10. GAMM Workshop „Multigrid Methods", Universität Bonn; Vortrag: Parallel algebraic multilevel iteration methods.

U. Reichel, 27.09.–24.10.1998, Universität Leeds.

M. Jung, 22.10.1998 und 29.10.1998, Oberseminar „Analysis und numerische Methoden für partielle Differentialgleichungen der Strömungs- und Festkörpermechanik", Mathematisches Institut A, Universität Stuttgart; Vortrag: Effiziente parallele Iterationsverfahren für Finite–Elemente–Gleichungssysteme.

G. Kunert, 17.11.1998, Arbeitsbesuch bei Prof. Kröner, Freiburg; Vortrag: A posteriori error estimation for anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes.

G. Kunert, 19.–21.11.1998, Workshop "Adaptive FEM", Heidelberg; Vortrag: Error estimation on anisotropic finite element meshes.

M. Jung, 25.11.1998, Graduiertenkolleg „Parallele und Verteilte Systeme", Universität Stuttgart; Vortrag: Parallele Algorithmen zur Berechnung magnetischer Felder.

Th. Apel, 14.–19.12.1998, Universität Leeds; Vortrag: Anisotropic finite elements: local estimates and applications.

V. Mehrmann, 06.07.–10.07.1998, Mathematical Theory of Networks and Systems, Padua, Italien; Hauptvortrag: Numerical methods for linear Quadratic and H_∞ control problems.

V. Mehrmann, 06.–09.04.1998, Jahrestagung der GAMM, Bremen; Eingeladener Vortrag: Analysis and numerical solution of control problems in descriptor form.

V. Mehrmann, 06.07.–10.07.1998, Konferenz Mathematical Theory of Networks and Systems, Padua, Italien; Eingeladene Vorträge: a) A behaviour approach for the numerical treatment of variable coefficient descriptor systems. b) Numerical computation of deflating subspaces of embedded generalized Hamiltonian and symplectic pencils.

V. Mehrmann, 23.07.1998, Mathematisches Kolloquium, Universität Bayreuth; Vortrag: Numerische Methoden für Linear Quadratische und H_∞ Steuerungsprobleme.

V. Mehrmann, 26.10.1998, Mathematisches Kolloquium, BUGH Wuppertal; Vortrag: Differentiell-algebraische Gleichungen: Modellierung, Analysis, Simulation und Software.

R. Schneider, Juli–Okt. 1998, Universidad de Concepcion, Chile, (3 Monate) Gastwissenschaftler gefördert durch ein Projekt des chilenischen Wissenschaftsministeriums, FONDAP.

F. Tröltzsch, 06.02.1998, DFG-Workshop, TU Dresden; Vortrag: Optimal gesteuerte Abkühlung von Stahl — einige abgeleitete mathematische Probleme.

F. Tröltzsch, 18.06.–23.06.1998, Conf. on Control of Distributed Parameter and Stochastic Systems, Hangzhou, China; Vortrag: On regular Lagrange multipliers for some parabolic control problems with state-constraints.

F. Tröltzsch, 05.11.1998, DFG-Berichtskolloquium, Bildungszentrum Rolduc; Vortrag: Eine schnelle Lösungstechnik zur Optimierung der Kühlung von Profilstählen in Echtzeit.

F. Tröltzsch, 19.05.1998, TU Bergakademie Freiberg; Kolloquiumsvortrag: Zur numerischen Analysis von Optimalsteuerungsproblemen bei semilinearen elliptischen und parabolischen Gleichungen.

F. Tröltzsch, 11.06.1998, Chinesische Akademie der Wissenschaften Beijing; Kolloquiumsvortrag: On a Lagrange-Newton method for the optimal control of semilinear elliptic and parabolic equations.

R. A. Römer, 07.07.1998, Universität Leipzig; eingeladener Vortrag: Das Anderson-Modell der Lokalisierung als Herausforderung für numerische Eigenwertlöser.

R. A. Römer, 03.12.1998, MPI-PKS Dresden; eingeladener Vortrag: Disordered quantum systems with interactions.

Th. Vojta, 14.07.1998, Universität Karlsruhe; Vortrag: Nonanalytic behavior of the spin susceptibility and the consequences.

Th. Vojta, 21.07.1998–26.07.1998, 20th International Conference on Statistical Physics (Statphys20), Paris, Frankreich.

Th. Vojta, 01.09.1998–6.9.1998, Conference on Computational Physics, Granada, Spanien; Vortrag: Computer simulation of disordered interacting electrons.

K.H. Hoffmann, 15.04.–18.04.1998, Prag, Tschechische Republik.

K.H. Hoffmann, 10.05.–17.05.1998, Pereslavl, Russische Föderation.

P. Blaudeck , 10.05.–17.05.1998, Pereslavl, Russische Föderation.

K.H. Hoffmann, 20.07.–25.07.1998, Paris, Frankreich.

K.H. Hoffmann, 02.09.–05.09.1998, Grenada, Spanien.

M. Schreiber, 23.04.1998, Institut für Theoretische Physik, Heinrich–Heine–Universität Düsseldorf; Kolloquiumsvortrag: Lokalisierung elektronischer Zustände in ungeordneten Materialien.

M. Schreiber, 15.05.1998, MPI für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig; Institutskolloquium-Vortrag: Localization of electronic states in disordered materials.

M. Schreiber, 23.05.–28.05.1998, 2nd TMR Meeting Phase-Coherent Dynamics in Hybrid Nanostructures, Ioannina, Griechenland; Vortrag: Do interactions enhance or reduce transport in a disordered electron system?

M. Schreiber, 14.07.1998, SFB 383 Miniworkshop Two (or more) interacting particles in a disordered environment, Marburg; Vortrag: Interaction-dependent enhancement of the localization length for two interacting particles in a one-dimensional random potential.

M. Schreiber, 14.07.–17.07.1998, International Conference Percolation and disordered systems, Schloß Rauischholzhausen, Giessen; Vortrag: Do interactions enhance or reduce transport in a disordered electron system?

M. Schreiber, 03.09.–06.09.1998, Conference on Computational Physics (CCP-1998), Granada, Spanien; Vortrag: Multifractal analysis of electronic states at the metal-insulator transition in disordered materials.

M. Schreiber, 06.09.–10.09.1998, Departamento de Fisica, Universidad de Murcia, Spanien; Seminarvortrag: Do interactions enhance or reduce transport in a disordered electron system?

M. Schreiber, 22.09.–24.09.1998, 34. Symposium für Theoretische Chemie, Gwatt, Schweiz.

M. Schreiber, 24.09.–26.09.1998, Institut de Physique Appliquee, Ecole Polytechnique Federal, Lausanne, Schweiz.

M. Schreiber, 23.10.–24.10.1998, Klausurtagung des Innovationskollegs Methoden und Materialsysteme für den Nanometerbereich, Großbothen; Vortrag: Theorie des elektronischen Transports in Mikrostrukturen.

M. Schreiber, 13.11.–15.11.1998, SPQK-Symposium Elektronen in Quasikristallen, Bad Elster.

U.-J. Görke, 27.05.1998, IBNM der TU Hannover; Vortrag: Parameteridentifikation elastisch-plastischer Deformationsgesetze unter Einsatz des FEM-Programmes PMEP für Parallelrechner.

R. Kreißig, U.-J. Görke und U. Benedix, 04.06.1998, Arbeitstagung der Forschergruppe "Identifikation und Optimierung komplexer Modelle auf der Basis analytischer Sensitivitätsberechnungen" der TU Dresden, Kriebstein bei Mittweida; Vortrag: Halbanalytische Sensitivitätsanalyse im Rahmen der Parameteridentifikation.

U.-J. Görke, U. Benedix, A. Bucher und R. Kreißig, 22.-24.06.1998, 6. Workshop Numerische Methoden der Plastomechanik des Institutes für Mechanik der TU Hannover, Neustadt am Rübenberge; Vortrag: Einige Erfahrungen mit der Identifikation von Materialparametern als schlecht gestelltes inverses Problem.

R. Kreißig, 15.09.1998, TU Dresden, Vortrag: Numerische Methoden für die Parameteridentifikation.

R. Kreißig, 16.10.1998, GAMM Fachausschuss Materialtheorie, Technische Universität München/Garching; Vortrag: Parameteridentifikation inelastischer Deformationsgesetze.

Th. Frank, June 08.–12., 1998, ICMF 1998 — 3rd International Conference on Multiphase Flow, Lyon, France; Vortrag: Lagrangian Prediction of Disperse Gas–Particle Flow in Cyclon Separators.

1999

M. Jung, 02.02.1999, Kolloquium, Fachbereich Mathematik, Universität Kaiserslautern; Vortrag: Effiziente parallele Algorithmen zur Berechnung magnetischer Felder.

M. Jung, 07.–13.02.1999, Tagung „Mathematische Analyse von FEM für Probleme in der Mechanik“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach.

A. Meyer, 07.–13.2.1999, Tagung „Math. Analyse von FEM für Probleme in der Mechanik“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach.

A. Meyer, 31.5.–4.6.1999, Universität Leeds, UK.

A. Meyer, 2./3. November 1999, Workshop Paralleles Rechnen, Universität Freiburg; Vortrag: Parallele Realisierung von Finite Elemente Simulationen durch Gebietszerlegung.

A. Meyer, 20.–25. März 1999, 3. Euroconference on Parallel and Distributed Computing for Computational Mechanics, Weimar; Vorlesung: Modern Hierarchical Preconditioners: I - Basic Tools.

A. Meyer, 20.–25. März 1999, 3. Euroconference on Parallel and Distributed Computing for Computational Mechanics, Weimar; Vorlesung: Modern Hierarchical Preconditioners: II - Examples on Higher Order Elements.

U. Reichel, 20.–25. März 1999, 3. Euroconference on Parallel and Distributed Computing for Computational Mechanics, Weimar; Vortrag: 2D modelling of consolidation of soft soils using parallel finite element methods.

M. Jung, 22.03.1999, Institut für Wissenschaftliches Rechnen, Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften, Technische Universität Dresden; Vortrag: Effiziente parallele Iterationsverfahren für Finite-Elemente-Gleichungssysteme.

G. Kunert, 23.04.1999, TU Bergakademie Freiberg, 5. Südostdeutsches Kolloqium zur Numerik; Vortrag: A posteriori error estimation for anisotropic finite element meshes.

M. Jung, 30.05.–05.06.1999, Tagung „Schnelle Löser für partielle Differentialgleichungen“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach; Vortrag: Comparison of parallel multilevel solvers for elliptic boundary value problems.

A. Meyer, 29.6.1999, Universität Halle; Vortrag: Parallele Lösung von Finite Elemente Gleichungen via DD–Data–Splitting.

Th. Apel, 15.–16.06.1999, BTU Cottbus; Vortrag: Anisotrope finite Elemente: lokale Abschätzungen und Anwendungen.

Th. Apel, 22.–25.06.1999, MAFELAP'99, London, UK; Vorträge: a) Anisotropic finite elements: local estimates and applications.
b) Anisotropic mesh grading for the Stokes problem in domains with edges.

G. Kunert, 22.–25.06.1999, MAFELAP'99, London, UK; Vortrag: A posteriori error estimation for anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes.

Th. Apel, 25.06.–28.06.1999 und 02.07.–06.07.1999, Universität Leeds, UK.

Th. Apel, 29.06.–02.07.1999, 18th Biennial Conference on Numerical Analysis, Dundee, UK; Vortrag: Anisotropic mesh grading for the Stokes problem in domains with edges.

Th. Apel, 20.–23.09.1999, EPSICODE'99, Schloß Wendgräben bei Magdeburg; Vortrag: Anisotropic mesh grading for the Stokes problem in domains with edges.

M. Jung, 27.–30.09.1999, Sixth European Multigrid Conference, Universität Gent, Belgien; Vortrag: Coupling of multilevel finite elements with boundary elements via fictitious domains (gemeinsamer Vortrag mit O. Steinbach, Universität Stuttgart).

M. Jung, 04.–10.10.1999, University of Leeds, School of Computer Studies, Großbritannien; Vortrag: Some classes of iterative solvers for elliptic partial differential equations.

Th. Apel, 10.–11.10.1999, TU Clausthal; Vortrag: Anisotrope finite Elemente: lokale Abschätzungen und Anwendungen.

G. Kunert, 2.–5.11.1999, Arbeitsbersuch bei Prof. Monique Dauge, Univerität Rennes, Frankreich; Vortrag: A posteriori error estimation for anisotropic tetrahedral finite element meshes.

Th. Apel, 08.12.1999, Universität Leipzig; Vortrag: Anisotrope finite Elemente: lokale Abschätzungen und Anwendungen.

G. Globisch, 12. Januar 1999, Fachhochschule Gelsenkirchen, Fachbereich Maschinenbau, Abteilung Bocholt, Bocholt; Eingeladener Vortrag: Finite-Elemente-Simulationen unter ingenieurtechnischen Gesichtspunkten.

G. Globisch, March 8–March 9, 1999, Association of Commonwealth Universities (ACU), University of London, United Kingdom; Invited Lecture: Parallel grid generation for finite element simulations.

G. Globisch, 18. März 1999, Zentrum für Technomathematik, Fachbereich Mathematik und Informatik, Universität Bremen, Bremen; Eingeladener Vortrag: Durchgängig parallele Finite Elemente Simulationen über unstrukturierten Gittern.

G. Globisch, 23. April 1999, 5. Südostdeutsches Kolloquium zur Numerischen Mathematik, Technische Universität Bergakademie Freiberg, Freiberg; Vortrag: Hierarchisch Vorkonditionieren ueber unstrukturierten lokal feinen Gittern.

G. Globisch, 30. November 1999, Multimedia Software GmbH, Deutsche Telekom, Dresden; Eingeladener Vortrag: Anwendungen paralleler Finite Elemente Simulationen und MetaProgrammierung.

V. Mehrmann, 01.03.–02.03.1999, Workshop „Partiell differentiell–algebraische Systeme und Ihre Anwendung“, Universität Halle-Wittenberg; Eingeladener Vortrag: Analysis und Numerik heterogener Systeme von partiellen, gewöhnlichen und algebraischen Gleichungen.

V. Mehrmann, 26.05.–28.05.1999, Konferenz „Scientific Computing in Chemical Engineering“, TU Hamburg-Harburg; Eingeladener Vortrag: Numerical solution of variable coefficient DAEs and descriptor Systems.

