

P. Deuffhard, H.C. Hege, E. Sedlmayr (eds.)

# Scientific Computing in der Theoretischen Physik

Tagung organisiert von der

**DMV–Fachgruppe Scientific Computing**

in Kooperation mit dem

**GAMM–Fachausschuß Scientific Computing**

Berlin, 16. – 18. März 1994

## Collected Abstracts

# Vorwort

Ziel des Workshops ist, die Kontakte zwischen den Fachleuten der Gebiete *Computational Physics* und *Scientific Computing* zu intensivieren. Angesprochen sind Physiker, die rechenintensive Aufgaben innerhalb der Physik bearbeiten, und Mathematiker, die sich mit der Entwicklung neuer Algorithmen für physikalisch interessante Probleme befassen.

In den letzten Jahren waren erhebliche Fortschritte in beiden Wissenschaftsgebieten zu verzeichnen; in der Computational Physics etwa durch die Anwendung von Multiskalen-Verfahren und die Entwicklung neuer, physikalisch motivierter Algorithmen, im Gebiet des Scientific Computing durch adaptive Multilevel-Verfahren für partielle Differentialgleichungen. Schwerpunkte des Workshops sind:

- (A) Numerische Simulation von Transportmodellen der Astrophysik und der Halbleiterphysik
- (B) Multilevel-Methoden für partielle Differentialgleichungen
- (C) Monte-Carlo-Methoden und molekulardynamische Verfahren für Probleme der Statistischen Physik und Quantenfeldtheorie.

Erfreulicherweise fand unsere Ankündigung des Workshops ein äußerst positives Echo — wie die hier vorgelegte Sammlung von Abstracts zeigt. Wir wünschen dem Workshop einen guten Verlauf mit vielen fruchtbaren Diskussionen über den mathematisch-physikalischen Zaun hinweg.

Berlin, im März 1994

P. Deuffhard<sup>1,2</sup>

H.C. Hege<sup>1,3</sup>

E. Sedlmayr<sup>4</sup>

---

<sup>1</sup> Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

<sup>2</sup> Freie Universität Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik

<sup>3</sup> Freie Universität Berlin, Fachbereich Physik

<sup>4</sup> Technische Universität Berlin, Fachbereich Physik

# Inhalt

## A. Numerische Methoden für Transportmodelle

<b>1. Berechnung des Ladungsträgertransports und der Temperatur in Halbleiterbauelementen</b> (G. Albinus) .....	1
<b>2. Chemical Structure of Stellar Outflows</b> ( <u>H. Beck</u> , B. Patzer, E. Sedlmayr) .....	2
<b>3. Adaptive Radiation Hydrodynamics for Astrophysical Objects</b> (E.A. Dorfi) .....	3
<b>4. Selfconsistent Models of Pulsating Dust Forming Stellar Atmospheres</b> ( <u>A. J. Fleischer</u> , A. Gauger, E. Sedlmayr) .....	4
<b>5. Numerische Lösung der Drift-Diffusionsgleichungen in Halbleitern</b> (H. Gajewski) .....	5
<b>6. Modellierung chemischer Reaktionen in porösen Medien auf Mikro- und Makro-Skalen</b> (U. Hornung) .....	6
<b>7. Turbulent Convection in Supernova Explosions</b> (H.-T. Janka) .....	7
<b>8. Parallele Algorithmen zur Lösung der Strahlungstransportgleichung</b> (G. Kanschat) .....	8
<b>9. Numerical Investigation of the Two-dimensional Shock Wave Reflection</b> (K. Kantiem) .....	9
<b>10. Vergleich numerischer Verfahren für den chemischen Teil von atmosphärischen Transportmodellen</b> ( <u>O. Knoth</u> , R. Wolke) .....	10
<b>11. Adaptive Linienmethoden für nichtlineare parabolische Systeme in einer Raumdimension</b> (U. Nowak) .....	11
<b>12. Hierarchien der Transportsimulation im Halbleiter</b> (W. Quade) .....	12
<b>13. Simulation von Akkretionsscheiben mit Smoothed Particle Hydrodynamics</b> (H. Riffert) .....	13
<b>14. 3D Hydrodynamic Simulations of Bondi-Hoyle Accretion</b> (M. Ruffert) .....	14
<b>15. Numerical Solution of the Stationary Multigroup Diffusion Equations</b> (W. Schmid) .....	15

<b>16. Efficient discretization and solution techniques for the multidimensional radiative transfer equation</b> (S. Turek) .....	16
--	----

## B. Multilevel–Methoden

<b>1. Dünngitterverfahren zur Lösung von Eigenwertproblemen des Typs <math>\Delta u + q(x) \cdot u = \lambda u</math> (Teil 1 und 2)</b> (R. Balder, S. Hilgenfeldt) .....	17
<b>2. Multiscale Decompositions and Applications</b> (W. Dahmen) .....	19
<b>3. Das Kaskadenprinzip für partielle Differentialgleichungen</b> (P. Deuffhard) .....	20
<b>4. Ein Mehrgittervorkonditionierer für partielle Differentialgleichungen mit variierenden Koeffizienten, die in Transport- und Diffusionsproblemen auftreten.</b> (J. Fuhrmann) .....	21
<b>5. Gemischte Finite Elemente Diskretisierung der Kontinuitätsgleichungen aus der Halbleitersimulation</b> (R. Hiptmair) .....	22
<b>6. Mehrgittermethoden für Propagatoren in Gittereichtheorien</b> (T. Kalkreuter) .....	23
<b>7. Multilevel-Vorkonditionierung für Sattelpunktsprobleme</b> (A. Kunothe) .....	24
<b>8. Ein robustes Finite-Element-Verfahren für die dreidimensionale Bauelementsimulation</b> (F. Montrone) .....	25
<b>9. Diskrete transparente Randbedingungen für die numerische Lösung der Fresnell’schen Wellengleichung</b> (F. Schmidt) .....	26
<b>10. Adaptive Berechnung kompressibler Strömungsfelder mit Finite–Volumen–Verfahren</b> (Th. Sonar, G. Warnecke) .....	27
<b>11. Parallele Implementierung von BEM–Gebietszerlegungsmethoden</b> (O. Steinbach, W. L. Wendland) .....	28
<b>12. Ein adaptives Verfahren zur Lösung der biharmonischen Gleichung auf dünnen Gittern</b> (T. Störtkuhl) .....	29
<b>13. Implizite und explizite Lösungsverfahren der Wellengleichung am Beispiel der Beam Propagation Methods</b> (D. Uhlendorf) .....	30

## C. Monte–Carlo–Methoden und Molekulardynamik

<b>1. Simulation of Near–Continuum Rarefied Flows Using the Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) Method</b> (F. Bergemann) .....	31
<b>2. Mehrgitter Monte Carlo Algorithmen für nichtabelsche Gittereichtheorie</b> (M. Grabenstein) .....	32
<b>3. Ab Initio–Vorhersage von Protein–Strukturen — der multikanonische Ansatz</b> (U. H.E. Hansmann) .....	33
<b>4. Multigrid Monte Carlo applied to 2D nonlinear <math>\sigma</math> models</b> (M. Hasenbusch) .....	34
<b>5. Nichtgleichgewichts-Molekulardynamik (NEMD) Untersuchungen an strömenden Fluiden</b> (S. Hess) .....	35
<b>6. Ising–Spins in der Quantengravitation</b> (C. Holm, W. Janke) .....	36
<b>7. Monte-Carlo-Verfahren in der statistischen Physik und Quantenfeldtheorie</b> (W. Janke) .....	37
<b>8. Cluster Identification on a Distributed Memory Multiprocessor</b> (K. Jansen) .....	38
<b>9. Korrelationslänge in 2D-Pottsmodellen: numerische vs. exakte Ergebnisse</b> (S. Kappler, W. Janke).....	39
<b>10. Simulation der Quantenelektrodynamik auf dem Gitter in Anwesenheit dynamischer Wilson Fermionen</b> (T. Neuhaus) .....	41
<b>11. Stochastische Simulationen Nichtgleichgewichts–Systemen</b> (H. P. Breuer, F. Petruccione) .....	42
<b>12. Simulation von SOS-Modellen mit Cluster-Algorithmen</b> (K. Pinn) .....	43
<b>13. A comparison between Monte Carlo and Schwinger–Dyson calculations for a lattice Nambu–Jona–Lasinio model</b> (P. Rakow) .....	44
<b>14. Pfadintegral-Monte-Carlo mit Mehrgitter-Verfahren</b> (T. Sauer, W. Janke) .....	45
<b>15. Methode und Anwendung der Nichtgleichgewichts-Molekulardynamik Computersimulation</b> (M. Kröger, H. Voigt).....	46

## D. Sonstige Themen

<b>1. Numerische Aspekte bei der Approximation des (gemessenen) Magnetfeldes in Teilchenspektrographen mittels des Ersatzladungsverfahrens</b> (R. Degenhardt) .....	47
<b>2. Struktur und Gravitationsfelder von rotierenden Neutronensternen: ein nichtlineares elliptisches Variationsproblem</b> (H. Herold).....	48
<b>3. Effiziente Simulation der Wechselwirkung ultrakurzer Laserpulse mit molekularen Freiheitsgraden</b> (Ch. Schütte).....	49
<b>4. Numerische Analyse von Photostrom-Meßdaten</b> (H. W. Engl, D. Haarer, H. F. Kauffmann, G. Landl, H. Meyer, <u>A. Seidel</u> ) .....	50
<b>5. Extraction Methods for Boundary Integral Equations – a Combination of Computer Algebra and Numerical Methods</b> (C. Schwab, <u>W. L. Wendland</u> ).....	51
<b>6. Rechnender Raum</b> (K. Zuse).....	52
<b>Teilnehmerliste</b> .....	53

# A. Numerische Methoden für Transportmodelle

## Berechnung des Ladungsträgertransports und der Temperatur in Halbleiterbauelementen

GÜNTER ALBINUS

Institut für Angewandte Analysis und Stochastik  
Mohrenstraße 39,D – 10117 Berlin, Germany  
E-mail: [albinus@iaas-berlin.d400.de](mailto:albinus@iaas-berlin.d400.de)

### Abstract

Es wird die Behandlung eines Systems von vier partiellen Differentialgleichungen in zwei Raumdimensionen vorgestellt. Das System besteht aus der Poissongleichung für das elektrostatische Potential und aus drei Transportgleichungen für den Elektronen- und Löchertransport sowie für die Wärmeleitung. Auf Grund der Zustands- und Stromgleichungen ist das System ausgeprägt nicht-linear. Das Gesamtproblem wird als Erweiterung des weit verbreiteten Drift-Diffusionsmodells behandelt, und das Programmpaket ist auf dem Programmpaket TOSCA von H. Gajewski [3] (vgl. auch [4]) aufgebaut, da die Beiträge des Halbleitermaterials zur inneren Energie und zur Wärmeleitung die Beiträge der Ladungsträger dominieren. Neben gemischten elektrischen Randbedingungen werden auch gemischte thermische Randbedingungen gestellt. Auf Randstücken werden "natürliche" Randbedingungen dritter Art für die Temperatur gestellt. Zwischen diese Randstücken werden homogene Neumannbedingungen vorausgesetzt. Die Steuerung der verschiedenen Iterationsprozesse und der Zeitschrittweite erfolgt u.a. mit Hilfe von physikalisch motivierten Integralausdrücken. In dem Vortrag wird auch über praktische Erfahrungen berichtet.