V. Mehrmann, 15.01.1999, Mathematisches Kolloqium, Friedrich–Schiller–Universität Jena; Vortrag: Analysis und Numerik von heterogenen Systemen mit algebraischen Nebenbedingungen.

V. Mehrmann, 08.03.1999, Graduate Course in Numerical Analysis, Katholische Universität Leuven, Belgien; Vortrag: DAE and ODE techniques for control problems.

V. Mehrmann, 01.11.1999, Seminar for Applied Mathematics, ETH Zürich, Schweiz; Vortrag: Numerische Lösung strukturierter Eigenwertprobleme aus der Regelungstechnik und Strukturmechanik.

V. Mehrmann, 17.12.1999, Forschungsseminar Algebro–Differentialgleichungen, Humboldt Universität Berlin; Vortrag: Regularisierung und Indexreduktion bei differentiell–algebraischen Gleichungen.

Th. Penzl, Januar bis Dezember 1999, Postdoktorandenstipendium des DAAD verbunden mit Forschungsaufenthalt an der University of Calgary, Kanada.

M. Bollhöfer, September 1999 bis Februar 2000, Forschungsstipendium BO16 80/1-1 der Deutschen Forschungsgemeinschaft verbunden mit einem Forschungsaufenthalt in den USA; Thema des Forschungsstipendiums: "Adaptive parallele Vorkonditionierungstechniken für große unsymmetrische Systeme."

M. Bollhöfer, 24.06.1999, TU Bergakademie Freiberg; Eingeladener Vortrag: Ein neuer Zugang zu Algebraischen Multilevelmethoden basierend auf schwach besetzten approximativen Inversen.

R. Schneider, 30.8.–03.09.1999, Polytecnico Torino (im Rahmen eines VIGONI Projektes), Italien.

R. Schneider, 09.09.–30.09.1999, University of New South Wales, Sydney, Australien.

F. Tröltzsch, March 18–20, 1999, Conf. MODE 7, Orleans, Frankreich; Eingeladener Vortrag: Second order optimality conditions and numerical analysis of optimal control problems for semilinear elliptic and parabolic equations.

F. Tröltzsch, 21.–23. April 1999, DFG-Workshop Stabilität und Sensitivität stetiger Optimierungs- und Steuerungsprobleme, Burg; Vortrag: Some remarks on second order sufficient optimality conditions for nonlinear elliptic and parabolic control problems.

F. Tröltzsch, März 1999, Conference SIGOPT, Trier; Vortrag: On two numerical methods for nonlinear parabolic control problems.

F. Tröltzsch, 02.06.1999, TU Dresden, Inst. für Numerische Mathematik; Kolloquiumsvortrag: Numerische Analysis von Optimalsteuerungsproblemen bei semilinearen elliptischen und parabolischen Gleichungen.

F. Tröltzsch, Oktober 1999, Universität Graz, Österreich; Kolloquiumsvortrag: Über die augmentierte Lagrange-SQP-Methode für eine Klasse von Optimalsteuerungsproblemen.

M. Trams, 25./26. März 1999, 2. Workshop Cluster Computing, Universität Karlsruhe; Vortrag: An Advanced PCI-SCI Bridge With VIA Support.

S. Schindler, 7. Oktober 1999, PASA'99 5. Workshop Parallele Systeme und Algorithmen, Jena; Vortrag: Multiple Devices Under MPICH.

M. Trams, 02.–03. September 1999, SCI-Europe'99, Euro-Par'99, Toulouse, Frankreich; Vortrag: A New Generic and Reconfigurable PCI-SCI Bridge.

W. Rehm, 4. März 1999, Universität Hannover, Institut für Computersysteme und Betriebssysteme, Invited Lecture: Parallel Computers With Commodity PCs.

W. Rehm, 9. März 1999, Westsächsische Fachhochschule Zwickau, Lehrstuhls Rechnerarchitektur, Vortrag: Parallelrechner mit handelsüblichen PCs.

W. Rehm, 25./26. März 1999, 2. Workshop Cluster Computing, Universität Karlsruhe; Podiumsdiskussion: Nicht nur die Vision zählt, sondern die Alltagstauglichkeit: Wie steht es mit dem Open System Cluster Paradigm?

C. Dinkelmann, 25./26. März 1999, 2. Workshop Cluster Computing, Universität Karlsruhe; Vortrag: Eine Konfigurations- und Managementlösung für ein dediziertes Linux-Cluster.

R. A. Römer, 06.05.1999, Universität Hannover; eingeladener Vortrag: Der unordnungs-induzierte Metall-Isolator-Übergang.

R. A. Römer, 26.06.1999, Korrespondenzzirkel Mathematik, Johannes-Kepler-Gymnasium, Chemnitz; eingeladener Vortrag: Fraktale.

V. Uski, 1999, MPI-PKS Dresden, regelmäßige Aufenthalte.

Th. Vojta, 22.03.1999–26.03.1999, Frühjahrstagung der DPG, Münster; Vortrag: Influence of locally ordered islands on a quantum phase transition.

F. Epperlein, 22.03.1999 – 26.03.1999, Frühjahrstagung der DPG, Münster; Vortrag: Do interactions increase or reduce the conductance of disordered electrons? It depends!

S. Kilina, 22.03.1999 – 26.03.1999, Frühjahrstagung der DPG, Münster; Vortrag: Transport properties of disordered interacting spinful electrons;

Th. Vojta, 28.07.1999–03.08.1999, International Conference on Localization, Hamburg; Vortrag: Quantum critical behavior of itinerant ferromagnets.

Th. Vojta, 07.09.1999–10.09.1999, 8th International Conference on Hopping and Related Phenomena, Murcia, Spanien; Vortrag: From localization to delocalization in the quantum Coulomb glass.

Th. Vojta, 13.10.1999–15.10.1999, 225th WE-Heraeus Seminar on Electron transport in reduced dimensions, Bad Honnef.

Th. Vojta, 13.12.1999–15.12.1999, 227th WE-Heraeus Seminar on Microscopic Theories of Phase Transitions: Quantum versus Thermal Fluctuations, Bad Honnef.

A. Franz, 20.03.–28.03.1999, Workshop Differential Equations and Physics in Fractals, Cambridge, England.

C. Schulzky, 20.03.–28.03.1999, Workshop Differential Equations and Physics in Fractals, Cambridge, England.

J. Burzler, 18.04.–23.04.1999, Il Ciocco, Italien.

K. H. Hoffmann, 18.04.–23.04.1999, Il Ciocco, Italien.

C. Schulzky, 18.04.–23.04.1999, Il Ciocco, Italien.

K. H. Hoffmann, 10.06.-11.06.1999, Bonn.

M. Schaller, 04.07.–01.08.1999, Telluride/San Diego, USA.

K. H. Hoffmann, 10.08.–15.08.1999, Budapest, Ungarn.

K. H. Hoffmann, 18.11.–19.11.1999, Hohenstein-Ernstthal.

B. Mehlig, 09/99, Royal Holloway College, London, UK.

B. Mehlig, 09/99, Dep. of Applied Mathematics, Bristol University, UK; Seminarvortrag: Statistical properties of eigenvectors in non-Hermitian random matrix ensembles.

B. Mehlig, 10/99, Universität Freiburg; SFB-Seminarvortrag: Irregular dynamics in classical and quantum systems.

M. Schreiber, 10.01.–15.01.1999, International Workshop Beyond Quasiperiodicity: Complex Structures and Dynamics, Dresden; Vortrag: Electronic States in Quasicrystals.

M. Schreiber, 20.01.–23.01.1999, International Workshop Beyond Quasiperiodicity: Complex Structures and Dynamics, Dresden; Vorträge: Localisation of Electronic States in Disordered Materials; Quasicrystals: Structure and Material Properties.

M. Schreiber, 25.01.–26.01.1999, Universität Regensburg; Physikalisches Kolloquium, Vortrag: Lokalisierung, Multifraktalität und Wechselwirkung bei Elektronen in ungeordneten Festkörpern: Ergebnisse und offene Fragen!

M. Schreiber, 11.02.1999, Universität Karlsruhe; Theoretisch-physikalisches Kolloquium, Vortrag: Do interactions enhance or reduce transport in a disordered electron system?

M. Schreiber, 12.02.1999, Eberhard-Karls-Universität Tübingen; Vortragsreihe Computational Physics, Vortrag: Lokalisierung, Multifraktalität und Wechselwirkungseffekte bei Elektronen in ungeordneten Festkörpern.

M. Schreiber, 01.03.–02.03.1999, SPQK-Kolloquium, Seeheim.

M. Schreiber, 08.03.–09.03.1999, SPP-Kolloquium, Würzburg.

M. Schreiber, 22.03.–26.03.1999, DPG-Frühjahrstagung des Arbeitskreises Festkörperphysik, Münster.

M. Schreiber, 11.05.–15.05.1999, International Workshop Dynamics of Complex Systems, Dresden; Vortrag: Interacting Electrons in a Random Potential.

M. Schreiber, 29.07.–02.08.1999, International Conference Localization 1999, Hamburg.

M. Schreiber, 13.09.–15.09.1999, 35. Symposium für Theoretische Chemie, Freiberg.

M. Schreiber, 05.10.–07.10.1999, Abschluß-Symposium INK2 Methods and materials for the nanometer regime, Schöneck; Vortrag: Electronic transport.

M. Schreiber, 14.11.–15.11.1999, Universität Bonn; Theoretisches Seminar, Vortrag: Electronic States in Disordered Materials.

M. Schreiber, 15.11.1999, MPI für Physik komplexer Systeme, Dresden

U.-J. Görke, 04.03.1999, TU BA Freiberg; Vortrag: Parameteridentifikation elastisch-plastischer Deformationsgesetze unter Einsatz des FEM-Programms PMEP für Parallelrechner.

A. Bucher, U.-J. Görke, U. Benedix und R. Kreißig, 29.–31.03.1999, Euromech-Symposium 394 “Theory and Numerics of Anisotropic Materials at Finite Strains”, Graz, Österreich; Vortrag: Development of a generalized material interface for the simulation of finite elasto-plastic deformations.

U.-J. Görke und A. Bucher, 11.04.1999, Universiteé de Franche-Comté Besancon, Frankreich.

U.-J. Görke und A. Bucher, 12.–15.04.1999, GAMM-Jahrestagung 1999, Metz, Frankreich.

2000

G. Kunert, 21.–23.1.2000 GAMM–Workshop „Adaptive Methods“, Kiel; Vortrag: Error estimation on anisotropic finite element meshes.

G. Kunert, 09.–10.03.2000, Workshop „Adaptive FEM in Computational Mechanics“, Universität Hannover.

A. Meyer, 11.05.2000, Graduiertenkolleg Universität Magdeburg; Vortrag: Parallele Lösung von Finite Elemente Gleichungen via DD–Data–Splitting.

A. Meyer, 25.04.2000, TU Dresden; Vortrag: Parallele Lösung von Finite Elemente Gleichungen via DD–Data–Splitting.

A. Meyer, 04.–07.9.2000, 239. WE–Heraeus–Seminar, Modelling and Algorithms for Problems in Solid Mechanics, Bad Honnef.

Th. Apel, 03.–05.02.2000, GAMM-Seminar, MPI Leipzig.

Th. Apel, 16.–23.02.2000, Universität Leeds, UK.

Th. Apel, 13.–18.03.2000, Universität Linz, Österreich.

Th. Apel, 27.06.–02.07.2000, Finite Element Methods for 3D Problems, Jyväskylä, Finnland; Vortrag: Error estimates for finite element methods with anisotropic meshes.

Th. Apel, 06.–18.08.2000, Universität Leeds, UK.

Th. Apel, 15.08.2000, Universität Manchester, UK; Vortrag: Anisotropic finite elements: local estimates and applications.

Th. Apel, 04.–07.09.2000, 239. WE-Heraeus-Seminar "Modelling and Algorithms for Problems in Solid Mechanics", Bad Honnef; Vortrag: Multigrid methods for anisotropic edge refinement.

G. Kunert, 04.–07.9.2000, 239. WE Heraeus-Seminar, Bad Honnef.

Th. Apel, 18.–22.09.2000, Jahrestagung der DMV, TU Dresden; Vortrag: Anisotrope Finite-Elemente-Diskretisierungen.

M. Jung, 18.–22.09.2000, DMV-Tagung, Technische Universität Dresden; Vortrag: Multilevel preconditioning operators on locally modified grids (gemeinsamer Vortrag mit A. M. Matsokin, S. V. Nepomnyaschikh, Yu. A. Tkachov, Sibirische Abteilung der Russischen Akademie der Wissenschaften, Nowosibirsk).

Th. Apel, 25.–29.10.2000, Universität Lausanne, Schweiz; Vortrag: Error estimates for finite element methods with anisotropic meshes.

Th. Apel, 22.–24.11.2000, Workshop "3D-Singularities in Elasticity", Universität Karlsruhe; Vortrag: Computation of 3D vertex singularies by using finite elements.

V. Mehrmann, 13.03.–15.03.2000, 5. Workshop über Deskriptorsysteme, Universität GH Paderborn; Eingeladener Vortrag: Indexreduktion durch Erweiterung.

V. Mehrmann, 19.06.–23.06.2000, Mathematical Theory of Networks and Systems, MTNS, Perpignan, Frankreich; Eingeladener Vortrag: Numerical solution of large scale structured eigenvalue problems.

V. Mehrmann, 04.09.–08.09.2000, 9th NUMDIFF conference, Universität Halle-Wittenberg; Eingeladener Vortrag: Control of Heterogeneous Systems.

M. Bollhöfer; 04.06.2000–11.06.2000, Gastaufenthalt am Cerfacs auf Einladung von Prof. Iain Duff in Toulouse, Frankreich.

M. Bollhöfer, 26.–27. Juni 2000, Workshop "Algebraic Multigrid Methods" des SFB F013 "Numerical and Symbolic Scientific Computing" in St. Wolfgang, Österreich; Eingeladener Vortrag: AMG Preconditioners for Sparse Approximate Inverse Matrices.

M. Bollhöfer, 06. Juli 2000, TU Hamburg–Harburg; Eingeladener Vortrag: AMG Techniken für Vorkonditionierer basierend auf schwach besetzten Approximativen Inversen.

M. Bollhöfer, 09. Februar 2000, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, USA; Vortrag: On the Relations Between ILUs and Sparse Approximate Inverses and Applications.

M. Bollhöfer, 16. Februar 2000, Stanford University, Palo Alto, USA; Vortrag: On the Relations Between *ILU*s and Sparse Approximate Inverses and Applications.