### Literatur

- [1] G. Albinus: *Numerical Simulation of the Carrier Transport in Semiconductor Devices on the Base of an Energy Model*. Erscheint in R. E. Bank, R. Burlisch, H. Gajewski, and K. Mertens (Eds): *Mathematical Modeling and Simulation of Electrical Circuits and Semiconductor Devices*. Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, July 7 – July 11, 1992; Birkhäuser Verlag.
- [2] G. Albinus: *Über ein Energiemodell des Ladungsträgertransports in Halbleitern*. Erscheint in *Z. Angew. Math. Mech.* **74** (1993), Heft 6.
- [3] H. Gajewski u.a.: *TOSCA Handbuch (Two-dimensional SemiConductor Analysis package)*. Berlin 1987.
- [4] H. Gajewski: *Analysis und Numerik des Ladungsträgertransports in Halbleitern*. *GAMM Mitt.* **16** (1993) 1, pp. 35–57.
- [5] G. Wachutka: *Rigorous thermodynamic treatment of heat generation and conduction in semiconductor device modeling*. *IEEE Trans. CAD-9* (1990), pp. 1141–1149.

# Chemical Structure of Stellar Outflows

H. BECK, B. PATZER, E. SEDLMAYR

Institut für Astronomie und Astrophysik, Technische Universität Berlin  
Hardenbergstr. 36, D-10623 Berlin, Germany  
E-mail: beck0434@w415zrz.physik.TU-Berlin.DE

## Abstract

The role of dust is a central one in the cosmic evolution of matter. It is deeply involved in the birth of stars and planets as well as in the late stages of stellar evolution. Late-type giants are the main source of mass return from stars to the interstellar matter. However, prior to the formation of small solids a complex chemistry proceeds which determines the physical conditions and the general chemical environment for the transition from molecules to grains. Therefore the detailed study of the chemistry proceeding in the massive, extended, circumstellar shells of these objects is an prerequisite for the understanding of the late stages of stellar evolution and the reprocessing of the interstellar medium.

The chemical evolution of the outflow is described by an adequately chosen chemical reaction network. It is determined by the element abundances and the temperature and density stratification in the envelope and the time development is controlled by the various characteristic time scales introduced by collisional processes, the interaction with the radiation field, the hydrodynamic velocity of the expansion and the consumption of the dust forming species.

The problem is defined by a coupled system of nonlinear ordinary differential equations. According to the large differences in the reaction time-scales involved, appropriate methods for the integration of this non-linear system have to be applied. We will present results of our model calculations giving special emphasis to the methodical aspects and shortcomings.

Finally, as further model approaches must account for the intimate coupling of chemistry, dust formation, hydrodynamics and radiation transfer, the need of more sophisticated modelling procedures will be discussed.

## Literatur

- [1] H. Beck, H.-P. Gail, R. Henkel, E. Sedlmayr: *Chemistry in Circumstellar Shells I: Chromospheric Radiation Fields and Dust-Formation in the optically thin Shells of M-Giants*, *Astron. & Astrophys.* **265** (1992), 626.
- [2] H. Beck, H.-P. Gail, E. Sedlmayr: *Chemistry in Nova Shells*, *Astron. & Astrophys.*, (1994) in prep.
- [3] E. Sedlmayr: *From Molecules to Grains*, in IAU Coll. No. 146, (1994), **163–185**.
- [4] E. Hairer, G. Wanner: *Solving Ordinary Differential Equations II*, (1991), Springer Verlag, Heidelberg.
- [5] G. Hall, J. M. Watt (eds.): *Modern Numerical Methods for Differential Equations*, (1976), Clarendon Press, Oxford.



# Adaptive Radiation Hydrodynamics for Astrophysical Objects

E.A. DORFI

Institut für Astronomie, Universität Wien  
Türkenschanzstr. 17, A-1180 Wien, Austria  
E-mail: ead@astro.ast.univie.ac.at

## Abstract

Astrophysical objects are characterized by large variations in physical quantities e.g. density, pressures, temperatures, etc. that extend over many orders of magnitude. A number of physical processes operating on widely different timescales further complicates the computational simulation of such bodies. Taking these requirements into account we have developed a robust implicit one-dimensional method to solve radiation hydrodynamical problems. A so-called adaptive grid is used which during the computation continuously redistributes a given number of grid points at locations of steep gradients and traces propagating fronts. The physical equations are formulated in a conservative way to ensure also numerical conservation of global quantities like mass, momentum and energy. This paper deals with the basic features of the adaptive grid and the discretization scheme (second order monotonic advection, time-centered quantities). The resulting set of the non-linear discretized and therefore algebraic equations is solved by a Newton-Raphson technique. The wide applicability of the method is illustrated by several examples like the evolution of supernova remnants, protostellar collapse calculations, dust driven winds and radial stellar pulsations. Finally some open problems as well as possible improvements are discussed to encourage further research on this kind of adaptive grids.

## Literatur

- [1] E.A. Dorfi, L.O'C. Drury: *Simple adaptive grids for 1D initial value problems*. J. Comp. Phys. **69** (1987), pp. 175–195.
- [2] E.A. Dorfi, A. Gautschy: *Simple adaptive grids for astrophysical Problems*. In: The Numerical Modelling of Nonlinear Stellar Pulsations, eds. J.R. Buchler, NATO Workshop, Les Arcs, (1989) Kluwer, Dordrecht, pp. 289–302.
- [3] W.M. Tscharnuter, K.-H. Winkler: *A method for computing selfgravitating gas flows with radiation*. Comp. Phys. Comm. **18** (1979), pp. 171–199.
- [4] K.-H.A. Winkler, M.L. Norman: *WH80*, In: Astrophysical Radiation Hydrodynamics, eds. K.-H.A. Winkler and M.L. Norman, NATO-ASI Series C, Vol. **188** (1986) D. Reidel, Dordrecht, pp. 71ff.

# Selfconsistent Models of Pulsating Dust Forming Stellar Atmospheres

A. J. FLEISCHER, A. GAUGER, E. SEDLMAYR

Institut für Astronomie & Astrophysik, Technische Universität Berlin, Sek. PN 8-1  
Hardenbergstr. 36, D-10623 Berlin, Germany  
E-mail: ajf10434@w415zrz.physik.TU-Berlin.DE

## Abstract

Reliable models of the atmospheres of e.g. Miras and Long-Period Variables (LPVs) require the selfconsistent solution of the coupled system of equations of time-dependent hydrodynamics, dust formation, radiative transfer and chemistry. Only on the basis of such a solution it is possible to achieve a physical understanding of the astrophysical objects under consideration and to make predictions that can be verified by observations.

Miras and LPVs are highly evolved stars on the Asymptotic Giant Branch (AGB), shortly before ending their life as a white dwarf. During the AGB-phase they lose copious amounts of mass due to the interaction of the interior pulsation and radiation pressure on small solid particles, called dust, which are formed in their circumstellar shells. This mass loss is important either for the further evolution of the stars but also for the surrounding interstellar medium, which is substantially enriched with fresh material from these stars. Thereby, Miras and LPVs represent a necessary prerequisite for the birth of new stars.

We have developed an explicit, 1-dimensional code in spherical symmetry to solve the problem written in Lagrangian coordinates. Shock fronts are treated by an artificial tensor viscosity. Results of these calculations are presented. However, special emphasis is given to the modelling method and some numerical details, e.g. a remapping method to redistribute the grid points, an ubiquitous ingredient of Lagrangian codes. Shortcomings of the procedure as well as further extensions are discussed.

## Literatur

- [1] A.J. Fleischer, A. Gauger, E. Sedlmayr: *Generation of shocks by radiation pressure on newly formed circumstellar dust*. Astron. & Astrophys. **242** (1991), pp. L1-L4.
- [2] A.J. Fleischer, A. Gauger, E. Sedlmayr: *Circumstellar Dust Shells around Long-Period Variables: I. Dynamical models of C-stars including dust formation, growth and evaporation*. Astron. & Astrophys. **266** (1992), pp. 321-339.
- [3] H.-P. Gail, E. Sedlmayr: *Dust Formation in Stellar Winds: IV. Heteromolecular Carbon Grain Formation and Growth*. Astron. & Astrophys. **206** (1988), pp. 153-168.
- [4] A. Gauger, H.-P. Gail, E. Sedlmayr: *Dust Formation, Growth and Evaporation in a Cool Pulsating Circumstellar Shell*. Astron. & Astrophys. **206** (1988), pp. 153-168.
- [5] R.D. Richtmyer, K.W. Morton: *Difference Methods for Initial-Value Problems*. John Wiley & Sons, New York, 1967, 2<sup>nd</sup> edition.

# Numerische Lösung der Drift-Diffusionsgleichungen in Halbleitern

HERBERT GAJEWSKI

Institut für Angewandte Analysis und Stochastik  
Mohrenstraße 39, D-10117 Berlin, Germany  
E-mail: [gajewski@iaas-berlin.dpp.de](mailto:gajewski@iaas-berlin.dpp.de)

## Abstract

Das Drift-Diffusionsmodell wurde 1950 von van Roosbroeck vorgeschlagen [5] und hat seit-  
her für die mathematische Beschreibung und numerische Simulation von Ladungstransport in  
Halbleitern fundamentale Bedeutung erlangt. Es besteht aus einer Poisson-Gleichung für das  
elektrostatische Potential und Kontinuitätsgleichungen für Elektronen und Löcher [1, 4]:

$$-\nabla \cdot (\varepsilon \nabla v_0) = q(D + u_p - u_n),$$
$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + e_i \nabla \cdot J_i + R = 0, \quad i = n, p, \quad e_n = -1, \quad e_p = +1.$$

Dabei sind:  $v_0$  – elektrostatisches Potential,  $v_i$  – chemisches Potential,  $q$  – Elementarladung,  
 $u_i = c_i \exp(v_i)$  – Ladungsträgerdichte (bei Boltzmannstatistik),  $J_i = -u_i \mu_i \nabla \phi_i$  –  
Stromdichte,  $\mu_i$  – Beweglichkeit,  $\phi_i = v_0 + e_i v_i$  – elektrochemisches (Quasi-Fermi-) Po-  
tential,  $\varepsilon$  – Dielektrizität,  $D$  – Dotierungsdichte,  $R = R(x, v)$ ,  $v = (v_l)$ ,  $l = 0, n, p$  –  
Rekombinations-Generationsrate.

Bei der numerischen Lösung der Ladungsträgertransportgleichungen trifft man auf spezifische  
Schwierigkeiten, denen Standardalgorithmen für partielle Differentialgleichungen ohne weiteres  
nicht gerecht werden. Insbesondere führt der exponentielle Zusammenhang zwischen Potentialen  
und Ladungsträgerdichten zu extrem steilen Gradienten, inneren Grenzschichten und zur Domi-  
nanz von konvektiven bzw. Drifftermen in den Kontinuitätsgleichungen für die Ladungsträger.

Im Vortrag wird auf einige analytische Resultate zum Drift-Diffusionssystem eingegangen [1]  
und ihre Bedeutung für die entscheidenden numerischen Fragestellungen, Linearisierung bzw.  
Entkopplung, Orts- und Zeitdiskretisierung, erörtert. Dabei wird auf praktische Erfahrungen  
zurückgegriffen, die bei der Entwicklung des Programmsystems ToSCA [2] und seiner Anwen-  
dung (z. B. [3]) gewonnen wurden.

## Literatur

- [1] H. Gajewski, K. Gröger: *Initial boundary value problems modelling heterogeneous semi-conductor devices*. Surveys on Analysis, Geometry and Math. Phys., Teubner-Texte zur Mathematik 117, 4-53 (1990).
- [2] H. Gajewski, B. Heinemann, R. Nürnberg, H. Langmach, G. Telschow, K. Zacharias: *Der 2D-Bauelementesimulator ToSCA (Two-dimensional Semi-Conductor Analysis Package)*, Handbuch. Berlin 1986, 1991 (unpubl.).
- [3] B. Heinemann, R. Richter: *ToSCA-simulations of silicon devices*. In eds. H. Gajewski, P. Deuffhard, P. A. Markowich: NUMSIM '91, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Technical Report TR 91-8, 90-96.
- [4] P.A. Markowich, C. A. Ringhofer, C. Schmeiser: *Semiconductor Equations*. Wien 1990.
- [5] W. van Roosbroeck: *Theory of flow of electrons and holes in germanium and other semi-conductors*. Bell System Tech. J. 29 (1950), 560-607.

# Modellierung chemischer Reaktionen in porösen Medien auf Mikro- und Makro-Skalen

ULRICH HORNING

Fakultät für Informatik  
Universität der Bundeswehr München, D-85577 Neubiberg, Germany  
E-mail: ulrich@informatik.unibw-muenchen.de

## Abstract

Poröse Medien sind das Beispiel par excellence für Materialien mit Mikrostruktur. In ihnen spielt eine Hierarchie von Skalen eine natürliche Rolle: Mikro = Poren, Meso = Aggregat, Bodenprobe, Makro = Feld, Reaktor, Mega = Landschaft, Reservoir. Abgesehen davon, daß es mittels der Methode der Homogenisierung möglich ist, die üblichen Gesetze wie z.B. das *Darcy* Gesetz streng herzuleiten, ergeben sich bei Verwendung bestimmter Annahmen auf der Mikro-Skala Nicht-Standard-Modelle auf der Mako-Skala. Hierzu gehören *Modelle mit Mikro-Struktur* (Hornung (1993) [2], Showalter (1993) [5]). Ein typisches Beispiel hierfür ist das Diffusions-Konvektions-Reaktions-System

$$\begin{cases} \partial_t(\vartheta_1 u_1) + B &= \nabla_x \cdot (D_1 \nabla_x u_1 - u_1 \vec{q}) + \vartheta_1 R_1, & t > 0, x \in \Omega \\ B &= \int_{\Gamma} b \, d\Gamma, & t > 0, x \in \Omega \\ \partial_t u_2 &= \nabla_y \cdot (d_2 \nabla_y u_2) + R_2, & t > 0, x \in \Omega, y \in Y_2 \\ -\vec{\nu} \cdot d_2 \nabla_y u_2 &= b = \alpha_1 u_1 - \alpha_2 u_2, & t > 0, x \in \Omega, y \in \Gamma \end{cases} \quad (1)$$

wobei  $u_1(t, x)$  die Vektor-wertige *globale* Variable für die Konzentrationen verschiedener chemischer Substanzen in einem Reaktor  $\Omega$  sind und  $u_2(t, x, y)$  die entsprechende *lokale* Variable. Dabei beschreibt der lokale Bereich  $Y_2$  mit  $\Gamma = \partial Y_2$  die Geometrie der Mikro-Struktur des in Frage stehenden Mediums. System (1) ist von ähnlichem Typ wie das Modell mit *doppelte Permeabilität* in Arbogast, Douglas, Hornung (1990) [1], das Modell mit Adsorption in Hornung, Jäger (1991) [3] und das Modell für semipermeable Membranen in Hornung, Jäger, Mikelić (1994) [4].

Es werden einige theoretische Resultate erwähnt und die Ergebnisse numerischer Rechnungen vorgestellt. Ferner wird die besondere Bedeutung von parallelen Algorithmen für die beschriebene Problemklasse diskutiert.

## Literatur

- [1] T. Arbogast, J. Douglas, U. Hornung: *Derivation of the double porosity model of single phase flow via homogenization theory*. SIAM J. Appl. Math. **21** (1990) 823-836.
- [2] U. Hornung: *Models for flow and transport through porous media derived by homogenization*. IMA Preprint Series, Minneapolis # 1148 (1993).
- [3] U. Hornung, W. Jäger: *Diffusion, convection, adsorption, and reaction of chemicals in porous media*. J. Diff. Equat. **92** (1991) 199-225.
- [4] U. Hornung, W. Jäger, A. Mikelić: *Reactive transport through an array of cells with semi-permeable membranes*. R.A.I.R.O. Mathem. Modell. Numer. Anal. **28** (1994) 1-36.
- [5] R. Showalter: *Distributed microstructure models of porous media*. In: Douglas J. Jr., Hornung U. (Eds.) "Flow in Porous Media" ISNM **114** Birkhäuser, Basel (1993) 155-164.

# Turbulent Convection in Supernova Explosions

HANS-THOMAS JANKA

Max-Planck-Institut für Astrophysik  
Karl-Schwarzschild-Str. 1, D-85740 Garching, Germany  
E-mail: thj@ibm-2.mpa-garching.mpg.de

## Abstract

A type-II supernova is the spectacular, final stage of the evolution of a massive star after the nuclear fuel in the star's core region has been consumed in building up iron, the most tightly bound element. Due to the shut-off of the central energy source, the star undergoes a gravitational collapse within a fraction of a second. When nuclear matter density is reached, the stellar core forms a neutron star, and the outer layers of the star are ejected in the supernova explosion. According to the currently most promising model, neutrinos play a crucial role to invert the collapse of the star into a dynamical ejection of matter. A small fraction of the order of one per cent of the total energy which is carried away from the collapsed stellar core in form of neutrinos, several  $10^{53}$  erg, is thought to be transferred to the material outside of the nascent neutron star and is supposed to drive the dynamical expansion of the explosion wave ([1], [2]). Recently, it has been recognized that this energy deposition by neutrinos gives rise to turbulent, convective processes, which seem to be essential to understand the early stages and the explosion mechanism of type-II supernovae, and, moreover, which are very important for a quantitative interpretation of observational data from SN 1987A ([3], [4], [5]). The paper deals with a project to perform multi-dimensional (2-D and 3-D) hydrodynamical simulations of the physical evolution that leads to the explosion of a massive star as type-II supernova. The numerical tools to solve the hydrodynamical equations are reported, together with the attempts to adequately include the equation of state of the matter at high densities and to properly describe the interactions of neutrinos with the stellar gas.

## Literatur

- [1] H.A. Bethe, J.R. Wilson: *Revival of a stalled supernova shock by neutrino heating*. *Astrophys. J.* **295** (1985), 14.
- [2] H.-Th. Janka: *Neutrinos from type-II supernovae and the neutrino-driven supernova mechanism*. In *Conf. Proc. Vol. 40, Frontier Objects in Astrophysics and Particle Physics*, eds. F. Giovannelli and G. Mannocchi, SIF, Bologna (1993), p. 345.
- [3] M. Herant, W. Benz, S.A. Colgate: *Postcollapse hydrodynamics of SN 1987A: Two-dimensional simulations of the early evolution*. *Astrophys. J.* **395** (1992), 642.
- [4] A. Burrows, B.A. Fryxell: *An instability in neutron stars at birth*. *Science* **258** (1992), 430.
- [5] H.-Th. Janka, E. Müller: *Neutrino-driven type-II supernovae: neutrino heating and post bounce dynamics*. In: *Frontiers of Neutrino Astrophysics*, eds. Y. Suzuki and K. Nakamura, Universal Academy Press, Tokyo (1993), p. 203.