M. Bollhöfer, 18. Februar 2000, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, USA; Vortrag: On the Relations Between *ILU*s and Sparse Approximate Inverses and Applications.

M. Bollhöfer, 7. Juni 2000, Cerfacs, Toulouse, Frankreich; Vortrag: ILUs And Factored Sparse Approximate.

R. Schneider, 14.05.–24.05.2000 Morning Side Center for Mathematics, Academy of Science, Peking, China.

F. Tröltzsch, May 8–12, 2000, Workshop "Fast solution of discretized optimization problems", WIAS Berlin; Eingeladener Vortrag: Some numerical methods of optimization in PDEs.

F. Tröltzsch, June 26–30, 2000, SFB Conf. on Inverse Problems, Strobl, Österreich; Eingeladener Vortrag: On numerical techniques for the optimal control of semilinear PDEs.

F. Tröltzsch, March 27–31, 2000, Internat. Conf. on High Performance Scientific Computing, Hanoi, Vietnam; Vortrag: Some numerical methods to solve optimal control problems for PDEs.

F. Tröltzsch, 17.–22. September 2000, DMV-Jahrestagung, TU Dresden; Vortrag: Some applications of generalized equations to optimal control problems of PDEs.

F. Tröltzsch, 24.11.2000, Friedrich Schiller Universität Jena; Kolloquiumsvortrag: Optimierung bei partiellen Differentialgleichungen — Theorie und Anwendungen.

F. Tröltzsch, 07.12.2000, TU Berlin; Kolloquiumsvortrag/Antrittsvorlesung: Optimalsteuerung bei partiellen Differentialgleichungen — wissenschaftliches Rechnen und angewandte Funktionalanalysis.

A. Rösch, 04.06.–10.06.2000, Workshop "Optimale Steuerung komplexer dynamischer Strukturen", Oberwolfach, Vortrag: Fast and Stable Methods for the Identification of Nonlinear Heat Transfer Laws.

A. Rösch, 28.06–30.06.2000, "SFB Conference on Inverse Problems" Strobl, Österreich; Vortrag: Fast and stable methods for the identification of nonlinear heat transfer laws.

A. Rösch, 18.09.–22.09.2000, "Jahrestagung der DMV", TU Dresden; Vortrag: Primal-Dual Strategy for Constrained Optimal Control Problems.

M. Trams, 01.–05. Mai 2000, PC-NOW 2000 International Workshop on Personal Computer based Networks of Workstations, International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS 2000), Cancun, Mexico; Vortrag: Memory Management in a combined VIA/SCI Hardware.

F. Seifert, 14.–17. Mai 2000, Asia-Pacific International Symposium on Cluster Computing (APSCC'2000), Fourth International Conference/Exhibition on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPCAsia2000), Beijing, China; Vortrag: An optimized MPI library for VIA/SCI cards.

F. Seifert, 28.–29. August 2000, SCI-Europe 2000, Euro-Par 2000, TU München; Vortrag: Comparing MPI Performance of SCI and VIA.

V. Uski, 14.02.–28.02.2000, Universität Freiburg.

V. Uski, 07.07.2000, Universität Freiburg; eingeladener Vortrag: Wave function statistics in disordered conductors.

R. A. Römer, 28.06.2000, Fachhochschule Jena; eingeladener Vortrag: Das Wechselspiel von Unordnung und elektronischer Korrelation in Halbleiterstrukturen.

R. A. Römer, 06.12.2000, Philipps-Universität Marburg; eingeladener Vortrag: Excitons, trions and the AB effect in semiconductor nanorings.

R. A. Römer, 16.05.2000, Universität Ulm; eingeladener Vortrag: The Aharonov-Bohm effect for an exciton.

V. Uski, 20.11.–08.12.2000, Universität Freiburg.

Th. Vojta, 17.6.2000–23.06.2000, Theoretical Physics, University of Oxford, UK.

Th. Vojta, 27.03.2000–31.3.2000, 64. Frühjahrstagung der DPG, Regensburg; Vortrag: Rare regions, local moments, and annealed disorder: A novel mechanism for metal-insulator transitions.

Th. Vojta, 15.05.2000, Universität Karlsruhe, Vortrag: Rare regions, local moments and annealed disorder at quantum phase transitions.

Th. Vojta, 06.06.2000 , Universität Erlangen; Vortrag: Do interactions enhance or reduce transport in a disordered electronic system: It depends!

Th. Vojta, 17.06.2000 – 23.06.2000, Theoretical Physics, University of Oxford (UK), Vortrag: Quantum critical behavior of itinerant ferromagnets.

Th. Vojta, 05.07.2000, Universität Halle; Vortrag: Quantum phase transitions in electronic systems.

Th. Vojta, 11.07.2000, Universität Regensburg; Vortrag: Quantum phase transitions in electronic systems.

Th. Vojta, 14.11.2000, Universität Augsburg; Vortrag: The ferromagnetic quantum phase transition.

Th. Vojta, 12.12.2000, Universität Magdeburg; Vortrag: Quantum phase transitions.

K.H. Hoffmann, 11.03.–14.03.2000, Leiden, Niederlande.

K.H. Hoffmann, 18.06.–21.06.2000, Udine, Italien.

M. Schaller, 19.07.–22.08.2000, Telluride/San Diego, USA.

A. Franz, 19.09.–24.09.2000, First IMA Conference on Fractal Geometry, Leicester, England.

K. H. Hoffmann, 16.10.–20.10.2000, Odense/Kopenhagen, Dänemark.

B. Sicre, 09.12.–15.12.2000, TU Bukarest, Rumänien.

K. H. Hoffmann, 11.12.–15.12.2000, Berlin.

B. Mehlig, 01/2000, Royal Holloway College, London, UK; Seminarvortrag: Statistical properties of eigenvectors in non-Hermitian random matrix ensembles.

B. Mehlig, 01/2000, Universität Freiburg; Kolloquiumsvortrag: Quantum Chaos.

B. Mehlig, 02/2000, Universität Ulm; Theorieseminar-Vortrag: Random matrix theory in classical mechanics?

B. Mehlig, 02/2000, SCIENCE Workshop Mesoscopics 2000, Universität Hamburg; Vortrag: Eigenvector correlations in non-Hermitian random matrix ensembles.

B. Mehlig, 04/2000, Int. Conf. New Directions in Mesoscopic Physics, CNRS Strasbourg, Frankreich; Vortrag: Eigenvector correlations in non-Hermitian random matrix ensembles.

B. Mehlig, 01.04.-05.04.2000, Strathclyde University, Glasgow, UK.

B. Mehlig, 27.05.-31.05.2000, Chalmers/Göteborg University, Schweden; Seminarvortrag: Random matrix theory in classical mechanics?

B. Mehlig, 22.06.-30.06.2000, University of Oxford, Oxford, UK.

B. Mehlig, 07/2000, Technische Hochschule Lund, Schweden; Seminarvortrag: Eigenvector correlations in non-Hermitian classical and quantum systems.

B. Mehlig, 08/2000, Technische Hochschule Lund, Schweden.

B. Mehlig, 11/2000, Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Dresden; Seminarvortrag: Eigenvector correlations in non-Hermitian random matrix ensembles.

B. Mehlig, 12/2000, Universität Marburg; Seminarvortrag: Eigenvector correlations in non-Hermitian classical and quantum systems.

M. Schreiber, 03.02.–04.02.2000, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Oberseminar über Fragen der Theoretischen Festkörperphysik; Vortrag: Elektronische Zustände in ungeordneten Systemen.

M. Schreiber, 14.02.–16.02.2000, SPP-Kolloquium, Bornheim-Walberberg.

M. Schreiber, 15.02.2000, Hahn-Meitner-Institut, Berlin; Seminarvortrag: Elektronische Zustände und Phasenübergänge in ungeordneten und mesoskopischen Systemen.

M. Schreiber, 20.02.–24.02.2000, 11th International Winterschool on New Developments in Solid State Physics of Low-Dimensional Systems: Fundamentals and Applications, Mauterndorf, Österreich.

M. Schreiber, 12.03.–15.03.2000, 18th General Conference Condensed Matter Division EPS, Montreux, Schweiz.

M. Schreiber, 27.03.–31.03.2000, DPG-Frühjahrstagung des Arbeitskreises Festkörperphysik, Regensburg.

M. Schreiber, 06.04.–08.04.2000, SPP-Kolloquium Quasicrystals, Structure and Physical Properties, Jülich.

M. Schreiber, 28.04.–30.04.2000, 1. SPP-Symposium Quanten-Hall-Systeme ELSTER'00, Bad Elster; Vortrag: Anderson Localisation - An Overview.

M. Schreiber, 15.06.–20.06.2000, International Conference Wave Propagation and Electronic Structure in Disordered Systems, Heraklion, Griechenland; Vortrag: New Results on Anderson Localization.

M. Schreiber, 10.09.–14.09.2000, 36. Symposium für Theoretische Chemie, Litschau, Österreich; Vortrag: Theory of ultrafast photo-induced electron transfer in large systems with dissipation.

M. Schreiber, 06.11.2000, MPI für Physik komplexer Systeme, Dresden; Kolloquiumsvortrag: Correlated Electrons in the Quantum Coulomb Glass and in Parabolic Quantum Dots.

M. Schreiber, 24.11.2000, Kolloquium der Forschergruppe Laboratory astrophysics, Jena; Vortrag: Molecular dynamics simulation of structure, formation and reactivity of molecules and clusters.

R. Kreißig, 17.01.2000, TU Hannover; Vortrag: Parameterschätzung für elastisch-plastische Deformationsgesetze.

D. Michael, 11.03.2000, TU BA Freiberg; Vortrag: Parallelisierung nichtlinearer Randwertaufgaben.

I. Yu Kadashevich, 29.05.2000, Ford Forschungszentrum Aachen; Vortrag: Bauschinger effect and its description in the theory of elasto-plasticity.

U.-J. Görke, 05.–07.06.2000, IV. IASS-IACM Colloquium, Chania-Kreta, Griechenland; Vortrag: Implicit integration of deformation laws for large elasto-plastic deformations.

U.-J. Görke, A. Bucher und U. Benedix, 26.–30.06.2000, 4th Euromech Solid Mechanics Conference, Metz, Frankreich; Vortrag: Sensitivity analysis for the identification of elasto-plastic material parameters in case of large deformations.
Vortrag: Deformation laws for large elasto-plastic deformations considering a substructure of the material and their implementation into a parallel Finite Element code.
Vortrag: Statistical aspects of the identification of material parameters for elasto-plastic models.

I. Yu. Kadashevich, 11.–14.09.2000, ECCOMAS 2000, Barcelona, Spanien; Vortrag: Variation method in the theory of plasticity with cross-links.

I. Yu. Kadashevich, 03.–05.10.2000 TU Dresden; Vortrag: Modellierung der zyklischen elastisch-plastischen Torsion auf der Grundlage einer Mehrflächentheorie mit kinematischen Bindungen.

A. Bucher, 03.–05.10.2000, TU Dresden; Vortrag: Ein Deformationsgesetz zur Berechnung großer elastisch-plastischer Verzerrungen unter Einbeziehung der Substruktur.

2001

Th. Apel, 01.–03.02.2001, 17th GAMM-Seminar on Construction of Grid Generation Algorithms, Universität Leipzig; Vortrag: Anisotropic Meshes for Resolving Edge Singularities and Boundary Layers.

G. Kunert, 01.–03.02.2001, 17th GAMM-Seminar on Construction of Grid Generation Algorithms, Universität Leipzig; Vortrag: Anisotropic mesh construction and error estimation in the finite element method

Th. Apel, 01.–03.02.2001, Universität Innsbruck, Österreich; Vortrag: Anisotrope finite Elemente: lokale Abschätzungen und Anwendungen.

M. Bollhöfer, 19.02.–23.02.2001, Gastdozent beim Kompaktkurs "Iterative Gleichungssystemlöser und parallele Algorithmen". Universität Hamburg–Harburg; 3 Vorträge: a) Präkonditionierung, b) Mehrgitterverfahren, c) Algebraische Mehrgitterverfahren.

R. A. Römer, 31.01.2001, Humboldt Universität Berlin; eingeladener Vortrag: Excitons, trions and the AB effect in semiconductor nanorings.

R. A. Römer, 29.01.2001, Universität Hamburg–Harburg; eingeladener Vortrag: Wavefunction statistics in the Anderson model of localization.

Th. Vojta, 19.02.2001–23.02.2001, Theoretical Physics, University of Oxford, UK.

Th. Vojta, 26.03.01–30.03.01, 65. Frühjahrstagung der DPG Universität Hamburg–Harburg; Vortrag: Enhanced Altshuler-Aronov singularities and Marginal Fermi-Liquid Effects at a Quantum Critical Point.

B. Mehlig, 01/2001, Chalmers/Göteborg University, Schweden.

M. Schreiber, 22.01.–23.01.2001, SPP-Kolloquium Quanten-Hall-Systeme, Bad Honnef.

M. Schreiber, 04.03.–06.03.2001, SPP-Kolloquium Quasikristalle: Struktur und physikalische Eigenschaften, Irsee.

M. Schreiber, 07.03.2001, 2nd Conference Spatial Statistics and Statistical Physics, Wuppertal; Vortrag: Spatial statistics and multifractality of wave functons in disordered materials at the metal-insulator transition.

U. Benedix und R. Kreißig, 12.–15.02.2001, GAMM-Jahrestagung 2001, Zürich, Schweiz; Vortrag: Parameterschätzung für ein nichtlineares Modell.

3.1.4 Qualifikationen

Die Förderung des Sonderforschungsbereichs “Numerische Simulationen auf massiv parallelen Rechnern” trug wesentlich dazu bei, daß auf der Grundlage der gewählten Forschungsthemen die folgenden Qualifikationen im vorliegenden Berichtszeitraum abgeschlossen werden konnten.

3.1.4.1 Studien-, Diplomarbeiten

Sven Beuchler, Experiments with the p–version of the finite element method in the L–shaped domain, Jahresarbeit, Technische Universität Chemnitz, Januar 1999.

Sven Beuchler, Lösungsmethoden bei der p–Version der FEM, Diplomarbeit, Technische Universität Chemnitz, November 1999.

Philipp Cain, Das Anderson-Modell der Lokalisierung mit nicht diagonaler Unordnung, Diplomarbeit, Technische Universität Chemnitz, Dezember 1998.