# Parallele Algorithmen zur Lösung der Strahlungstransportgleichung

GUIDO KANSCHAT

Institut für Angewandte Mathematik, Universität Heidelberg  
Im Neuenheimer Feld 293, D-69120 Heidelberg, Germany  
E-mail: kanschat@gaia.iwr.uni-heidelberg.de

## Abstract

Bei der Lösung der Strahlungstransportgleichung in der Form der diskreten Ordinaten stehen mehrere Ansätze zur Parallelisierung zur Verfügung: Verteilung der Winkel und Gebietszerlegungsmethode. Anhand numerischer Ergebnisse wird die Eignung der Ansätze für verschiedene Rechnerarchitekturen diskutiert. Die Parallelisierung nach den Ordinaten erweist sich dabei für Rechner mit hohen Kommunikationsgeschwindigkeiten als angemessene Methode, die auch den Einsatz adaptiver Verfahren möglich macht. Verschiedene zwei- und dreidimensionale Anwendungen aus den Bereichen Astrophysik (Staub- und Gaswolken), Umweltphysik (Spurenstoffanalyse) und Visualisierung werden vorgestellt.

## Literatur

- [1] J. J. Duderstadt, E. E. Lewis, C. Bardos: *Neutron Transport Equation* Editions Eyrolles, Paris 1983.
- [2] D. Mihalas, B. W. Mihalas: *Foundations of Radiation Hydrodynamics* Oxford University Press, New York etc. 1984.
- [3] S. Turek: *An Efficient Solution Technique for the Radiative Transfer Equation*. Impact of Comp. in Science and Eng. **5** (1993), pp. 201–214.

---

# Numerical Investigation of the Two-dimensional Shock Wave Reflection

KERSTIN KANTIEM

Warsaw University, Institute of Applied Mathematics and Mechanics  
Banacha 2, 02-097 Warsaw, Poland  
E-mail: `kerstin@appli.mimuw.edu.pl`

## Abstract

The main objective is the investigation of numerical boundary conditions for the two-dimensional shock wave reflection from an oblique wall. The motion of the gas is described by the Navier-Stokes equations. They are solved by a stable finite-difference method of Lax-Wendroff type.

Difficulties arise in the choice of the boundary conditions since insufficient knowledge of physical processes lead to a lack of physical boundary conditions. At the same time the so-called artificial boundary conditions which supplement the set of physical boundary conditions, if not all variables are specified, may depend on the numerical method and can provide instabilities. We present different ideas of boundary conditions [1, 2] including typical physical situations of the adiabatic slip, adiabatic no-slip and the isothermal no-slip wall as well as a proposal of a class of boundary conditions which arose in a series of shock tube experiments on the reflection of shock waves from a wall in rarefied gases.

Our goal is to solve the problem of numerical stability of the method including the presented boundary conditions and the well-posedness of the corresponding characteristic boundary value problem.

## Literatur

- [1] P. Dutt: *Stable Boundary Conditions and Difference Schemes for Navier-Stokes Equations*. SIAM J. Numer. Anal., Vol. 25, No. 2, 245–267 (1988).
- [2] T. J. Poinso, S. K. Lele: *Boundary Conditions for Direct Simulations of Compressible Viscous Flows*. J. Comp. Phys. 101, 104–129 (1992).

---

# Vergleich numerischer Verfahren für den chemischen Teil von atmosphärischen Transportmodellen

OSWALD KNOTH UND RALF WOLKE

Institut für Troposphärenforschung  
Permoserstr. 15, D-04303 Leipzig, Germany  
E-mail: `knoth@tropos.de`

## Abstract

Wir vergleichen verschiedene Verfahren zur Integration der reaktiven Umsätze in atmosphärischen Transportmodellen. Die derzeit benutzten Reaktionsmechanismen für die Beschreibung der Umsätze in der Gasphase enthalten oft bis zu 100 chemische Stoffe und mehr als 200 Reaktionen. Bei der Integration der Transportgleichungen unter Einsatz einer Operator Splitting Methode werden in den eingesetzten Codes 60% der Rechenzeit und mehr für diesen Teil benötigt. Eines der am meisten genutzten Verfahren ist das QSSA-Verfahren [4], welches als linear implizites Runge-Kutta-Verfahren mit einer Diagonalapproximation der Jacobimatrix aufgefaßt werden kann. Bei der Zeitsteuerung wird entweder eine feste Schrittweite verwendet oder sich am Umsatz orientiert. Dabei werden Fehler von bis zu 10% toleriert.

Für das als Vergleich herangezogene Gear-Verfahren wurden in den letzten Jahren verschiedene Modifikationen vorgeschlagen, welche die Struktur der Gleichungen besser ausnutzen und eine Vektorisierung entlang der Gitterzellen ermöglichen, [1], [2], [3]. Diese Modifikationen benötigen gegenüber QSSA schon bei Genauigkeitsanforderungen von 1% eine wesentlich kürzere Rechenzeit beim Test von Boxmodellen. Bei der Kopplung mit den anderen Prozessen in einem Gittermodell hängt die Effizienz obiger Methoden wesentlich von der Behandlung der Initialisierungsphase ab, die in jedem Splittingschritt erforderlich ist. Hierfür werden mögliche Ansätze erörtert.

## Literatur

- [1] M.Z. Jacobson, R.P. Turco: *SMVGEAR: A sparse-matrix, vectorized Gear code for atmospheric models*. Ersch. in Atmospheric Environment, Part A.
- [2] O. Knoth, R. Wolke: *A comparison of fast chemical kinetic solvers in a simple vertical diffusion Model*. Ersch. in 20th International Meeting on Air Pollution Modelling and its Application, Valencia, 1993.
- [3] J.G. Verwer: *Gauss-Seidel iteration for stiff ODEs from chemical kinetics*. CWI Report NM-R9315, Centre for Mathematics and Computer Science, Amsterdam.
- [4] J.G. Verwer, M. van Loon: *An evaluation of explicit pseudo-steady state approximation schemes for stiff ODE systems from chemical kinetics*. CWI Report NM-R9312, Centre for Mathematics and Computer Science, Amsterdam.



# Adaptive Linienmethoden für nichtlineare parabolische Systeme in einer Raumdimension

ULRICH NOWAK

Konrad-Zuse-Zentrum Berlin  
Heilbronner Str. 10, D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
E-mail: [nowak@sc.zib-berlin.de](mailto:nowak@sc.zib-berlin.de)

## Abstract

Ausgehend von einem klassischen Linienmethodenansatz wird ein neues numerisches Verfahren zur Lösung von hochnichtlinearen, gekoppelten Systemen von parabolisch dominanten Differentialgleichungen in einer Raumdimension vorgestellt. In der Zeit wird eine semi-implizite Euler-Diskretisierung verwendet, und im Ort wird mittels finiter Differenzen auf nicht-uniformen Gittern diskretisiert. Beide Basis-Diskretisierungen sind mit Extrapolation verbunden. Während die Zeit-Extrapolation von lokaler, variabler Ordnung ist, wird im Raum nur einmal extrapoliert. Basierend auf lokalen Fehlerschätzungen für beide Diskretisierungen, wird der Diskretisierungsfehler kontrolliert und die Diskretisierungsschrittweiten simultan und automatisch angepaßt. Neben der lokalen Anpassung der verwendeten Ortsgitter nach jedem Zeitschritt (statisches Re-gridding) ist zusätzlich auch eine Mitbewegung des Gitters während des Zeitintegrations schritts möglich (dynamisches Re-gridding). Damit besitzt das Gesamtverfahren ein hohes Maß an Adaptivität, und ist somit in der Lage, schwierige Probleme aus den praktischen Anwendungen robust und effizient zu lösen.

## Literatur

- [1] M. Bieterman, I. Babuška: *An Adaptive Method of Lines with Error Control for Parabolic Equations of the Reaction-Diffusion Type*. J. Comput. Phys. **63**, p. 33–66 (1986).
- [2] U. Nowak: *Adaptive Linienmethoden für parabolische Systeme in einer Raumdimension*. Technical Report TR 93-14, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (1993).
- [3] L.R. Petzold: *An adaptive Moving Grid Method for One-Dimensional Systems of Partial Differential Equations and its Numerical Solution*. Proc. Workshop on Adaptive Methods for Partial Differential Equations, Renselaer Polytechnic Institute (1988).
- [4] J.G. Verwer, J.G. Blom, J.M. Sanz-Serna: *An Adaptive Moving Grid Method for One-Dimensional Systems of Partial Differential Equations*. J. Comput. Phys. **82**, p. 454–486 (1989).

# Hierarchien der Transportsimulation im Halbleiter

WOLFGANG QUADE

Inst. für Theoretische Physik, TU Berlin  
Hardenbergstr. 36, D-10623 Berlin, Germany  
E-mail: quade@itp1.Physik.TU-Berlin.DE

## Abstract

Halbleiter sind heute das zentrale Element der Mikro- und Optoelektronik. Grund für diese herausragende Stellung sind ihre besonderen Transporteigenschaften. Das physikalische Verständnis dieser Eigenschaften basiert auf Transportgleichungen und der Diskussion deren Lösungen. Bis auf sehr wenige und meistens zu einfache Fälle ist man hier auf numerische Simulation angewiesen. Die wichtigsten Transportgleichungen lassen sich in einer Hierarchie anordnen. Auf der ersten Stufe stehen Momentengleichungen. Dazu gehört das Drift-Diffusions-Modell und das Hydrodynamische Modell. Die mikroskopische (semiklassische) Boltzmann-Gleichung steht auf der zweiten Stufe der Hierarchie. Die Momentengleichungen lassen sich durch vereinfachende Annahmen aus ihr ableiten. Während dort mikroskopische Information über Streumechanismen der Ladungsträger summarisch in Transportkoeffizienten zusammengefaßt wurde, treten hier die Streuprozesse explizit in der Gleichung auf. Beiden Stufen liegt die Vorstellung zugrunde, daß der Transport im Halbleiter über Teilchen mit präzisiertem Ort und Impuls stattfindet. Der Wellencharakter der Ladungsträger wird erst auf der dritten Stufe, im Rahmen des Greensfunktions- oder Dichtematrixformalismus, berücksichtigt. Mit Hilfe dieser Formalismen lassen sich Systeme von Differentialgleichungen aufstellen. Gewisse vereinfachte Teilsysteme erlauben die Ableitung der Boltzmann-Gleichung.

Die numerische Behandlung aller drei Ebenen kann, jede für sich, soweit ausgedehnt werden, daß heute zur Verfügung stehende Rechenkapazitäten nicht ausreichen. Generell kann man sagen, daß mit aufsteigender Ebene die physikalischen Abläufe genauer beschrieben werden um den Preis der Komplexität des zu beschreibenden Transports. Konkret am Beispiel der Stoßionisation (ein ladungsträgervervielfachender Streuprozess, der bei höher werdenden elektrischen Feldern und immer kleiner werdenden Abmessungen der Devices immer bedeutsamer wird) werden für alle drei Ebenen Transportsimulationen vorgestellt [1, 2, 3] und die Vor- und Nachteile diskutiert.

## Literatur

- [1] W. Quade, M. Rudan, E. Schöll: *Hydrodynamic Simulation of Impact-Ionization Effects in p-n Junctions*. IEEE Transact. on CAD **10** (1991), pp. 1287-1294.
- [2] R. Thoma, H.J. Peifer, W.L. Engl, W. Quade, R. Brunetti, C. Jacoboni: *An Improved Impact-Ionization Model for High-Energy Electron Transport in Si with Monte Carlo Simulation*. J. Appl. Phys. **69** (1991), pp. 2300-2311.
- [3] W. Quade, F. Rossi, E. Schöll: *Analogies between Coherent Optical Interactions and Quantum Transport in Semiconductor Devices*. to be published in the NATO-ASI-Series, Plenum Press (1994).

# Simulation von Akkretionsscheiben mit Smoothed Particle Hydrodynamics

H. RIFFERT

Institut für Theoretische Astrophysik, Universität Tübingen  
Auf der Morgenstelle 10, D-72076 Tübingen, Germany  
E-mail: Riffert@tat.physik.uni-tuebingen.de

## Abstract

Diese Arbeit befaßt sich mit der Anwendung der Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)-Methode auf die Simulation von Akkretionsscheiben in Doppelsternsystemen. Das SPH-Verfahren (siehe [1]) wird dabei zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung für kompressible Flüssigkeiten eingesetzt. Alle Feldfunktionen wie Dichte, Druck etc. werden mit Hilfe eines Glättungskerns über ein endliches Volumen – charakterisiert durch die Smoothing-Länge  $h$  – ausgeschmiert; die auftretenden Ableitungen können dabei auf den Kern übertragen werden. Die Integration der Gleichungen erfolgt an mit dem Fluid mitbewegten Interpolationspunkten, ohne ein zusätzliches raumfestes Gitter.

Die Struktur und Dynamik von Akkretionsscheiben wird ganz wesentlich durch viskose Prozesse in der Scheibe bestimmt, sie sind für den Massenstrom und den Drehimpulstransport verantwortlich. Die Implementierung einer physikalischen Viskosität in das SPH-Verfahren ist also entscheidend für die Modellierung dieser Scheiben. Dazu gibt es eine Reihe von Arbeiten ([2], [3]), jedoch werden die viskosen Kräfte auf eine sehr unklare Weise beschrieben, vielfach in Anlehnung an die künstliche Viskosität nach von Neumann und Richtmyer [4] zur Simulation viskoser Prozesse in Stoßfronten.

Zur Ableitung eines SPH-Ausdrucks für die Scherviskosität gehen wir von der Kontinuumsdarstellung des viskosen Spannungstensors aus [5], der sich mit Hilfe eines geeigneten Smoothing-Verfahrens in die SPH-Formulierung übertragen läßt. Die auftretenden zweiten Ableitungen werden durch Produkte erster Ableitungen des Smoothing-Kerns  $W$  behandelt; ein Teil des viskosen Kraftterms lautet dann beispielsweise

$$\Delta \mathbf{v}|_i = \sum_{j,k} \frac{m_j m_k}{\rho_j \rho_k} \left[ (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_i) \nabla W_{ij} \cdot \nabla W_{ik} + (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_j) \nabla W_{ij} \cdot \nabla W_{jk} \right] .$$

Diese Form der Viskosität liefert im Grenzwert  $h \rightarrow 0$  den korrekten Kontinuumslimes, während die übliche künstliche Viskosität in diesem Grenzfall verschwindet. Weiterhin ist die viskose Energieproduktion und die Drehimpulserhaltung bis zur zweiten Ordnung in  $h$  gewährleistet. Die zeitliche Entwicklung einer Akkretionsscheibe wurde in der Näherung der dünnen Scheibe durchgeführt (2D-Simulation). Die Rechnung erfolgt mit 10000 Teilchen und überdeckt ca. 200 Bahnperioden vom Beginn des Massentransfers bis zur stationären Scheibe.

## Literatur

- [1] J.J. Monaghan: *Particle methods for hydrodynamics*, Comp. Phys. Rep. **3** (1985), p. 71.
- [2] R. Whitehurst: *Numerical simulations of accretion discs. Pt. 1. Superhumps: a tidal phenomenon of accretion discs*, Mon. Not. R. Astron. Soc. (MNRAS) **232** (1989), p. 35.
- [3] S.H. Lubow: *Dynamics of Eccentric Disks with Application to Superhump Binaries*. Astrophys. J. **401** (1992), p. 317.
- [4] J. von Neumann, R.D. Richtmyer: *A Method for the Numerical Calculation of Hydrodynamic Shocks*. J. Appl. Phys. **21** (1950), p. 232.
- [5] L.D Landau, E.M. Lifschitz: *Hydrodynamik*. Akademie Verlag GmbH, Berlin (1991).

# 3D Hydrodynamic Simulations of Bondi–Hoyle Accretion

MAXIMILIAN RUFFERT

Max-Planck-Institut für Astrophysik  
Karl-Schwarzschild-Str. 1, D-85740 Garching, Germany  
E-mail: mor@mpa-garching.mpg.de

## Abstract

The simplest analytical approximations of accretion (Bondi & Hoyle, 1944, and references therein) do not compare well with the results of numerical models: important discrepancies include the presence and intensity of accretion wake oscillations in 2D and 3D models, quasi-periodic variations between quiescent, stable accretion and active, turbulent phases, etc. (Fryxell & Taam, 1989; Matsuda et al., 1991). Because of the inherently largely differing length scales (very small size of accretor compared to the long range gravitational forces) the 3D models are numerically intensive, so only few calculations have been done to date, and those were mostly tentative because of low local resolution. We will present simulations using the following features: a) gravity of accretor (softened point mass), b) maximally accreting surface (vacuum sphere), c) hydrodynamically modeled (inviscid, compressible) ideal gas (piecewise parabolic method PPM; Colella & Woodward, 1984), d) relative motion of accretor and surrounding medium. We use multiply nested and refined (cartesian) grids to focus the CPU resources onto active areas of the computational volume: the shortest timescales and highest resolution are only needed in the direct vicinity of the accretor. Details of our version can be found in Ruffert (1992). Depending on the dynamic range (ratio of the size of the whole computational volume to the size of the finest zone) of the problem, grids are typically nested to a depth of 5–10 levels. In our version each grid has the same number of zones and the same shape (equidistant, cartesian), but the zone size decreases by a factor of two at every level of refinement (the Courant condition implies an analogous decrease in the timestep). Using  $32^3$  grids at every level we currently obtain relative local resolutions (dynamic range) of  $16384^3$ . This allows us to adequately resolve an accretor of size  $0.01R_a$  ( $R_a =$  Hoyle-Lyttleton accretion radius) over 10 zones while at the same time covering a volume of  $32^3R_a$ ! In order to visualise the models, ray traced frames are produced from the datasets and strung up into a movie.

## Literatur

- [1] H. Bondi, F. Hoyle: *On the Mechanism of Accretion by Stars*. MNRAS, **104**, 273 (1944).
- [2] P. Colella, P.R. Woodward: *The Piecewise Parabolic Method (PPM) for Gas-Dynamical Simulations* JCP, **54**, 174 (1984).
- [3] B.A. Fryxell, R.E. Taam: *Numerical Simulations of Nonaxisymmetric Adiabatic Accretion Flow*. ApJ, **335**, 862 (1989).
- [4] T. Matsuda, N. Sekino, Sawada, et al: *Mass Transfer by Tidally Induced Spiral Shocks in an Accretion Disk*. A&A, **248**, 301 (1991).
- [5] M. Ruffert: *Collisions Between a White Dwarf and a Main-Sequence Star. II. Simulations Using Multiple-Nested Refined Grids*. A&A, **265**, 82 (1992).

# Numerical Solution of the Stationary Multigroup Diffusion Equations

WERNER SCHMID<sup>1</sup>

Mathematisches Institut, Technische Universität München  
Arcisstr. 21, D-80290 München, Germany  
E-mail: `schmid@mathematik.tu-muenchen.de`

## Abstract

A central problem in the safety analysis of nuclear reactors is the determination of the neutron distribution in the reactor core. This is usually done by treating the neutron motion as a diffusion process and solving the diffusion equation numerically. We consider the numerical solution of the stationary multigroup neutron diffusion equations, i.e. the solution of a coupled system of elliptic partial differential equations. This system results from an energy discretization of the energy dependent neutron diffusion equation. When external neutron sources are neglected we arrive, after discretization in space, at a generalized algebraic eigenproblem that is solved by generalizing multigrid concepts from [1], [2] and [4] to this problem. Two different approaches are used: multigrid as an iterative solver within an inverse iteration and a direct multigrid approach to eigenproblems taking care of the special structure within the multigrid cycles. Numerical results for 2-D test problems are presented and various shift techniques are compared with the more direct approach.

## Literatur

- [1] R. E. Bank: *Analysis of a Multilevel Inverse Iteration Procedure for Eigenvalue Problems*. SIAM J. Numer. Anal. **19**, 886-898 (1982).
- [2] A. Brandt, S. McCormick and J. Ruge: *Multi-Grid-Methods for Differential Eigenproblems*. SIAM J. Sci. Stat. Comput. **4**, 244-260 (1983).
- [3] H. Finnmann, R. Böer, R. Müller and Y.I. Kim: *Multi-level Techniques for the Acceleration of Nodal Reactor Calculations*. Proc. Int. Top. Meeting Advances in Math. Computations and Reactor Physics, Pittsburgh (1991).
- [4] W. Hackbusch: *Multi-Grid Methods and Applications*. Springer, Berlin (1985).
- [5] E.L. Wachspress: *Iterative Solution of Elliptic Systems*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ (1966).

—

---

<sup>1</sup>The author was supported by a Ph.D. grant of the SIEMENS AG.