Carsten Dinkelmann, Implementierung einer effizienten MPI-Schnittstelle für Myrinetkarten auf der Basis von Fast Messages, Diplomarbeit, Technische Universität Chemnitz, in Zusammenarbeit mit der Westsächsischen Hochschule Zwickau (FH), April 1999.

Jörg Dümmler, Entwicklung eines grafischen Front-Ends für CHEMPI, Studienarbeit, Technische Universität Chemnitz, August 2000.

Sergey Grosman: A-posteriori Fehlerschätzung für anisotrope Finite-Elemente-Diskretisierungen, Masterarbeit, Technische Universität Chemnitz, voraussichtlich August 2001.

Thomas Grund, Behandlung eines elliptischen Optimalsteuerungsproblemes mit Maximum–Norm Funktional. Diplomarbeit, Technische Universität Chemnitz, September 1999.

Frank Heinrich, Rekursive Inverse Eigenwertprobleme mit nichteindeutiger Lösung. Diplomarbeit, Technische Universität Chemnitz, April 1999.

Thomas Hertzsch, Numerische Verfahren zur Simulation elektrischer Netzwerke und integrierter Schaltungen. Diplomarbeit, Technische Universität Chemnitz, Februar 1999.

Lars Jordan, Entwicklung eines effizienten Speichermanagementes für das CHEMPI VIA/SCI Device, Studienarbeit, Technische Universität Chemnitz, Oktober 2000.

Torsten Klinkert, Implementierung einer MPI-Kommunikationsbibliothek für WindowsNT, Diplomarbeit, Technische Universität Chemnitz, Dezember 1998.

Steffen König, Numerische Tests zur Finiten Elemente Berechnung von Schalendeformationen bei verschiedenen Parametrisierungen der gleichen Schale, Jahresarbeit, Technische Universität Chemnitz, Oktober 2000.

Kornelia Pietsch: Finite-Elemente-Mortaring nach einer Methode von Nitsche für elliptische Probleme der Ebene, Diplomarbeit, Technische Universität Chemnitz, Mai 2000.

Maharavo Randrianarivony, Stabile Diskretisierungen des Stokes-Problems auf anisotropen Netzen, Masterarbeit, Technische Universität Chemnitz, voraussichtlich April 2001.

Heiko Rhein, Vorkonditionierung beim CGS–Algorithmus durch „downwind“ Knotenpermutation, Diplomarbeit, Technische Universität Chemnitz, Juli 1998.

Thoralf Rübner, Implementation von kollektiven Operationen für CHEMPI, Studienarbeit, Technische Universität Chemnitz, März 2001.

Rita Ruhmer, 3D–Finite–Elemente–Rechnungen und ihre Visualisierung mit Hilfe von OpenGL, Diplomarbeit, Technische Universität Chemnitz, Juni 2000.

Sven Schindler, Entwurf und Implementierung eines ADI-2 Multidevices, Diplomarbeit, Technische Universität Chemnitz, März 1999.

Ralf Schmidt, Entwicklung eines TCP/IP Devices für CHEMPI, Studienarbeit, Technische Universität Chemnitz, Oktober 2000.

Jens Seidel: Eine Auflösungsmethode für das Finite-Elemente-Gleichungssystem bei anisotroper Diskretisierung in der Umgebung einer Kante, Diplomarbeit, Technische Universität Chemnitz, voraussichtlich August 2001.

Friedrich Seifert, Design and Implementation of System Software for Transparent Mode Communication over SCI, Studienarbeit, Technische Universität Chemnitz, Februar 1999.

Friedrich Seifert, Development of system software to integrate the Virtual Interface Architecture (VIA) into the Linux operating system kernel for optimized message passing, Diplomarbeit, Technische Universität Chemnitz, Oktober 1999.

Mario Trams, Design of a system-friendly PCI-SCI bridge with an optimized user-interface Diplomarbeit, Technische Universität Chemnitz, September 1998.

3.1.4.2 Dissertationen, Habilitationen

Habilitationen:

Apel, Thomas, Anisotropic finite elements: Local estimates and applications. Habilitation, Technische Universität Chemnitz, Februar 1999.

Jung, Michael, Einige Klassen paralleler iterativer Auflösungsverfahren. Habilitationsschrift, Technische Universität Chemnitz, Februar 1999.

Mehlig, Bernhard, Chaos and disorder: fluctuations in complex systems. Habilitationsschrift, Technische Universität Chemnitz, Juli 1999.

Rathsfeld, Andreas, Über Waveletalgorithmen für die Randelementmethode. Habilitationsschrift, Technische Universität Chemnitz, Februar 2001.

Römer, Rudolf. A., From Localization to Delocalization in Disordered Systems: Numerical studies of the influence of disorder and many-body interactions on the electronic transport properties of solids. Habilitationsschrift, Technische Universität Chemnitz, April 2000.

Rösch, Arnd, A Gauss-Newton Method for the Identification of Nonlinear Heat Transfer Laws. Habilitationschrift, Technische Universität Chemnitz, eingereicht.

Scherzer, Matthias, Physikalisch und geometrisch nichtlineare Problemstellungen der Festkörper- und Bruchmechanik an Interface-Konfigurationen, Habilitationsschrift, TU Bergakademie Freiberg, Mai 1999.

Vojta, Thomas, Quantum and classical phase transitions in electronic systems. Habilitationsschrift, Technische Universität Chemnitz, Dezember 1999.

Dissertationen:

Benedix, Ulrich, Parameterschätzung für elastisch-plastische Deformationsgesetze bei Berücksichtigung lokaler und globaler Vergleichsgrößen. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, Mai 2000.

Benhammouda, Brahim, Numerical Solution of Large Differential-Algebraic Systems on massively Parallel Computers. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, Juli 1998.

Bucher, Anke, Deformationsgesetze für große elastisch-plastische Verzerrungen unter Berücksichtigung einer Substruktur. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, April 2001.

Epperlein, Frank, Numerische Simulation des Transports in ungeordneten Vielelektronensystemen. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, Juli 1999.

Fachat, Andre, A Comparison of Random Walks with Different Types of Acceptance Probabilities. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, Januar 2001.

Konik, Michael, A fully discrete wavelet Galerkin boundary element method in three dimensions. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, April 2001.

Kunert, Gert, A posteriori error estimation for anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, Januar 1999.

Mehl, Christian, Compatible Lie and Jordan algebras and applications to structured matrices and pencils. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, Dezember 1998.

Milde, Frank, Disorder-induced metal-insulator transition in anisotropic systems. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, Juli 2000.

Penzl, Thilo, Numerische Lösung großer Lyapunovgleichungen. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, Juli 1998.

Perez, Christian, (Mitarbeiter/Gast im SFB im Jahr 2000), M‘etodos de Ondelettes papra Ecuaciones Integrales de Frontera. Dissertation, Universidad de Concepcion, März 2001.

Repetowicz, Przemyslaw, Theoretical investigations of magnetic and electronic properties of quasicrystals. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, Oktober 2000.

Schrader, Uwe, Invers-isotone Diskretisierungsmethoden für invers-isotone linear und quasilineare Zwei-Punkt-Randwertaufgaben. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, Januar 2001.

Schubert, Sven, Random Walks in Complex Systems – Anomalous Relaxation. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, März 1999.

Schulzky, Christian, Anomalous Diffusion and Random Walks on Fractals. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, Juli 2000.

Späth, Peter, Renewed Theory, Interfacing and Visualization of Thermal Lattice Boltzmann Schemes. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, Juni 2000.

Thess, Michael, Parallel multilevel preconditioners for thin shell problems. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, April 1999.

Wassen, Erik: Entwicklung paralleler Algorithmen zur numerischen Simulation von Gas–Partikel–Strömungen unter Berücksichtigung von Partikel–Partikel–Kollisionen. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, Oktober 1998.

3.2 Übersicht über die Veröffentlichungen

3.2.1 Referierte Literatur

Apel, Th., *Anisotropic finite elements, Local estimates and applications.* Advances in Numerical Mathematics. Teubner, Stuttgart, 1999. (Inhaltsgleich mit Habilitationsschrift, TU Chemnitz, 1998.)

Apel, Th., *Interpolation of non-smooth functions on anisotropic finite element meshes.* Math. Modeling Numer. Anal., 33, 1149–1185, 1999.

Apel, Th.; Lube, G., *Anisotropic mesh refinement for a singularly perturbed reaction diffusion model problem.* Appl. Numer. Math., 26:415–433, 1998.

Apel, Th.; Nicaise, S., *The finite element method with anisotropic mesh grading for elliptic problems in domains with corners and edges.* Math. Methods Appl. Sci., 21:519–549, 1998.

Apel, Th.; Nicaise, S.; Schöberl, J., *Crouzeix-Raviart type finite elements on anisotropic meshes.* Angenommen bei Numer. Math.

Apel, Th.; Nicaise, S.; Schöberl, J., *A non-conforming finite element method with anisotropic mesh grading for the Stokes problem in domains with edges.* Angenommen bei IMA Journal of Numerical Analysis.

Arada, N., *Relaxation of optimal control problems in L^p-spaces.* Control Optimization and Calculus of Variations (COCV), 6 (2000), pp. 73–96.

Arada, N.; Raymond, J.-P.; Tröltzsch, F., *On an Augmented Lagrangian SQP method for a class of optimal control problems in Banach spaces.* submitted to Computational Optimization and Applications.

Arada, N.; Raymond, J.-P., *Approximation of optimal control problems with state constraints.* Numerical Functional Analysis and Optimization, 21 (2000), pp. 601–621.

Arada, N.; Raymond, J.-P., *Optimal control problems with mixed control-state constraints.* SIAM Journal on Control and Optimization, 39 (2000), pp. 1391–1407.

Arav, M.; Hershkowitz, D.; Mehrmann, V.; Schneider, H., *The Recursive Inverse Eigenvalue Problem.* SIAM Journal Matrix Analysis and Applications, 22:392–412, 2000.

Baker*, M.; Rehm**, W. (eds.), *Proceedings of the* CLUSTER 2000 – IEEE *International Conference on Cluster Computing.*, November 28 – December 2, University of Technology Chemnitz, Chemnitz, Germany, (ISBN 0-7695-0896-0).
*Publication chair, **Co-Editor (General chair).

Balkanski, D.; Rehm, W.; Simeonov, St.; Trams, M., *Memory Management in a combined* VIA/SCI *Hardware.* in: Proceedings of the PC-NOW 2000, International Workshop on Personal Computer based Networks of Workstations im Rahmen des International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS 2000), 1.–5. Mai 2000, Cancun/Mexico. Springer LNCS Series, (ISSN 0302-9743, ISBN 3-540-67442-X), pp. 4–15.

Barinka, A.; Barsch, T.; Dahlke, S.; Konik, M., *Some Remarks on Quadrature Formulas for Refinable Functions and Wavelets.* erscheint in ZAMM, 2001.

Barinka, A.; Barsch, T.; Dahlke, S.; Konik, M.; Mommer, M., *Quadrature Formulas for Refinable Functions and Wavelets II: Error Analysis.* erscheint in Journal of Computational Analysis and Applications, 2001.

Belitz, D.; Kirkpatrick, T.R.; Narayanan, R.; Vojta, Th., *Transport anomalies and marginal Fermi liquid effects at a quantum critical point.* Phys. Rev. Lett. 85 (2000), 4602–5, cond-mat/0008431.

Belitz, D.; Kirkpatrick, T.R.; Vojta, Th., *Rare regions, local moments, and annealed disorder: A novel mechanism for metal-insulator transitions.* Phys. Rev. Lett. 84 (2000), 5176–9, cond-mat/9910040.

Belitz, D.; Kirkpatrick, T.R.; Vojta, Th., *First order transitions and multicritical points in weak itinerant ferromagnets.* Phys. Rev. Lett. 82 (1999), 4707–10, cond-mat/9812420.

Belitz, D.; Kirkpatrick, T.R.; Millis, A.; Vojta, Th., *Nonanalytic magnetization dependence of the magnon effective mass in itinerant quantum ferromagnets.* Phys. Rev. B 58 (1998), 14155–8, cond-mat/9806168.

Benner, P.; Byers, R.; Faßbender, H.; Mehrmann, V.; Watkins, D., *Cholesky-like factorizations of skew-symmetric matrices.* Electronic Transactions on Numerical Analysis, 11:85–93, 2000.

Biswas, P.; Cain, P.; Römer, R.A.; Schreiber, M., *Off-diagonal disorder in the Anderson model of localization.* phys. stat. sol. (b) 218, 205, 2000.

Bollhöfer, M., *A robust ILU based on monitoring the growth of the inverse factors.* submitted to Lin. Alg. Appl.

Bollhöfer, M.; Mehrmann, V., *Algebraic multilevel methods and sparse approximate inverses.* submitted to SIAM J. Matrix. Anal. Appl.

Bollhöfer, M.; Saad, Y., ILU*s and factorized approximate inverses are strongly related. Part I: Overview of results.* Technical Report umsi–2000-39, Minnesota Supercomputer Institue, University of Minnesota, 2000. submitted to SIAM J. Matrix. Anal. Appl.

Bollhöfer, M.; Saad, Y., ILU*s and factorized approximate inverses are strongly related. Part II: Applications to stabilization.* Technical Report umsi–2000-70, University of Minnesota at Minneapolis, Dep. of Computer Science and Engineering, 2000; submitted to SIAM J. Matrix. Anal. Appl.

Cain, P.; Römer, R.A.; Schreiber, M., *Phase diagram of the three-dimensional Anderson model of localization with random hopping.* Ann. Phys. (Leipzig) 8, SI-33, 1999.

Dahmen, W.; Schneider, R., *Composite wavelet bases for operator equations.* Math. Comp. 68, (1999), 1533–1567.

Dahmen, W.; Schneider, R., *Wavelets on manifolds I. Construction and domain decomposition.* SIAM J. Math. Anal. 31, (1999) , 184–230.

Dahmen, W.; Schneider, R.; Xu, Y., *Nonlinear functionals of wavelet expansions - Adaptive reconstruction and fast evaluation.* Numer. Math. 86, (2000), 40–101.

Diaz-Sanchez, A.; Möbius, A.; Ortugo, M.; Neklioudov, A.; Schreiber, M., *Nonergodic effects in the Coulomb glass.* Specific heat, Phys. Rev. B 62, 8030, 2000.

Eilmes, A.; Grimm, U.; Römer, R.A.; Schreiber, M., *Two interacting particles at a metal-insulator transition.* Eur. Phys. J. B 8, 547, 1999.

Eilmes, A.; Römer, R.A.; Schreiber, M., *The two-dimensional Anderson model of localization with random hopping.* Eur. Phys. J. B 1, 29, 1998.

Eilmes, A.; Römer, R.A.; Schreiber, M., *Exponents of the localization lengths in the bipartite Anderson model with off-diagonal disorder.* Physica B, zur Veröffentlichung angenommen.

Eilmes, A.; Römer, R.A.; Schuster, C.; Schreiber, M., *Two and more interacting particles at a metal-insulator transition.* Phys. Rev. B, zur Veröffentlichung eingereicht.

Elsner, U.; Mehrmann, V.; Milde, F.; Römer, R.A.; Schreiber, M., *The Anderson Model of Localization, A Challenge for Modern Eigenvalue Methods.* SIAM J. Sci. Comp. 20, 2089, 1999.

Epperlein, F.; Kilina, S.; Schreiber, M.; Uldanov, S.; Vojta, Th., *Fock space localization, return probability, and conductance of disordered interacting electrons.* Physica B, zur Veröffentlichung eingereicht.

Epperlein, F.; Vojta, Th.; Schreiber, M., *Crossover from interaction-induced localization to delocalization in disordered electron systems.* Ann. Phys. (Leipzig) 8, SI-61, 1999.

Essex, C.; Schulzky, C.; Franz, A.; Hoffmann, K.H., *Tsallis and Renyi entropies in fractional diffusion and entropy production.* Physica A 284, 299–308, 2000.

Fachat, A.; Hoffmann, K.H.; Franz, A., *Simulated annealing with threshold accepting or Tsallis statistics.* Comp. Phys. Comm. 132, 232 (2000).

Frank, Th., Bernert, K., Schneider, J., *Numerische Untersuchungen der Gas–Partikel–Strömung in symmetrischen Doppelzyklon–Abscheidern.* VDI Berichte, Nr. 1511, 1999.

Franz, A.; Schulzky, C.; Seeger, S.; Hoffmann, K.H., *An efficient implementation of the exact enumeration method for random walks on Sierpinski carpets.* Fractals 8(2): 155-161, 2000.

Franz, A.; Hoffmann, K.H.; Schulzky, C.; Seeger, S., *Random walks on finitely ramified Sierpinski carpets.* Computer Physics Communications 134, 307–316, 2001.

Gagel, F.; Schreiber, M.; Maschke, K., *The quantum Hall effect in finite structures.* Superlattices and Microstructures 23, 593, 1998.

Globisch, G.; Nepomnyaschikh, S.V., *The hierarchical preconditioning on unstructured grids.* Computing 61, No. 4, pp. 307–330, October 1998.

Globisch, G., *The hierarchical preconditioning on unstructured 3D-grids with locally refined regions.* Eingereicht bei Computing.

Grimm, U.; Römer, R.A.; Schliecker, G., *Electronic States in Topologically Disordered Systems.* Ann. Phys. (Leipzig) 7, 389, 1998.

Grimm, U.; Römer, R.A.; Schreiber, M.; Zhong, J.X., *Universal level-spacing statistics in quasiperiodic tight-binding models.* Materials Science and Engineering A 294-296, 564, 2000.

Grund, Th.; Rösch, A., *Optimal control of a linear elliptic equation with a supremum-norm functional.* submitted to Optimization Methods and Software.

Guan, X.-W.; Grimm, U.; Römer, R.A., *Lax Pair Formulation for a Small-Polaron Chain with Integrable Boundaries.* Ann. Phys. (Leipzig) 7, 518, 1998.

Guan, X.-W.; Grimm, U.; Römer, R.A.; Schreiber, M., *Integrable impurities for an open fermion chain.* J. Phys. A, Math. Gen. 33, 3863, 2000.

Harbrecht, H.; Schneider, R., *Wavelet Galerkin Schemes for 2D BEM.* Operator Theory Advances and Applications, 121, (2001), 221–260.

Harbrecht, H.; Paiva, F.; Perez, Chr.; Schneider, R., *Biorthogonal wavelet approximation for the coupling of FEM-BEM.* erscheint in Numer. Math., 2001.

Heise, B.; Jung, M., *Efficiency, scalability, and robustness of parallel multilevel methods for nonlinear partial differential equations.* SIAM Journal on Scientific Computing, 20(2), 553–567, 1999

Hoffmann, K.H.; Blaudeck, P.; Burzler, J., *Optimal piston paths for Diesel engines.* in: S. Sienuitycz und A. De Vos (eds.), Thermodynamics of Energy Conservation and Transport (Springer-Verlag, New York, 2000).

Hoffmann, K.H., *Slow relaxation dynamics – from spin glasses to stochastic optimization.* Comp. Phys. Comm. 121–122, 30 (1999).

Hübner, U.; Seeger, S.; Petersen, S., *Das CLIC–Projekt Planung und Inbetriebnahme eines PC–Clusters.* in: Praxis der Informationsverarbeitung und Kommunikation (PIK), Saur Verlag, München, 2001.

Jung, M.; Rüde, U., *Implicit extrapolation methods for variable coefficient problems.* SIAM Journal on Scientific Computing, 19(4), 1109–1124, 1998.

Jung, M., *Parallel multi-level solvers for elliptic boundary value problems in three-dimensional domains.* in: W. Hackbusch and G. Wittum, (eds.), Multigrid Methods V. Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Bd. 3, Springer-Verlag, pp. 125–139, 1998.

Jung, M.; Nepomnyaschikh, S.V., *Variable additive preconditioning procedures.* Computing, 62, 109–128, 1999.

Jung, M., Jean-François Maitre, *Some remarks on the constant in the strengthened CBS inequality, Estimate for hierarchical finite element discretizations of elasticity problems.* Numerical Methods for Partial Differential Equations, 15(4), 469–487, 1999

Jung, M., Nicaise, S.; Tabka, J., *Some multilevel methods on graded meshes.* Angenommen bei Journal of Computational and Applied Mathematics, 2000.

Jung, M.; Steinbach, O., *A finite element-boundary element algorithm for inhomogeneous boundary value problems.* Eingereicht bei Computing, 2001.

Kilin, D.; Kleinekathöfer, U.; Schreiber, M., *Electron Transfer in Porphyrin Complexes in Different Solvents.* J. Phys. Chem. A 104, 5413, 2000.

Kilin, D.; Schreiber, M., *Decoherence for phase-sensitive relaxation.* J. Lumin. 92, 13, 2000.

Kilin, D.; Schreiber, M., *Influence of phase-sensitive interaction on the decoherence process in molecular systems.* J. Lumin. 76 & 77, 433, 1998.

Kleinekathöfer, U.; Kondov, I.; Schreiber, M., *Perturbative treatment of intercenter coupling in Redfield theory.* Chem. Phys., zur Veröffentlichung angenommen.

Knittel, I., Gagel, F.; Schreiber, M., *Quantum transport and momentum conserving dephasing.* Phys. Rev. B 60, 916, 1999.

Knittel, I.; Schreiber, M., *Partially coherent conductance of laterally quantized quantum wires.* phys. stat. sol. (b) 221, 667, 2000.

Kondov, I.; Kleinekathöfer, U.; Schreiber, M., *Efficiency of different numerical methods for solving Redfield equations.* J. Chem. Phys. 114, 1497, 2001.

Kunert, G., *A posteriori error estimation for anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes.* Logos, Berlin, 1999.

Kunert, G., *An a posteriori residual error estimator for the finite element method on anisotropic tetrahedral meshes.* Numer. Math., 86(3):283–303, 2000.

Kunert, G., *A local problem error estimator for anisotropic tetrahedral f inite element meshes.* Angenommen bei SIAM J. Numer. Anal., 2001.

Kunert, G., *A posteriori l_2 error estimation on anisotropic tetrahedral finite element meshes.* Angenommen bei IMA J. Numer. Anal., 2001.

Kunert, G.; Verfürth, R., *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.

Kunert, G., *Robust a posteriori error estimation for a singularly perturbed reaction–diffusion equation on anisotropic tetrahedral meshes.* Eingereicht bei Adv. Comp. Math., 2001.

Kunisch, K.; Rösch, A., *Primal-dual strategy for constrained optimal control problems.* submitted to SIAM Journal Control Optimization.

Leadbeater, M.; Römer, R.A.; Schreiber, M., *Interaction-dependent enhancement of the localisation length for two interacting particles in a one–dimensional random potential.* Eur. Phys. J. B 8, 643, 1999.

Lebedev, A.; Stenzel, O.; Quinten, M.; Stendal, A.; Röder, M.; Schreiber, M.; Zahn, D.R.T., *A statistical approach for interpreting the optical extinction spectra of metal island films.* J. Opt. A: Pure Appl. Opt. 1, 573, 1999.

Levin, P.L.; Schneider, R.; Spasojevic, M., *Creation of sparse boundary element matrices for 2-D and axi-symmetric electrostatic problems using the bi-orthogonal wavelets.* IEEE Transaction on Dielectrics and Electric Insulation. 5, (1998), 469–486.

Lins, B.; Meade, P.; Mehl, Chr.; Rodman, L., *Normal matrices and polar decompositions in indefinite inner products.* accepted in Linear und Multilinear Algebra.

Mehl, Chr.; Mehrmann, V.; Xu, H., *Canonical forms for doubly structured matrices and pencils.* Electronic Journal on Linear Algebra, 7, pp. 112–151, 2000.

Mehl, Chr.; Rodman, L., *Classes of normal matrices in indefinite inner products.* accepted in *Linear Algebra Appl.*

Mehlig, B.; Chalker, J., *Statistical properties of eigenvectors in non-Hermitian Gaussian random matrix ensembles.* J. Math. Phys. 41, 3233 (2000).

Mehrmann, V.; Watkins, D., *Structure-preserving Methods for Computing Eigenpairs of Large Sparse Skew-Hamiltonian/Hamiltonian Pencils.* accepted in SIAM J. on Scientific Computing, 2001.

Meyer, A., *Hierarchical Preconditioners for Hihg Order Elements and Application in Computational Mechanics.* in: B. Topping (ed.), Developments in Computational Mechanics with High Performance Computing, Civil Comp Press, Edinburgh 1999, pp. 107–112.

Meyer, A., *Projected* PCGM *for Handling Hanging Nodes in Adaptive Finite Element Procedures.* accepted in Numer. Linear Algebra Appl., 2001.

Milde, F.; Römer, R.A., *Energy level statistics at the metal-insulator transition in the Anderson model of localization with anisotropic hopping.* Ann. Phys. (Leipzig) 7, 452, 1998.

Milde, F.; Römer, R.A.; Schreiber, M., *Energy-level statistics at the metal-insulator transition in anisotropic systems.* Phys. Rev. B 61, 6028, 2000.

Milde, F.; Römer, R.A.; Schreiber, M.; Uski, V., *Critical properties of the metal-insulator transition in anisotropic systems.* Eur. Phys. J. B 15, 685, 2000.

Möbius, A.; Díaz-Sánchez, A.; Freisleben, B.; Schreiber, M.; Fachat, A.; Hoffmann, K.H.; Merz, B.; Neklioudov, A., *Two physically motivated algorithms for combinatorial optimization: thermal cycling and iterative partial transciption.* Comp. Phys. Comm. 121–122, 34 (1999).

Möbius, M.; Freisleben, B.; Merz, P.; Schreiber, M., *Combinatorial optimization by iterative partial transcription.* Phys. Rev. E 59, 4667, 1999.

Möbius, A.; Frenzel, C.; Adkins, C.J.; Schreiber, M., *Metal-insulator transition in the persistent photoconductor* $\mathsf{Cd}_{1-x}\mathsf{Mn}_x\mathsf{Te}:\mathsf{In}$ *(Comment).* Europhys. Lett. 43, 605, 1998.

Möbius, A.; Frenzel, C.; Thielsch, R.; Rosenbaum, R.; Adkins, C.J.; Schreiber, M.; Bauer, H.-D; Grötzschel, R.; Hoffmann, V.; Krieg, T.; Matz, N.; Vinzelberg, H.; Witcomb, M., *Metal-insulator transition in amorphous* $\mathsf{Si}_{1-x}\mathsf{Ni}_x$*: Evidence for Mottes minimum metallic conductivity.* Phys. Rev. B 60, 14209, 1999.

Narayanan, R.; Vojta, Th., *The effect of rare regions on disordered itinerant quantum antiferromagnets with cubic anisotropy.* zur Veröffentlichung angenommen bei Phys. Rev. B, cond-mat/0004013.

Narayanan, R.; Vojta, Th.; Belitz, D.; Kirkpatrick, T.R., *Rare regions and annealed disorder in quantum phase transitions.* Ann. Phys. (Leipzig) 8 (1999), SI–185–8, cond-mat/9907384.

Narayanan, R.; Vojta, Th.; Belitz, D.; Kirkpatrick, T.R., *Critical behavior of disordered quantum magnets: The relevance of rare regions.* Phys. Rev. B 60 (1999), 10150–63, cond-mat/9905047.

Narayanan, R.; Vojta, Th.; Belitz, D.; Kirkpatrick, T.R., *Influence of rare regions on magnetic quantum phase transitions.* Phys. Rev. Lett. 82 (1999), 5132–5, cond-mat/9903194.

Nest, M.; Kleinekathöfer, U.; Schreiber, M.; Saalfrank, P., *The mapped Fourier method for scattering problems.* Chem. Phys. Lett. 313, 665, 1999.

Penzl, Th., *Algorithms for model reduction of large dynamical systems.* submitted to publishing, 2000.

Penzl, Th., *A cyclic low rank Smith method for large sparse Lyapunov equations.* SIAM J. Sci. Comput. (21), pp. 1401–1418, 2000.

Penzl, Th., *Eigenvalue decay bounds for solutions of Lyapunov equations: the symmetric case.* Systems and Control Letters, (40), pp. 139–144, 2000.

Reineker, P.; Schreiber, M.; Meltzer, R.S. (eds.), *Proc. 11th Int. Conf. Dynamical Processes in Excited States of Solids.* Mittelberg 1997, J. Lumin. 76 & 77 (Elsevier, Amsterdam 1998), XVII+694 p.

Repetowicz, P.; Grimm, U.; Schreiber, M., *Exact Eigenstates of Tight-Binding Hamiltonians on the Penrose Tiling.* Phys. Rev. B 58, 13482, 1998.

Repetowicz, P.; Grimm, U.; Schreiber, M., *High-temperature expansion for Ising models on quasi-periodic tilings.* J. Phys. A: Math. Gen. 32, 4397, 1999.