# Efficient discretization and solution techniques for the multidimensional radiative transfer equation

STEFAN TUREK

Institut für Angewandte Mathematik  
Im Neuenheimer Feld 294, D-69120 Heidelberg, Germany  
E-mail: [ture@gaia.iwr.uni-heidelberg.de](mailto:ture@gaia.iwr.uni-heidelberg.de)

## Abstract

The discretization of the multidimensional radiative transfer equation results in a very large linear system of equations. The standard solution method used by astrophysicists is a simplified fixed point iteration (called Approximate  $\Lambda$ -iteration) which may become slow for physically interesting problems. As an alternative a class of conjugate gradient-like variants is proposed with a special preconditioner. Further improvement can be reached by a generalized scalar flux formulation which may lead to positive definite operators. Additionally, by avoiding the separate calculation of the intensities the dimension of the problem is reduced and the large amount of computational storage is suppressed. For the spatial discretization special upwind techniques are required which allow in combination with appropriate grid resorting strategies a very fast solution of the transport problems. The efficiency of these new techniques even on nonuniform and solution adapted grids is demonstrated by several test calculations, also for physically relevant data.

## Literatur

- [1] Chr. Führer: *A comparative study of finite element solvers for hyperbolic problems with applications to radiative transfer*. Technical report SFB 359, 65, University Heidelberg, 1993.
- [2] D. Mihalas, B. Weibel-Mihalas: *Foundations of Radiation Hydrodynamics*. Oxford University Press, 1984.
- [3] S. Turek: *An efficient solution technique for the radiative transfer equation*. Impact of computing in science and engineering, 5, 201–214, 1993.
- [4] S. Turek: *A generalized mean intensity approach for the numerical solution of the radiative transfer equation*. submitted to Computing.
- [5] S. Turek, R. Wehrse: *Spectral appearance of dust enshrouded stars: A combination of a strongly accelerated solution technique with a finite element approach for 2D radiative transfer*. Astronomy and Astrophysics, Springer, 1993 (to appear).

## B. Multilevel Methoden

### Dünngitterverfahren zur Lösung von Eigenwertproblemen des Typs $\Delta u + q(x) \cdot u = \lambda u$ (Teil 1 und 2)

ROBERT BALDER UND SASCHA HILGENFELDT

Institut für Informatik, Technische Universität München  
Arcisstr. 21, D-80333 München, Germany  
E-mail: balder,hilgenfe@informatik.tu-muenchen.de

#### Abstract

Dünne Gitter stehen zunächst für ein Verfahren, glatte multivariate Funktionen erheblich effizienter darzustellen als mit herkömmlichen vollen Gittern. Im letzteren Fall, bei multilinearen Ansatzfunktionen und einer Diskretisierung mit Maschenweite  $h$ , benötigt man im  $d$ -dimensionalen Raum  $O(h^{-d})$  Parameter, um eine Approximationsgenauigkeit der Größenordnung  $O(h^2)$  zu erreichen. Bei Dünngitteransatzfunktionen, das sind passend gewählte, hierarchische, multilineare Ansatzfunktionen, kommt man mit nur  $O(h^{-1} \cdot \log(h)^{d-1})$  Parametern aus, um eine Approximationsgenauigkeit von  $O(h^2 \cdot \log(h)^{d-1})$  zu erreichen. Die Verallgemeinerung auf adaptive dünne Gitter, wie sie für nicht glatte Funktionen benötigt werden, ist trivial. In den letzten Jahren wurden verschiedene Verfahren zur Lösung von partiellen Differentialgleichungen auf adaptiven dünnen Gittern entwickelt, siehe z.B. [1].

Im ersten Vortrag wird zunächst die Idee dünner Gitter erläutert, und ein Galerkin-Ansatz zur Lösung partieller Differentialgleichungen der Form

$$\Delta u + q(x) \cdot u + \lambda \cdot u = f \quad (2)$$

auf dünnen Gittern vorgestellt. Eine Verallgemeinerung regulärer dünner Gitter auf adaptive dünne Gitter ist sehr einfach, und ohne zusätzlichen Speicheraufwand möglich. Auch werden Mehrgitterverfahren zur effizienten Lösung der entsprechenden Gleichungssysteme angesprochen. Eigenwertprobleme des Typs

$$\Delta u + q(x) \cdot u = \lambda \cdot u \quad (3)$$

lassen sich beispielsweise durch eine verallgemeinerte Wielandt-Iteration lösen. Eine einzelne Iteration erfordert dabei die Lösung eines Problems der Form (2).

Im zweiten Vortrag stellen wir numerische Ergebnisse zu Eigenwertproblemen (3) vor, wie zum Beispiel zum quantenmechanischen harmonischen Oszillator ( $q(x) = r^2$ ,  $r = (\sum x_i^2)^{1/2}$ ) oder zur stationären Schrödingergleichung des Wasserstoffatoms ( $q(x) = -\frac{1}{r}$ ). Für den zweidimensionalen anisotropen harmonischen Oszillator können wir Vergleiche mit anderen Finite-Element-Programmen anführen [2]. Es zeigt sich, daß der Dünngitteransatz, bei Ansatzfunktionen gleicher Ordnung, dem gewöhnlichen Finite-Element-Ansatz deutlich überlegen ist. Die folgende Tabelle zeigt einige relative Fehler im Eigenwert des Grundzustandes in Abhängigkeit von der Anzahl der Stützstellen bei multilinearen Ansatzfunktionen. In den letzten Spalten sind auch entsprechende Ergebnisse für einen dreidimensionalen anisotropen harmonischen Oszillator angeführt. Hier wird noch einmal die vergleichsweise schwache Abhängigkeit der Knotenzahl für gegebene Genauigkeit von der Dimension deutlich.

Ergebnisse vergleichbarer Genauigkeit erzielen wir auch für anharmonisch gestörte Oszillatorpotentiale ( $q(x) = r^2 + \varepsilon r^4$ ).

Finite Elemente [2]		dünne Gitter		dünne Gitter 3D	
Knotenzahl	Fehler	Knotenzahl	Fehler	Knotenzahl	Fehler
849	3.335e-3	770	1.759e-4	1024	6.759e-4
9425	2.964e-4	4098	7.497e-5	7424	4.271e-4
24013	1.164e-4	20482	2.278e-6	18944	1.456e-4
Extrapolation:	1e-6	Extrapolation:	4e-9		

Tabelle 1: harmonischer Oszillator

Die dreidimensionale stationäre Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom enthält einen Pol im Potentialterm. Dies macht eine adaptive Verfeinerung der dünnen Gitter notwendig. Unser Algorithmus liefert für dieses Problem gute Eigenwerte, beim Grundzustand erhalten wir einen relativen Fehler  $< 10^{-3}$ . Dabei wird weder die inhärente Symmetrie der Aufgabenstellung ausgenutzt, noch werden speziell auf das Problem zugeschnittene Ansatzfunktionen benötigt. Daher ist unser Verfahren auf eine große Klasse von stationären Schrödingerproblemen unmittelbar anzuwenden. Dies zeigt sich auch bei Rechnungen für das Wasserstoffmolekülion ( $H_2^+$ ); die Genauigkeit der Eigenwerte, hier bezogen auf Referenzwerte aus Arbeiten wie [3, 4], ist mit der beim Wasserstoffatom erhaltenen vergleichbar.

## Literatur

- [1] H.-J. Bungartz: *Dünne Gitter und deren Anwendung bei der adaptiven Lösung der dreidimensionalen Poisson-Gleichung*. Technische Universität München, Dissertation (1992).
- [2] J. Ackermann, R. Roitzsch: *On a Two-Dimensional Multilevel Finite Element Method for the Time-Independent Schrödinger-Equation*. Konrad-Zuse-Zentrum, Berlin (1993).
- [3] L. Laaksonen, P. Pyykkö, D. Sundholm: *Two-Dimensional Fully Numerical Solutions of Molecular Schrödinger Equations. I. One-Electron Molecules*. Int. J. Quantum Chem. **23**, 309-317 (1983).
- [4] H. Hogreve: *On the stability of the one-electron bond*. J. Chem. Phys. **98**, 5579 (1993).



# Multiscale Decompositions and Applications

WOLFGANG DAHMEN

Institut für Geometrie und Praktische Mathematik, RWTH Aachen  
Templergraben 55, D-52056 Aachen, Germany  
E-mail: [dahmen@igpm.rwth-aachen.de](mailto:dahmen@igpm.rwth-aachen.de)

## Abstract

The common ground of essentially all multiscale methods for the numerical solution of integral or differential equations is to work not only with a single trial space  $S_m$  but to exploit the interaction of a whole hierarchy of nested spaces  $S_0 \subset S_1 \subset \dots \subset S_m$ . Specifically, forming appropriate complements  $S_{j+1} = S_j \oplus W_{j+1}$  the fine level space  $S_m$  may be viewed as obtained by successively updating coarser spaces, i.e.,  $S_m = S_0 \oplus W_1 \oplus \dots \oplus W_m$ . A multiscale basis of  $S_m$  is then obtained by catenating bases of the individual components. A typical example are *hierarchical bases* of finite element spaces. Alternatively, choosing  $W_j$  to be *orthogonal complements* leads to the wavelet concept which is closely related to the BPX-preconditioner for elliptic problems. However, aside from the issue of preconditioning, such decompositions play an important role when dealing with operators with global Schwartz kernel which, for instance, arise in connection with boundary element methods (see e.g. [4]). Although in general this gives rise to *non-sparse* stiffness matrices one can show that stiffness matrices relative to suitable multiscale bases exhibit such a strong decay of their entries away from the diagonal that they can be approximated well by sparse matrices [1, 3]. In contrast to preconditioning it is important in this case to know such bases explicitly.

The objective of this talk is to discuss some concepts for constructing such decompositions and to identify those properties that make them suitable in the above sense. Important issues in this context are stability and efficiency of the corresponding multiscale transformations and the realization of moment conditions of possibly high order. If time permits a stability and convergence analysis is outlined which ensures that the solutions to the compressed schemes still converge at an asymptotically optimal rate [2, 3]. The results are illustrated by some numerical studies for the double layer potential equation on a polyhedron [4].