Repetowicz, P.; Grimm, U.; Schreiber, M., *Planar quasiperiodic Ising models.* Materials Science and Engineering A 294-296, 638, 2000.

Römer, R.A.; Leadbeater, M.; Schreiber, M., *Numerical results for two interacting particles in a random environment.* Ann. Phys. (Leipzig) 8, 675, 1999.

Römer, R.A.; Leadbeater, M.; Schreiber, M., *Scaling the localisation lengths for two interacting particles in one-dimensional random potentials.* Physica A 266, 481, 1999.

Römer, R.A.; Raikh, M.E., *Aharonov-Bohm oscillations in the exciton luminescence from a semiconductor nanoring.* phys. stat. sol. (b) 221, 535-539, 2000.

Römer, R.A.; Raikh, M.E., *The Aharonov-Bohm effect for an exciton.* Phys. Rev. B 62, 7045–7049, 2000.

Römer, R.A.; Schreiber, M.; Vojta, Th., *Disorder and Two-Particle Interaction in Low-Dimensional Quantum Systems.* Physica E 9, 397, 2001.

Römer, R.A.; Schreiber, M.; Vojta, Th., *Two interacting particles in a random potential, Numerical results of the interaction matrix elements.* phys. stat. sol. (b) 211, 681, 1999.

Römer, R.A.; Ziesche, P., *Fluctuation-correlation analysis of the Calogero-Sutherland model.* Phys. Rev. B 62, 15279-15282, 2000.

Rubin, P.; Sherman, A.; Schreiber, M., *Bound hole states and ferrons in* $La_2CuO_4^+$. Phys. Rev. B 57, 10299, 1998.

Salamon, P.; Pedersen, J.M.; Sibani, P.; Hoffmann, K.H., *Ensemble implementations of simulated annealing: A modelling approach.* Math. Comput. Modelling (im Druck).

Santer, M.; Mehlig, B., *Universal eigenvector statistics in a quantum scattering ensemble.* Phys. Rev. E, im Druck (2001).

Schneider, R., *Multiskalen- und Wavelet-Matrixkompression: Analysisbasierte Methoden zur effizienten Lösung großer vollbesetzter Gleichungssysteme.* Advances in Numerical Mathematics, Teubner Stuttgart, 1998.

Scholz, R.; Darwish, M.; Schreiber, M., *Ultrafast Electron Transfer of Betaine-30.* J. Lumin. 76 & 77, 404, 1998.

Scholz, R.; Kobitski, A.Yu.; Kampen, T.U.; Schreiber, M.; Zahn, D.R.T.; Jungnickel, G.; Elstner, M.; Sternberg, M.; Frauenheim, T., *Resonant Raman spectroscopy of 3,4,9,10-perylene-tetracarboxylic-dianhydride epitaxial films.* Phys. Rev. B 61, 13659, 2000.

Scholz, R.; Kobitski, A.Yu.; Kampen, T.U.; Schreiber, M.; Zahn, D.R.T.; Jungnickel, G.; Frauenheim, T., *Resonant Raman spectroscopy of organic semiconductors.* phys. stat. sol. (b) 221, 541, 2000.

Scholz, R.; Schreiber, M., *Ultrafast Coherent Vibronic Dynamics in Color Centers.* J. Lumin. 76 & 77, 48, 1998.

Schreiber, M. (ed.), *Proc. 210th WE-Heraeus-Seminar Percolation, Interaction, Localization: Simulations of Transport in Disordered Systems.* Berlin 1998, Ann. Phys. (Leipzig) 7 (Wiley-VCH, Berlin 1998), pp. 343–584.

Schreiber, M. (ed.), *Proc. Localization 1999, Inv. and contributed talks at Int. Conf. Disorder and Interaction in Transport Phenomena.* Hamburg 1999, Ann. Phys. (Leipzig) 8 (Wiley-VCH, Berlin 1999), pp. 533–794.

Schreiber, M. (ed.), *Proc. Localization 1999, Poster contributions at Int. Conf. Disorder and Interaction in Transport Phenomena.* Hamburg 1999, Ann. Phys. (Leipzig) 8 (Wiley-VCH, Berlin 1999), Special Issue, pp. 3–300.

Schreiber, M.; Epperlein, F.; Vojta, Th., *Transport in disordered interacting systems: Numerical results for one-dimensional spinless electrons.* Physica A 266, 443, 1999.

Schreiber, M.; Fuchs, C.; Scholz, R., *Superexchange in porphyrine-quinone complexes.* J. Lumin. 76 & 77, 482, 1998.

Schreiber, M.; Grimm, U.; Römer, R.A.; Zhong, J.X., *Application of random matrix theory to quasiperiodic systems.* Physica A 266, 477, 1999.

Schreiber, M.; Grimm, U.; Römer, R.A.; Zhong, J.X., *Energy Levels of Quasiperiodic Hamiltonians, Spectral Unfolding, and Random Matrix Theory.* Comp. Phys. Comm. 121 - 122, 499, 1999.

Schreiber, M.; Kilin, D.; Kleinekathöfer, U., *Comparison of Two Models for Bridge-Assisted Charge Transfer.* J. Lumin. 83 - 84, 235, 1999.

Schreiber, M.; Kondov, I.; Kleinekathöfer, U., *Different direct integrators for Redfield equations applied to electron transfer dynamics.* J. Mol. Liq. 86, 77, 2000.

Schreiber, M.; Milde, F.; Römer, R.A.; Elsner, U.; Mehrmann, V., *Electronic states in the Anderson model of localization: benchmarking eigenvalue algorithms.* Comp. Phys. Comm. 121 - 122, 517, 1999.

Schreiber, M.; Siewert, J.; Vojta, Th., *Interacting electrons in parabolic quantum dots: energy levels, addition energies, and charge distributions.* Int. J. Mod. Phys. B, zur Veröffentlichung angenommen.

Sherman, A.; Schreiber, M., *Modified spin-wave theory of the square-lattice Heisenberg antiferromagnet.* Physics of Metals and Metallography, zur Veröffentlichung angenommen.

Sherman, A.; Schreiber, M.; *Pseudogaps and magnetic properties of the t-J model, in Studies of High Temperature Superconductors.* Hsrg., A.V. Narlikar (Nova Science, New York) 27, 163-187, 1999.

Sherman, A.; Schreiber, M., *Spectral and magnetic properties of the two-dimensional t-J model in the quantum disordered regime.* Physica C 303, 257, 1998.

Sherman, A.; Schreiber, M., *Spectral and magnetic properties of the t-J model in underdoped region, Physics of Metals and Metallography.* zur Veröffentlichung angenommen.

Sherman, A.; Schreiber, M., *Superconductivity and magnetic properties of the t-J model of cuprate perovskites.* Int. J. Mod. Phys. B 29, 30 & 31, 3039, 1998.

Sherman, A.; Schreiber, M., *Temperature behavior of the magnon modes of the squarelattice antiferromagnet.* Phys. Rev. B 60, 10180, 1999.

Sherman, A.; Schreiber, M., *The* t-J *model in the quantum disordered regime.* Phys. Lett. A 238, 303, 1998.

Sherman, A.; Schreiber, M., *Underdoped Region of the t-J Model.* J. Low Temp. Phys. 117, 241, 1999.

Schulzky, C.; Essex, C.; Davison, M.; Franz, A.; Hoffmann, K.H., *The similarity group and anomalous diffusion equations.* Journal of Physics A 33(31): 5501-5511, 2000.

Seeger, S.; Franz, A.; Schulzky, C.; Hoffmann, K.H., *Random walks on finitely ramified Sierpinski carpets.* Computer Physics Communications 134(3): 307–316, 2001.

Seeger, S.; Hoffmann, K.H., *The Cumulant Method for Computational Kinetic Theory.* Continuum Mechanics and Thermodynamics 12(6): 403-412, 2000.

Stenzel, O.; Lebedev, A.N.; Schreiber, M.; Zahn, D.R.T., *Simulation of linear optical losses of absorbing heterogeneous thin solid films.* Thin Solid Films 372, 200, 2000.

Stykel, T., *On a criterion for asymptotic stability of differential-algebraic equations.* submitted to Zeitschr. f. Angew. Math. und Mech.

Tafelmayer, R.; Hoffmann, K.H., *Adaptive schedules for ensemble based threshold accepting.* Appl. Math. Lett. 12, 131 (1999).

Theß, M., *Parallel multilevel preconditioners for thin smooth shell finite element analysis.* Numer. Linear Algebra Appl. 5:401–440, 1998.

Uski, V.; Mehlig, B.; Römer, R.A., *A numerical study of wave-function and matrix-element statistics in the Anderson model of localization.* Ann. Phys. (Leipzig) 7, 437, 1998.

Uski, V.; Mehlig, B.; Römer, R.A.; Schreiber, M., *Exact-diagonalization study of rare events in disordered conductors.* Phys. Rev. B 62, R7699, 2000.

Uski, V.; Mehlig, B., Römer, R.A.; Schreiber, M., *Incipient localization in the Anderson model.* Physica B 284–288, 1934, 2000.

Uski, V.; Mehlig, B.; Römer, R.A.; Schreiber, M., *Smoothed universal correlations in the two-dimensional Anderson model.* Phys. Rev. B 59, 4080, 1999.

Uski, V.; Mehlig, B.; Schreiber, M., *Signature of ballistic effects in disordered conductors.* Phys. Rev. E, zur Veröffentlichung eingereicht.

Villagonzalo, C.; Römer, R.A., *Low temperature behavior of the thermopower in disordered systems near the Anderson transition.* Ann. Phys. (Leipzig) 7, 394, 1998.

Villagonzalo, C.; Römer, R.A.; Schreiber, M., *Thermoelectric Transport Properties in Disordered Systems Near the Anderson Transition.* Eur. Phys. J. B 12, 179, 1999.

Villagonzalo, C.; Römer, R.A.; Schreiber, M., *Transport Properties near the Anderson Transition.* Ann. Phys. (Leipzig) 8, SI-269, 1999.

Villagonzalo, C.; Römer, R.A.; Schreiber, M.; MacKinnon, A., *Behavior of the thermopower in amorphous materials at the metal-insulator transition.* Phys. Rev. B 62, 16446, 2000.

Vojta, Th., *Von Ordnung zu Unordnung durch Quantenfluktuationen.* Physik in unserer Zeit 32 (2001), 38–43.

Vojta, Th., *Quantum phase transitions in electronic systems.* Ann. Phys. (Leipzig) 9 (2000) 403–40, cond-mat/9910514.

Vojta, Th.; Belitz, D.; Kirkpatrick, T.R.; Narayanan, R., *Quantum critical behavior of itinerant ferromagnets.* Ann. Phys. (Leipzig) 8 (1999), 593–602, cond-mat/9907404.

Vojta, Th., *In an Ising model with spin-exchange dynamics damage always spreads.* J. Phys. A 31 (1998), 6595–6603, cond-mat/9803053.

Vojta, Th.; Epperlein, F.; Kilina, S.; Schreiber, M., *From localization to delocalization in the quantum Coulomb glass.* phys. stat. sol. (b) 218, 31, 2000.

Vojta, Th.; Epperlein, F.; Schreiber, M., *Do interactions increase or reduce the conductance of disordered electrons? It depends!* Phys. Rev. Lett. 81, 4212, 1998.

Vojta, Th., Epperlein, F.; Schreiber, M., *Hartree-Fock based diagonalization: an efficient method for simulating disordered interacting electrons.* Comp. Phys. Comm. 121 - 122, 489, 1999.

Vojta, Th.; Schreiber, M., *Differences between sequential and random order of updates in damage spreading simulations.* Phys. Rev. E 58, 7998, 1998.

Vojta, Th.; Schreiber, M., *Quantum Coulomb glass.* Phil. Mag. B, zur Veröffentlichung eingereicht.

Wang, X.; Grimm, U.; Schreiber, M., *Trace and antitrace maps for aperiodic sequences: extensions and applications.* Phys. Rev. B 62, 14020, 2000.

Wassen, E.; Frank, Th., *Simulation of cluster formation in gas-solid flow induced by particle-particle collisions.* in: International Journal of Multiphase Flow, March 2001, Volume 27, Issue 3, pp. 437–458.

Yuan, H.Q.; Grimm, U.; Repetowicz, P.; Schreiber, M., *Energy spectra, wavefunctions and quantum diffusion for quasiperiodic systems.* Phys. Rev. B 62, 15569, 2000.

Zhong, J.X.; Grimm, U.; Römer, R.A.; Schreiber, M., *Level-Spacing Distributions of Planar Quasiperiodic Tight-Binding Models.* Phys. Rev. Lett. 80, 3996, 1998.

Zhong, J.X.; Zhang, Z.; Schreiber, M.; Plummer, E.W.; Niu, Q., *Dynamical Scaling Properties of Electrons in Quantum Systems with Multifractal Eigenstates.* Phys. Rev. Lett., zur Veröffentlichung eingereicht

3.2.2 Beiträge in Proceedings; Sonstige Veröffentlichungen (außer Preprintreihe des SFB)

Apel, Th.; Berzins, M.; Jimack, P.K.; Kunert, G.; Plaks, A.; Tsukerman, I.; Walkley, M., *Mesh Shape and Anisotropic elements: Theory and Practice.* in: J. R. Whiteman (ed.), The Mathematics of Finite Elements and Applications X. Elsevier, Amsterdam, 2000, pp. 367–376.

Apel, Th.; Nicaise, S.; Schöberl, J., *Finite element methods with anisotropic meshes near edges.* in: Michal Křížek and Pekka Neittaanmäki (eds.), *Finite Element Methods: Three-dimesional Problems.* Erscheint 2001.

Apel, Th.; Schöberl, J., *Multigrid methods for anisotropic edge refinement.* Preprint 00-19, SFB F013, Johannes Kepler Universität Linz, 2000. Eingereicht bei SIAM J. Numer. Anal.

Balkanski, D.; Rehm, W,; Seifert, F., *Comparing* MPI *Performance of* SCI *and* VIA. in: Proceedings of the SCI-Europe 2000, 29.–30. August 2000, München, im Rahmen der Euro-Par 2000.

Balkanski, D.; Rehm, W.; Simeonov, St.; Trams, M., *Message Passing on* PCI-SCI *Interfaces.* in: Proceedings of Bulgarian Academy of Sciences, vol. 8, 2000, Publisher: Academic Publishing, Acad. M. Drinow.

Balkanski, D.; Rehm, W.; Simeonov, St.; Trams, M., *A New Architectural Concept for Highly Efficient Message-Passing on* PCI–SCI *Network Interfaces.* in: Proceedings of the 14th International Conference "System for Automation of Engineering and Research", SAER'2000, 18.–20. September 2000, St. Konstantin (Varna), Bulgarien.

Bernert, K.; Frank, Th.; Schneider, H.; Pachler, K., *Multi–Grid Acceleration of a* SIMPLE*-Based CFD-Code and Aspects of Parallelization.* in: M. Baker and W. Rehm (eds.), Proceedings of the IEEE International Conference on Cluster Computing – CLUSTER 2000, November 28 – December 2, 2000, University of Technology Chemnitz, Chemnitz, Germany, (ISBN 0-7695-0896-0).

Bernert, K.; Frank, Th.; Schneider, H.; Pachler, K., *Simulation of Disperse Multiphase Flows with an Application in Power Engineering.* in: ASME Conference Proceedings of the 3rd International Symposium on Computational Technologies for Fluid/Thermal/Chemical Systems with Industrial Applications, July 22-26, 2001, Atlanta, Georgia, USA.

Dinkelmann, C.; Meyer, M.; Rehm, W., *Eine Konfigurations- und Managementlösung für ein dediziertes Linux-Cluster.* in: Proceedings of the 2nd Workshop Cluster Computing, 25./26. März 1999, Universität Karlsruhe. Chemnitzer Informatik-Berichte CSR-99-02 (157 S.). ISSN 0947-5125.

Dinkelmann, C.; Rehm, W.; Schindler, S., *An optimized* MPI*-library for* VIA/SCI *cards.* in: Proceedings of the Asia-Pacific International Symposium on Cluster

Computing (APSCC'2000), part of the Fourth International Conference/Exhibition on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPCAsia2000), 14.–17. Mai 2000, Beijing/China, Volume II, pp. 895–903.

Frank, Th., *Application of Eulerian–Lagrangian Prediction of Gas–Particle Flows to Cyclone Separators.* in: VKI, Von Karman Institute for Fluid Dynamics, Lecture Series Programme 1999–2000, "Theoretical and Experimental Modeling of Particulate Flow", Bruessels, Belgium, 03.–07. April 2000.

Frank, Th.; Schneider, J.; Yu, Q.; Wassen, E., *Experimental and Numerical Investigation of Particle Separation in a Symmetrical Double Cyclone Separator.* in: Proceedings of the 8th International Symposium on Gas–Particle Flows, ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, San Francisco, CA, USA, July 18–22, 1999, CD–ROM Proceedings, Paper No. FEDSM99–7865, pp. 1–10.

Frank, Th.; Bernert, K.; Scheider, H.; Pachler, K., *Efficient Parallelization of Eulerian-Lagrangian Approach for Disperse Multiphase Flow Calculation on MIMD Computer Architectures.* in: M. Baker and W. Rehm (eds.), Proceedings of the IEEE International Conference on Cluster Computing CLUSTER 2000, November 28 – December 2, 2000, University of Technology Chemnitz, Chemnitz, Germany, (ISBN 0-7695-0896-0).

Frank Th.; Bernert K.; Pachler K.; Schneider H., *Aspects of Efficient Parallelization of Disperse Gas-Particle Flow Predictions using Eulerian-Lagrangian Approach.* in: Proceedings of the ICMF 2001 - 4th International Conference on Multiphase Flow, Paper No. 311, pp. 1-13, New Orleans, Louisiana, USA, May 27 – June 1, 2001.

Mehrmann, V.; Penzl, Th.; Tröltzsch, F., *Control of heterogeneous systems of partial differential equations and differential algebraic equations.* Invited presentation: 9th Seminar on Numerical Solution of Differential and Differential-Algebraic Equations, Halle, 4.9.–8.9.2000.

Pachler K.; Bernert K.; Frank Th.; Schneider H., *Simulation von Mehrphasenströmungen auf Parallelrechnern und deren Anwendung in der Verfahrenstechnik.* in: Proceedings of the "CHC-2000, 2. Chemnitz/Hamburger Kolloquium Auslegung und Modellierung energetischer Anlagen und Systeme" Technische Universität Hamburg-Harburg, Deutschland, 16./17. November 2000.

Pachler K.; Bernert K.; Frank Th., *Simulation einer instationären Gas–Partikel–Strömung unter Berücksichtigung von Kollision, Wandstoß und Phasenswechselwirkung.* in: Tagungsdokumente der Sitzung der GVC–Fachausschüsse "Mehrphasenströmungen" und "Mischvorgänge", 1.–2. März 2001, Wernigerode, Germany.

Rehm, W.; Schindler, S., *Multiple Devices Under* MPICH., in: Proceedings of the 5th Workshop "Parallele Systeme und Algorithmen" (PASA'99), 7.

Oktober 1999, Jena, im Rahmen der ARCS'99 – 15. GI/ITG-Fachtagung Architektur von Rechensystemen.

Rehm, W.; Schlosser, R.; Trams, M., *Design Choices and First Results of Our VIA-Capable* PCI–SCI *Bridge.* in: M. Baker and W. Rehm (eds.), Proceedings of the CLUSTER 2000 – IEEE International Conference on Cluster Computing, November 28 – December 2, 2000, University of Technology Chemnitz, Chemnitz, Germany, (ISBN 0-7695-0896-0), pp. 349–350.

Rehm, W.; Seifert, F., *Proposing a Mechanism for Reliably Locking* VIA *Communication Memory in Linux.* in: M. Baker and W. Rehm (eds.), Proceedings of the CLUSTER 2000 – IEEE International Conference on Cluster Computing, November 28 – December 2, 2000, University of Technology Chemnitz, Chemnitz, Germany, (ISBN 0-7695-0896-0), pp. 225–232.

Rehm, W.; Seifert, F. Trams, M., *An Advanced* PCI–SCI *Bridge With* VIA *Support.* in: Proceedings of the 2nd Workshop Cluster Computing, 25./26. März 1999, Universität Karlsruhe. Chemnitzer Informatik–Berichte CSR-99-02 (157 S.), (ISSN 0947-5125).

Rehm W.; Trams, M., *A New Generic and Reconfigurable* PCI–SCI *Bridge.* in: Proceedings of the SCI-Europe'99, 2.–3. September 1999, Toulouse, Frankreich, im Rahmen der Euro-PAR'99.

Rehm, W.; Ungerer, Th. (eds.), *Tagungsband zum 2. Workshop Cluster–Computing, 25./26. März 1999, Universität Karlsruhe.* Chemnitzer Informatik–Berichte CSR-99-02 (157 S.), (ISSN 0947-5125).

Rehm, W.; Ungerer, Th. (eds.), *Ausgewählte Beiträge zum 2. Workshop Cluster–Computing.* 25./26. März 1999, Universität Karlsruhe, Preprint-Reihe des SFB 393/97–22 in Karlsruhe (117 S.).

Schade, K.-P.; Schneider, H.; Frank, Th.; Erdmann, H.-J.; Hädrich Th.; Bernert K., *Experimental and Numerical Investigation of Particle Erosion Caused by Pulverized Fuel in Channels and Pipework of Coal-Fired Power Plant.* in: Proceedings of the ICMF 2001 – 4th International Conference on Multiphase Flow, Paper No. 325, pp. 1–12, New Orleans, Louisiana, USA, May 27 - June 1, 2001.

3.2.3 Preprintreihe des SFB 393

Preprintreihe des SFB 393 für 1998
(Im Bericht für die Jahre 1996 – 1998 noch unvollständig enthalten)

98-01 B. Heinrich, S. Nicaise, B. Weber. Elliptic interface problems in axisymmetric domains. Part II: The Fourier-finite-element approximation of non-tensorial singularities. January 1998.

98-02 Th. Vojta, R. A. Römer, M. Schreiber. Two interacting particles in a random potential: The random model revisited. February 1998.

98-03 B. Mehlig, K. Müller. Non-universal properties of a complex quantum spectrum. February 1998.

98-04 B. Mehlig, K. Müller, B. Eckhardt. Phase-space localization and matrix element distributions in systems with mixed classical phase space. February 1998.

98-05 M. Bollhöfer, V. Mehrmann. Nested divide and conquer concepts for the solution of large sparse linear systems. March 1998.

98-06 Th. Penzl. A cyclic low rank Smith method for large, sparse Lyapunov equations with applications in model reduction and optimal control. March 1998.

98-07 V. Mehrmann, H. Xu. Canonical forms for Hamiltonian and symplectic matrices and pencils. March 1998.

98-08 C. Mehl. Condensed forms for skew-Hamiltonian/Hamiltonian pencils. March 1998.

98-09 M. Meyer. Der objektorientierte hierarchische Netzgenerator Netgen69-C++. April 1998.

98-10 T. Ermer. Mappingstrategien für Kommunikatoren. April 1998.

98-11 D. Lohse. Ein Standard-File für 3D-Gebietsbeschreibungen. – Definition des Fileformats V 2.1 –. April 1998.

98-13 L. Grabowsky, T. Ermer. Objektorientierte Implementation eines PPCG-Verfahrens. April 1998.

98-14 M. Konik, R. Schneider. Object-oriented implementation of multiscale methods for boundary integral equations. May 1998.

98-15 W. Dahmen, R. Schneider. Wavelets with complementary boundary conditions - Function spaces on the cube. May 1998.

98-16 P. Hr. Petkov, M. M. Konstantinov, V. Mehrmann. DGRSVX and DMSRIC: Fortran 77 subroutines for solving continuous-time matrix algebraic Riccati equations with condition and accuracy estimates. May 1998.

98-17 D. Lohse. Ein Standard-File für 3D-Gebietsbeschreibungen. - Datenbasis und Programmschnittstelle `data_read`. April 1998.

98-18 A. Fachat, K. H. Hoffmann. Blocking vs. Non-blocking Communication under MPI on a Master-Worker Problem. June 1998.

98-19 W. Dahmen, R. Schneider, Y. Xu. Nonlinear Functionals of Wavelet Expansions - Adaptive Reconstruction and Fast Evaluation. June 1998.

98-20 M. Leadbeater, R. A. Römer, M. Schreiber. Interaction-dependent enhancement of the localisation length for two interacting particles in a one-dimensional random potential. June 1998.

98-21 M. Leadbeater, R. A. Römer, M. Schreiber. Formation of electron-hole pairs in a one-dimensional random environment. June 1998.

98-22 A. Eilmes, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber. Two interacting particles at the metal-insulator transition. August 1998.

98-23 M. Leadbeater, R. A. Römer, M. Schreiber. Scaling the localisation lengths for two interacting particles in one-dimensional random potentials. July 1998.

98-24 M. Schreiber, U. Grimm, R. A. Römer, J. X. Zhong. Application of random matrix theory to quasiperiodic systems. July 1998.

98-25 V. Mehrmann, H. Xu. Lagrangian invariant subspaces of Hamiltonian matrices. August 1998.

98-26 B. Nkemzi, B. Heinrich. Partial Fourier approximation of the Lamé equations in axisymmetric domains. September 1998.

98-27 V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, M. Schreiber. Smoothed universal correlations in the two-dimensional Anderson model. September 1998.

98-28 D. Michael, M. Meisel. Some remarks to large deformation elasto-plasticity (continuum formulation). September 1998.

98-29 V. Mehrmann, H. Xu. Structured Jordan Canonical Forms for Structured Matrices that are Hermitian, skew Hermitian or unitary with respect to indefinite inner products. October 1998.

98-30 G. Globisch. The hierarchical preconditioning on locally refined unstructured grids. October 1998.

98-31 M. Bollhöfer. Algebraic domain decomposition. (PhD thesis) March 1998.

98-32 X. Guan, U. Grimm, R. A. Römer. Lax pair formulation for a small-polaron chain. (Proceedings PILS'98, in: Ann. Physik, Leipzig 1998). November 1998.

98-33 U. Grimm, R. A. Römer, G. Schliecker. Electronic states in topologically disordered systems. (Proceedings PILS'98, in: Ann. Physik, Leipzig 1998). November 1998.

98-34 C. Villagonzalo, R. A. Römer. Low temperature behavior of the thermopower in disordered systems near the Anderson transition. (Proceedings PILS'98, in: Ann. Physik, Leipzig 1998). November 1998.

98-35 V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer. A numerical study of wave-function and matrix-element statistics in the Anderson model of localization. (Proceedings of PILS'98, in: Ann. Physik, Leipzig 1998) November 1998.

98-36 F. Milde, R. A. Römer. Energy level statistics at the metal-insulator transition in the Anderson model of localization with anisotropic hopping. (Proceedings of PILS'98, in: Ann. Physik, Leipzig 1998). November 1998.

98-37 M. Schreiber, U. Grimm, R. A. Römer, J. X. Zhong. Energy Levels of Quasiperiodic Hamiltonians, Spectral Unfolding and Random Matrix Theory. November 1998.

Preprintreihe des SFB 393 für 1999

99-01 P. Kunkel, V. Mehrmann, W. Rath. Analysis and numerical solution of control problems in descriptor form. January 1999.

99-02 A. Meyer. Hierarchical preconditioners for higher order elements and applications in computational mechanics. January 1999.

99-03 Th. Apel. Anisotropic finite elements: local estimates and applications (Habilitationsschrift). January 1999.

99-04 C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber. Thermoelectric transport properties in disordered systems near the Anderson transition. February 1999.

99-05 D. Michael. Notizen zu einer geometrisch motivierten Plastizitätstheorie. Februar 1999.

99-06 Th. Apel, U. Reichel. SPC-PM Po 3D V 3.3, User's Manual. February 1999.

99-07 F. Tröltzsch, A. Unger. Fast solution of optimal control problems in the selective cooling of steel. March 1999.

99-08 W. Rehm, T. Ungerer (Eds.). Ausgewählte Beiträge zum 2. Workshop Cluster-Computing 25./26. März 1999, Universität Karlsruhe. März 1999.

99-09 M. Arav, D. Hershkowitz, V. Mehrmann, H. Schneider. The recursive inverse eigenvalue problem. March 1999.

99-10 Th. Apel, S. Nicaise, J. Schöberl. Crouzeix-Raviart type finite elements on anisotropic meshes. May 1999.

99-11 M. Jung. Einige Klassen iterativer Auflösungsverfahren (Habilitationsschrift). Mai 1999.

99-12 V. Mehrmann, H. Xu. Numerical methods in control, from pole assignment via linear quadratic to H_∞ control. June 1999.