## Literatur

- [1] G. Beylkin, R. Coifman, and V. Rokhlin, Fast Wavelet Transforms and Numerical Algorithms I, Comm. Pure and Appl. Math. **XLIV** (1991), 141-183.
- [2] W. Dahmen, S. Prössdorf, and R. Schneider, Wavelet Approximation Methods for Pseudodifferential Equations I: Stability and Convergence, to appear in Math. Z.
- [3] W. Dahmen, S. Prössdorf, and R. Schneider, Wavelet Approximation Methods for Pseudodifferential Equations II: Matrix Compression and Fast Solution, Advances in Computational Mathematics **1**(1993), 259-335.
- [4] W. Dahmen, B. Klemann, S. Prössdorf, and R. Schneider, A Multiscale Method for the Double Layer Potential Equation on a Polyhedron, to appear in: Advances of Computational Mathematics, H.P. Dikshit, C.A. Micchelli, eds., IGPM Report # 91, Nov. 1993.
- [5] A. Harten, Multiresolution Representation of Data, CAM Report 93-13, UCLA, 1993.

# Das Kaskadenprinzip für partielle Differentialgleichungen

PETER DEUFLHARD

Konrad-Zuse-Zentrum Berlin  
Heilbronner Str. 10, D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
E-mail: deuffhard@sc.zib-berlin.d400.de

## Abstract

Am ZIB wird seit einigen Jahren mit Erfolg an der adaptiven Multilevel-Finite-Elemente-Lösung partieller Differentialgleichungen gearbeitet. Der Vortrag soll einen Überblick über die Grundideen und die bisher behandelten Problemtypen geben.

Zunächst soll das Kaskadenprinzip am Beispiel einer skalaren elliptischen Differentialgleichung zweiter Ordnung erläutert werden. Grundbausteine sind hierbei geschachtelte konjugierte Gradientenverfahren mit geeigneter Vorkonditionierung, lokale Schätzer für den Diskretisierungsfehler, globale Schätzer für Diskretisierungsfehler und Iterationsfehler (in der Energienorm) sowie geschachtelte adaptive Gitter mit entsprechenden Verfeinerungsregeln. Verschiedene Vorkonditionierungstechniken wie hierarchische Basen, BPX oder einfache diagonale Vorkonditionierungen werden verglichen bezüglich Rechenzeit und Implementierungsaufwand. Hier gibt es eine wirkliche Überraschung! Verallgemeinerungen in Richtung Nichtlinearität und Systemfall werden diskutiert und illustriert. Jüngste Ergebnisse über Fehlerschätzer im 3-D werden vorgeführt.

Als Prototyp für zeitabhängige partielle Differentialgleichungen wird die adaptive Rothe-Methode bei finiten Elementen am skalaren parabolischen Spezialfall behandelt. Automatische Zeitschritt-Steuerung sowie zeitabhängige Multilevel-Gitter-Steuerung werden diskutiert und illustriert. Verallgemeinerungen in Richtung Diffusions-Reaktionssysteme und Schrödingergleichung werden dargestellt. Die vorgetragenen Methoden eignen sich nicht für rein hyperbolische Probleme ohne Dissipation.

## Literatur

- [1] F. Bornemann: *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations III*. IMPACT Comput. Sci. Engrg. **4**, pp.1-45 (1992).
- [2] F. Bornemann, B. Erdmann, R. Kornhuber: *Adaptive Multilevel-Methods in Three Space Dimensions*. Int. J. Numer. Methods Eng. **36** (1993), pp. 3187-3203.
- [3] F. Bornemann, B. Erdmann, R. Kornhuber: *A Posteriori Error Estimates for Elliptic Problems in Two and Three Space Dimensions*. Technical Report TR 93-29, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (ZIB) (1993).
- [4] P. Deuffhard: *Cascadic Conjugate Gradient Methods for Elliptic Partial Differential Equations I. Algorithm and Numerical Results*. Preprint SC 93-23, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (ZIB) (1993). To appear: Proc. PennState 7th Int. Conf. on Domain Decomp. Methods, October 1993, AMS.
- [5] P. Deuffhard, P. Leinen, H. Yserentant: *Concepts of an Adaptive Hierarchical Finite Element Code*. IMPACT Comput. Sci. Engrg. **1**, pp. 3-35 (1989).

# Ein Mehrgittervorkonditionierer für partielle Differentialgleichungen mit variierenden Koeffizienten, die in Transport- und Diffusionsproblemen auftreten.

JÜRGEN FUHRMANN

Institut für Angewandte Analysis und Stochastik Berlin  
Mohrenstraße 39, 10117 Berlin-Mitte, Germany  
E-mail: fuhrmann@iaas-berlin.d400.de

## Abstract

Die Entwicklung von Mehrgittervorkonditionierern für die numerischen Lösung elliptischer partieller Differentialgleichungen zweiter Ordnung, die eine optimale Komplexität der Lösung dieser Probleme ermöglichen würden, stößt aufgrund des in einigen Fällen fehlenden FEM-Kontextes der verwendeten Diskretisierung, stark variierender Koeffizientenfunktionen oder der Asymmetrie der Probleme vielfach auf Schwierigkeiten.

Hier soll ein Verfahren vorgestellt werden, welches zumindest für einige Klassen von Problemen der beschriebenen Art verwendbar ist und sich zum Teil mit Hilfe von Argumenten aus der Theorie algebraischer Mehrgitterverfahren erklären läßt.

Dieses Mehrgitterverfahren wurde für zwei- und dreidimensionale quaderförmige und toroidale Netze unter Verwendung von 5- bzw. 7-Diagonalmatrizen implementiert. Die zentrale Idee des Verfahrens besteht in der Verwendung von operatorabhängigen Restriktionen und Prolongationen und der Generierung eines zum jeweiligen Galerkingrobgitteroperator spektraläquivalenten 5- bzw. 7-diagonalen Grobgitteroperators aus den Koeffizienten des Feingitteroperators. Davon ausgehend, kann das Verfahren als semialgebraisch bezeichnet werden — aufgrund der Rechtecknetzstruktur ist die Topologie der groben Gitter bekannt, alle anderen Informationen werden aus den Problemdaten auf dem feinsten Gitter erzeugt. Als Glätter wurde eine unvollständige LU-Zerlegung gewählt. Zur Lösung des Problems auf dem größten Gitter wird ein fixes Tschebyschew-Polynom aus unvollständigen LU-Zerlegungen verwendet, wahlweise können hier auch CG-ähnliche Verfahren eingesetzt werden. Der Code läßt sich als Vorkonditionierer in CG-ähnlichen Verfahren einsetzen.

## Literatur

- [1] J. Fuhrmann: *An algebraically defined multigrid method*, Journal of Numerical Linear Algebra with Applications, (1994), submitted.
- [2] J. Fuhrmann: *Calculation of saturated-unsaturated flow in porous media with a Newton-multigrid method*, in GAMM-Seminar on Multigrid Methods, Gosen, September 1992, S. Hengst, ed., Berlin, 1993, Institut für Angewandte Analysis und Stochastik Berlin. Report No. 5.
- [3] J. Fuhrmann, K. Gärtner: *Multigrid becomes a competitive algorithm for some 3D device simulation problems*. Proceedings of SISDEP'93, Wien, submitted.
- [4] J. Ruge and K. Stüben: *Algebraic multigrid*, in Multigrid methods, S. McCormick, ed., vol. 4 of Frontiers in Applied Mathematics, SIAM, Philadelphia, 1987, ch. 4, 73–130.
- [5] P. de Zeeuw: *Matrix-dependent prolongations and restrictions in a black box multigrid solver*. J. Comp. Appl. Math, 33 (1990), 1–27.

# Gemischte Finite Elemente Diskretisierung der Kontinuitätsgleichungen aus der Halbleitersimulation

RALF HIPTMAIR

Mathematisches Institut, Technische Universität München  
Arcisstr. 21, D-80929 München, Germany  
E-mail: [hiptmair@mathematik.tu-muenchen.de](mailto:hiptmair@mathematik.tu-muenchen.de)

## Abstract

Die numerische Simulation von Halbleiterbauelementen, die auf dem Drift-Diffusionsmodell (vgl. [4]) aufsetzt, ist schließlich mit Konvektions-Diffusionsproblemen mit den Dichten beweglicher Ladungsträger als Unbekannter konfrontiert. Stark anisotrope Dotierung führt zu deren singulärer Störung in Gestalt lokal dominanter Konvektion, die Standarddiskretisierungen scheitern läßt. Von tauglichen Diskretisierungen ist Ladungserhaltung zu fordern. Diese ist insbesondere bei Methoden auf der Basis gemischter Finiten Elemente (siehe [1]) gewährleistet, die daher u.a. in [2] für die Halbleitersimulation vorgeschlagen wurden. Bei Verwendung simplizialer Triangulationen in Verbindung mit Raviart-Thomas-Elementen (vgl. [5]) stellt man jedoch fest, daß die Anwesenheit stumpfwinkliger Elemente die Güte gemischter Diskretisierungen empfindlich beeinträchtigt (vgl. [3]). Dies läßt sich deuten als ungenügende Approximation des lokalen Flusses. Ein Ausweg bietet sich an in der Erweiterung der lokalen Flußräume, was auf nicht-konforme Finite-Elemente-Räume führt. Um in diesem Fall die Konsistenz der Diskretisierung sicherzustellen, ist eine sorgfältige Analyse der Kopplung zwischen den Elementen im Rahmen eines "patch-Tests" erforderlich.

## Literatur

- [1] F. Brezzi, M. Fortin: *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*. Springer-Verlag, New York (1991).
- [2] F. Brezzi, L. D. Marini, P. Pietra: *Two Dimensional Exponential Fitting and Application to Drift-Diffusion Models*. SIAM J. Numer. Anal. **26** (1989) 1347-1355.
- [3] R. Hiptmair, R.H.W. Hoppe: *Mixed Finite Element Discretization of Continuity Equations arising in Semiconductor Device Simulation*. TUM-Report 93-2, Mathematisches Institut der Technischen Universität München (1993).
- [4] P. A. Markowich: *The Stationary Semiconductor Device Equations*. Springer-Verlag, Wien (1985).
- [5] P. A. Raviart, J. M. Thomas: *A Mixed Finite Element Method for Second Order Elliptic Problems*. Lecture Notes in Mathematics, **606**, Springer-Verlag, Berlin (1977).