99-13 K. Bernert, A. Eppler. Two-stage testing of advanced dynamic subgrid-scale models for Large-Eddy Simulation on parallel computers. June 1999.

99-14 R. A. Römer, M. E. Raikh. The Aharonov-Bohm effect for an exciton. June 1999.

99-15 P. Benner, R. Byers, V. Mehrmann, H. Xu. Numerical computation of deflating subspaces of embedded Hamiltonian pencils. June 1999.

99-16 S. V. Nepomnyaschikh. Domain decomposition for isotropic and anisotropic elliptic problems. July 1999.

99-17 T. Stykel. On a criterion for asymptotic stability of differential-algebraic equations. August 1999.

99-18 U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, J. X. Zhong. Universal level-spacing statistics in quasiperiodic tight-binding models. August 1999.

99-19 R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber. Numerical results for two interacting particles in a random environment. August 1999.

99-20 C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber. Transport Properties near the Anderson Transition. August 1999.

99-21 P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber. Phase diagram of the three-dimensional Anderson model of localization with random hopping. August 1999.

99-22 M. Bollhöfer, V. Mehrmann. A new approach to algebraic multilevel methods based on sparse approximate inverses. August 1999.

99-23 D. S. Watkins. Infinite eigenvalues and the QZ algorithm. September 1999.

99-24 V. Uski, R. A. Römer, B. Mehlig, M. Schreiber. Incipient localization in the Anderson model. August 1999.

99-25 A. Meyer. Projected PCGM for handling hanging in adaptive finite element procedures. September 1999.

99-26 F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber. Energy-level statistics at the metal-insulator transition in anisotropic system. September 1999.

99-27 F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, V. Uski. Critical properties of the metal-insulator transition in anisotropic systems. October 1999.

99-28 M. Theß. Parallel multilevel preconditioners for thin shell problems. November 1999.

99-29 P. Biswas, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber. Off-diagonal disorder in the Anderson model of localization. November 1999.

99-30 C. Mehl. Anti-triangular and anti-m-Hessenberg forms for Hermitian matrices and pencils. November 1999.

99-31 A. Barinka, T. Barsch, S. Dahlke, M. Konik. Some remarks for quadrature formulas for refinable functions and wavelets. November 1999.

99-32 H. Harbrecht, C. Perez, R. Schneider. Biorthogonal wavelet approximation for the coupling of FEM-BEM. November 1999.

99-33 C. Perez, R. Schneider. Wavelet Galerkin methods for boundary integral equations and the coupling with finite element methods. November 1999.

99-34 W. Dahmen, A. Kunoth, R. Schneider. Wavelet least squares methods for boundary value problems. November 1999.

99-35 S. I. Solovev. Convergence of the modified subspace iteration method for nonlinear eigenvalue problems. November 1999.

99-36 B. Heinrich, B. Nkemzi. The Fourier-finite-element method for the Lamé equations in axisymmetric domains. December 1999.

99-37 Th. Apel, F. Milde, U. Reichel. SPC-PM Po 3D v 4.0 - Programmers Manual II. December 1999.

99-38 B. Nkemzi. Singularities in elasticity and their treatment with Fourier series. December 1999.

99-39 Th. Penzl. Eigenvalue decay bounds for solutions of Lyapunov equations: The symmetric case. December 1999.

99-40 Th. Penzl. Algorithms for model reduction of large dynamical systems. December 1999.

Preprintreihe des SFB 393 für 2000

00-01 G. Kunert. Anisotropic mesh construction and error estimation in the finite element method. January 2000.

00-02 V. Mehrmann, D. Watkins. Structure-preserving methods for computing eigenpairs of large sparse skew-Hamiltonian/Hamiltonian pencils. January 2000.

00-03 X. W. Guan, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber. Integrable impurities for an open fermion chain. January 2000.

00-04 R. A. Römer, M. Schreiber, Th. Vojta. Disorder and two-particle interaction in low-dimensional quantum systems. January 2000.

00-05 P. Benner, R. Byers, V. Mehrmann, H. Xu. A unified deflating subspace approach for classes of polynomial and rational matrix equations. January 2000.

00-06 M. Jung, S. Nicaise, J. Tabka. Some multilevel methods on graded meshes. February 2000.

00-07 H. Harbrecht, F. Paiva, C. Perez, R. Schneider. Multiscale Preconditioning for the Coupling of FEM-BEM. February 2000.

00-08 P. Kunkel, V. Mehrmann. Analysis of over- and underdetermined nonlinear differential-algebraic systems with application to nonlinear control problems. February 2000.

00-09 U.-J. Görke, A. Bucher, R. Kreißig, D. Michael. Ein Beitrag zur Lösung von Anfangs-Randwert-Problemen einschließlich der Materialmodellierung bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen mit Hilfe der FEM. März 2000.

00-10 M. J. Martins, X.-W. Guan. Integrability of the D_n^2 vertex models with open boundary. March 2000.

00-11 Th. Apel, S. Nicaise, J. Schöberl. A non-conforming finite element method with anisotropic mesh grading for the Stokes problem in domains with edges. March 2000.

00-12 B. Lins, P. Meade, C. Mehl, L. Rodman. Normal Matrices and Polar Decompositions in Indefinite Inner Products. March 2000.

00-13 C. Bourgeois. Two boundary element methods for the clamped plate. March 2000.

00-14 C. Bourgeois, R. Schneider. Biorthogonal wavelets for the direct integral formulation of the heat equation. March 2000.

00-15 A. Rathsfeld, R. Schneider. On a quadrature algorithm for the piecewise linear collocation applied to boundary integral equations. March 2000.

00-16 S. Meinel. Untersuchungen zu Druckiterationsverfahren für dichteveränderliche Strömungen mit niedriger Machzahl. März 2000.

00-17 M. Konstantinov, V. Mehrmann, P. Petkov. On Fractional Exponents in Perturbed Matrix Spectra of Defective Matrices. April 2000.

00-18 J. Xue. On the blockwise perturbation of nearly uncoupled Markov chains. April 2000.

00-19 N. Arada, J.-P. Raymond, F. Tröltzsch. On an Augmented Lagrangian SQP Method for a Class of Optimal Control Problems in Banach Spaces. April 2000.

00-20 H. Harbrecht, R. Schneider. Wavelet Galerkin Schemes for 2D-BEM. April 2000.

00-21 V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, M. Schreiber. An exact-diagonalization study of rare events in disordered conductors. April 2000.

00-22 V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, M. Schreiber. Numerical study of eigenvector statistics for random banded matrices. May 2000.

00-23 R. A. Römer, M. Raikh. Aharonov-Bohm oscillations in the exciton luminescence from a semiconductor nanoring. May 2000.

00-24 R. A. Römer, P. Ziesche. Hellmann-Feynman theorem and fluctuation-correlation analysis of the Calogero-Sutherland model. May 2000.

00-25 S. Beuchler. A preconditioner for solving the inner problem of the p-version of the FEM. May 2000.

00-26 C. Villagonzalo, R.A. Römer, M. Schreiber, A. MacKinnon. Behavior of the thermopower in amorphous materials at the metal-insulator transition. June 2000.

00-27 C. Mehl, V. Mehrmann, H. Xu. Canonical forms for doubly structured matrices and pencils. June 2000. S. I. Solov'ev. Preconditioned gradient iterative methods for nonlinear eigenvalue problems. June 2000.

00-29 A. Eilmes, R. A. Römer, M. Schreiber. Exponents of the localization lengths in the bipartite Anderson model with off-diagonal disorder. June 2000.

00-30 T. Grund, A. Rösch. Optimal control of a linear elliptic equation with a supremum–norm functional. July 2000.

00-31 M. Bollhöfer. A Robust ILU Based on Monitoring the Growth of the Inverse Factors. July 2000.

00-32 N. Arada, E. Casas, F. Tröltzsch. Error estimates for a semilinear elliptic control problem. July 2000.

00-33 Th. Penzl. LYAPACK Users Guide. August 2000.

00-34 B. Heinrich, K. Pietsch. Nitsche type mortaring for some elliptic problem with corner singularities. September 2000.

00-35 P. Benner, R. Byers, H. Faßbender, V. Mehrmann, D. Watkins. Cholesky-like Factorizations of Skew-Symmetric Matrices. September 2000.

00-36 C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, A. MacKinnon. Critical Behavior of the Thermoelectric Transport Properties in Amorphous Systems near the Metal-Insulator Transition. September 2000.

00-37 F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber. Metal-insulator transition in anisotropic systems. October 2000.

00-38 T. Stykel. Generalized Lyapunov Equations for Descriptor Systems: Stability and Inertia Theorems. October 2000.

00-39 G. Kunert. Robust a posteriori error estimation for a singularly perturbed reaction-diffusion equation on anisotropic tetrahedral meshes. November 2000.

Preprintreihe des SFB 393 für 2001

01-01 G. Kunert. Robust local problem error estimation for a singularly perturbed problem on anisotropic finite element meshes. January 2001.

01-02 G. Kunert. A note on the energy norm for a singularly perturbed model problem. January 2001.

01-03 U.-J. Görke, A. Bucher, R. Kreißig. Ein Beitrag zur Materialparameteridentifikation bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen durch Analyse inhomogener Verschiebungsfelder mit Hilfe der FEM. Februar 2001.

01-04 R. A. Römer. Percolation, Renormalization and the Quantum-Hall Transition. February 2001.

01-05 A. Eilmes, R. A. Römer, C. Schuster, M. Schreiber. Two and more interacting particles at a metal-insulator transition. February 2001.

01-06 D. Michael. Kontinuumstheoretische Grundlagen und algorithmische Behandlung von ausgewählten Problemen der assoziierten Fließtheorie. März 2001.

01-07 S. Beuchler. A preconditioner for solving the inner problem of the p-version of the FEM, Part II - algebraic multi-grid proof. March 2001.

01-08 S. Beuchler, A. Meyer. SPC-PM3AdH v 1.0 - Programmer's Manual. March 2001.

01-09 D. Michael, M. Springmann. Zur numerischen Simulation des Versagens duktiler metallischer Werkstoffe (Algorithmische Behandlung und Vergleichsrechnungen). März 2001.

01-10 B. Heinrich, S. Nicaise. Nitsche mortar finite element method for transmission problems with singularities. March 2001.

01-11 Th. Apel, S. Grosman, P. K. Jimack, A. Meyer. A New Methodology for Anisotropic Mesh Refinement Based Upon Error Gradients. March 2001.

01-12 W. Rehm. Ausgewählte Aspekte des Clustercomputing. April 2001.

01-13 A. Meyer, T. Steidten. Improvements and Experiments on the Bramble–Pasciak Typ CG for mixed Problems in Elasticity. April 2001.

01-14 K. Ragab, W. Rehm. CHEMPI: Efficient MPI for VIA/SCI. April 2001.

01-15 D. Balkanski, F. Seifert, W. Rehm. Proposing a System Software for an SCI-based VIA Hardware. April 2001.

3.2.4 Technical Reports

- Keine Einträge

3.2.5 Beiträge im Internet

[0] **WWW-Homepage des SFB 393:**
`http://www.tu-chemnitz.de/sfb393`

[1] CLIC – Chemnitzer LINUX Cluster:
Home, Nutzung, Fotos, Vorgeschichte, Systemüberblick, Installation
`http://www.tu-chemnitz.de/urz/anwendungen/CLIC/`

[2] CLIC Usage: Nutzung, Wissenswertes, Erfahrungen, Experimente
`http://www.tu-chemnitz.de/~pester/CLIC/clic_usage.html`

[4] Pester, M., Examples for special face geometry by mesh refinement.
`http://www.tu-chemnitz.de/~pester/facegeo.html`

[5] Pester, M., Bibliotheken zur Entwicklung paralleler Algorithmen.
`http://www.tu-chemnitz.de/~pester/par_lib.html`

[6] Rehm, W., Trams, M., VIA meets SCI - New Concepts for SCI Architecture.
`http://www.tu-chemnitz.de/~mtr/VIA_SCI/via_sci_main.html`

[7] Rehm, W., Jordan, L. CHEMPI, a new MPI-2-Standard MPI Implementation with Support for the VIA Hardware Architecture.
`http://www.tu-chemnitz.de/informatik/RA/projects/chempi-html/`

[8] Rehm, W., Project Open Scalable Cluster ARchitecture (OSCAR),
`http://www.tu-chemnitz.de/informatik/RA/projects/oscar/`

[9] Europäische Homepage der Task Force on Cluster Computing (TFCC):
`http://www.tu-chemnitz.de/informatik/RA/cchp/`

[10] Homepage des 2.Workshop Cluster–Computing:
`http://www.tu-chemnitz.de/informatik/RA/CC99/`

[11] Homepage der CLUSTER 2000 – IEEE International Conference on Cluster Computing:
`http://www.tu-chemnitz.de/informatik/RA/cluster2000/`

[12] Frank, Th., Forschungsgruppe Mehrphasenströmungen.
`http://www.imech.tu-chemnitz.de`

[13] Meinel, St.; Pester, M., Examples for animated solutions of flow simulations.
`http://www.tu-chemnitz.de/~pester/exmpls.html`

[14] Pester, M., Animated GIFs of numerical solutions.
`http://www.tu-chemnitz.de/~pester/exmpls/index.html`

[15] Pester, M., 3D FEM Mesh Viewer (Java applet).
`http://www-usercgi.tu-chemnitz.de/~pester/meshes/showstd.cgi`

[16] Pester, M., 2D FEM Mesh Viewer (Java applet).
`http://www-usercgi.tu-chemnitz.de/~pester/meshes/shownets.cgi`

[17] Frank, Th., Simulation von Strömungen in der Verfahrenstechnik auf Clustercomputern.
`http://www.tu-chemnitz.de/mbv/TechThDyn/mpf/publication/frank/clic_einweihung.2000/clic_einweihung_2000.html`

[18] Pester, M., Neue Dimensionen des Supercomputing an der TU Chemnitz - Benchmarks auf dem CLIC.
`http://www.tu-chemnitz.de/~pester/CLIC-Einweihung`

Dieser Arbeits- und Ergebnisbericht des SFB 393 ist in Form von Files unter der folgenden Addresse im WWW verfügbar, wobei das Gesamtdokument in den allgemeinen Abschnitt und den Anhang (Zusammenfassung und Aktivitätendokumentation) sowie in die Teilprojekte untergliedert worden ist. Die in den Graustufendruck transferierten farbigen Abbildungen sind hier im Original visualisierbar:

`http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/bericht01`