# Mehrgittermethoden für Propagatoren in Gittereichtheorien

THOMAS KALKREUTER<sup>1</sup>

Universität Kaiserslautern, Fachbereich Physik  
Erwin-Schrödinger-Straße, D-67663 Kaiserslautern, Germany  
E-mail: kalkreut@x4u2.desy.de

## Abstract

Mehrgittermethoden wurden für die Lösung diskretisierter partieller Differentialgleichungen in geordneten Systemen erfunden, um die Langsamkeit traditioneller Algorithmen durch “Updates” auf verschiedenen Längenskalen zu überwinden. In diesem Vortrag werden Verallgemeinerungen von Mehrgitterverfahren für ungeordnete Systeme, konkret für Propagatoren in Eichfeldern, untersucht. In ungeordneten Systemen muß man einen Glattheitsbegriff wählen, der von der Dynamik abhängt. Ziel unserer Untersuchungen ist es, ein effizientes Verfahren zu finden, mit dem man ohne “critical slowing down” kovariante Diracgleichungen lösen kann, um so Monte-Carlo-Simulationen der QCD (Quantenchromodynamik) zu beschleunigen. Prinzipiell können die vorgestellten Verfahren aber in beliebiger Raum-Zeit-Dimension und für beliebige Eichgruppe verwandt werden. Überdies gibt es Anwendungen in Mehrgitter-Monte-Carlo-Simulationen, sowie zur Definition von Blockspins und geblockten Eichfeldern in Monte-Carlo-Renormierungsgruppenstudien. Als zentrales Resultat wurde gefunden, *daß die (geometrische) Mehrgittermethode im Prinzip in beliebig ungeordneten Eichfeldern funktioniert.*

## Literatur

- [1] R. Ben-Av, M. Harnatz, P.G. Lauwers, and S. Solomon: *Parallel-Transported Multigrid for Inverting the Dirac Operator: Variants of the Method and their Efficiency*. Arbeitspapiere der GMD 674, August 1992.
- [2] A. Hulsebos, J. Smit, and J.C. Vink: *Multigrid Inversion of Lattice Fermion Operators*. Nucl. Phys. **B368** (1992) 379.
- [3] R.C. Brower, R.G. Edwards, C. Rebbi, and E. Vicari: *Projective Multigrid for Wilson Fermions*. Nucl. Phys. **B366** (1991) 689.
- [4] T. Kalkreuter, G. Mack, and M. Speh: *Blockspin and Multigrid for Staggered Fermions in Non-Abelian Gauge Fields*. Int. J. Mod. Phys. **C3** (1992) 121.
- [5] T. Kalkreuter: *Multigrid Methods for the Computation of Propagators in Gauge Fields*. Ph. D. thesis and preprint DESY 92-158 (November 1992), shortened version to appear in Int. J. Mod. Phys. C.

---

<sup>1</sup>Mailing address: II. Institut für Theoretische Physik, Universität Hamburg, Luruper Chaussee 149, D-22761 Hamburg, Germany

# Multilevel-Vorkonditionierung für Sattelpunktsprobleme

ANGELA KUNOTH

Institut für Informatik, Fachbereich Mathematik und Informatik, Freie Universität Berlin  
Takustr. 9, D-14195 Berlin, Germany  
E-mail: kunoth@inf.fu-berlin.de

## Abstract

Zur Lösung elliptischer partieller Differentialgleichungen mit einem Galerkin-Ansatz werden üblicherweise die Randbedingungen in die Approximationsräume eingeschlossen und als deren Basen Finite Elemente verwendet. Wenn man allgemeinere Ansatzfunktionen, etwa Wavelet-artige Funktionen, wählt, die in anderer Hinsicht vorteilhaft sind, bei denen aber die Erfüllung der Randbedingungen Schwierigkeiten bereiten kann, ist das Anhängen der Randbedingungen mit Hilfe Lagrangescher Multiplikatoren eine geeignetere Methode. Dieser Ansatz führt zu Sattelpunktsproblemen, die im Unterschied zu dem Fall der eingeschlossenen Randbedingungen nicht positiv definit sind.

Wir beschäftigen uns in diesem Vortrag mit Multilevel-Techniken, um die aus Sattelpunktsproblemen entstehenden linearen Gleichungssysteme vorzukonditionieren und somit die Verwendung iterativer Verfahren zu beschleunigen.

Ein solcher hierarchischer Ansatz wurde erstmals in [5] für bivariate Probleme zweiter Ordnung mit in die Approximationsräume eingeschlossenen Randbedingungen und typischen Finite Elementen vorgestellt. Für dieses Problem lassen sich unter Benutzung des BPX-Vorkonditionierers [1] gleichmäßig beschränkte, d.h. von der Verfeinerungstiefe unabhängige Konditionszahlen realisieren [2], [4]. Unter Verwendung von Techniken aus der Theorie der Funktionenräume wurden in [2] für multivariate Probleme beliebiger Ordnung im Fall der eingeschlossenen Randbedingungen allgemein die Bedingungen herausgearbeitet, die die gleichmäßige Beschränktheit der Konditionszahlen der entsprechenden Steifigkeitsmatrix garantieren.

Die Konstruktion geeigneter Vorkonditionierer für Sattelpunktsprobleme basiert auf Multiskalierungsvorkonditionierern für das Schur-Komplement und Normabschätzungen für Sobolev-Räume auf dem Rand des zugrundeliegenden Gebiets. Speziell zeigen wir in Erweiterung der Ergebnisse in [2] bezüglich der angehängten Randbedingungen, wie sich für Sattelpunktsprobleme gleichmäßig beschränkte Konditionszahlen realisieren lassen. Die hier vorgestellten Ergebnisse beruhen auf den Ausführungen in [3].

## Literatur

- [1] J.H. Bramble, J.E. Pasciak and J. Xu: *Parallel multilevel preconditioners*, Math. Comp. **55** (1990), pp. 1–22.
- [2] W. Dahmen and A. Kunoth: *Multilevel preconditioning*, Numer. Math. **63** (1992), pp. 315–344.
- [3] A. Kunoth: *Multilevel Preconditioning*, Dissertation, Fachbereich Mathematik und Informatik, Freie Universität Berlin, Januar 1994.
- [4] P. Oswald: *On discrete norm estimates related to multilevel preconditioners in the finite element method*, in: Constructive Theory of Functions, Proc. Int. Conf. Varna 1991, K.G. Ivanov, P. Petrushev, B. Sendov (eds.), Bulg. Acad. Sci., Sofia 1992, pp. 203–214.
- [5] H. Yserentant: *On the multilevel splitting of finite element spaces*, Numer. Math. **49** (1986), pp. 379–412.

# Ein robustes Finite-Element-Verfahren für die dreidimensionale Bauelementsimulation

FRANCESCO MONTRONE

Bayerischer Forschungsverbund für technisch-wissenschaftliches Hochleistungsrechnen  
Mathematisches Institut, Technische Universität München  
Arcisstr. 21, D-80333 München, Germany  
E-mail: montrone@mathematik.tu-muenchen.de

## Abstract

Die klassischen Halbleitergleichungen beschreiben das Verhalten eines elektronischen Bauelementes. Im stationären Fall bilden sie zusammen mit den Randbedingungen ein elliptisches Randwertproblem für das elektrostatische Potential und die Ladungsträgerdichten. Nichtorthogonale Berandungen des Bauelements und der Verlauf der Lösungswerte legen eine adaptive Triangulation mit Tetraedern nahe. Einem Standard-Verfahren wie dem Scharfetter-Gummel-Box-Verfahren bereiten stumpfwinklige finite Elemente Konvergenzschwierigkeiten. Formuliert man das Verfahren von Zlámal als Finite-Volumen-Verfahren, so ist es zu dem Scharfetter-Gummel-Box-Verfahren äquivalent. Es erklärt jedoch die Stromdichten nicht nur auf den Kanten der Triangulation, sondern auch innerhalb der finiten Elemente. Dies ermöglicht eine Stabilisierungstechnik, bei der für ein stumpfwinkliges finites Element eine benötigte Richtungskomponente der Stromdichten gegebenenfalls aus einem benachbarten finiten Element extrapoliert wird. Falls kein solches benachbartes finites Element existiert, weil der betreffende Knoten auf dem Rand des Simulationsgebietes liegt, wird das zugehörige Erhaltungsgebiet entsprechend abgeändert. Diese Stabilisierungstechnik verursacht zwar eine lokale Vergrößerung der Triangulation, doch stellt sie sicher, daß für die berechnete Lösung das Maximumprinzip gilt. Für die Adaption der Triangulation wurden die reguläre Verfeinerung eines Tetraeders in acht Untertetraeder und alle irregulären Verfeinerungsabschlüsse implementiert. Numerische Ergebnisse dreidimensionaler Simulationen auf adaptierten Triangulationen werden für das Durchbruchverhalten einer Speicherzelle und für ein MOSFET mit lokal verdicktem Oxid präsentiert.

## Literatur

- [1] W. Bergner, R. Kircher: *SITAR – An Efficient 3-D Simulator for Optimization of Nonplanar Trench Structures*. IEEE Transactions on computer-aided design, vol. 9, no. 11, pp. 1184–1188, Nov. 1990.
- [2] R. Bulirsch, A. Gilg, K. Merten, K. Steger: *Numerische Simulation in der Halbleiterindustrie*. Informatik Forsch. Entw. vol. 5, S. 42–56, Springer-Verlag, 1990.
- [3] D.L. Scharfetter, H.K. Gummel: *Large Signal Analysis of a Silicon Read Diode Oscillator*. IEEE Trans. Electron Devices, ED-16, 64–77, 1969.
- [4] W.V. Van Roosbroeck: *Theory of Flow of Electrons and Holes in Germanium and Other Semiconductors*. Bell System Technical Journal 29, S. 560–607, 1950.
- [5] M. Zlámal: *Finite Element Solution of the Fundamental Equations of Semiconductor Devices I*, Math. Comp., 46, S. 27–43, 1986.

# Diskrete transparente Randbedingungen für die numerische Lösung der Fresnell'schen Wellengleichung

FRANK SCHMIDT

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin  
Heilbronner Str. 10, D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
E-mail: schmidt@sc.zib-berlin.de

## Abstract

Transparente Randbedingungen werden u. a. für partielle Differentialgleichungen benötigt, die Wellenphänomene beschreiben. Der numerischen Berechnung von Wellenausbreitungen wird in der Regel ein begrenztes Simulationsgebiet zugrunde gelegt, von dem a-priori nicht bekannt ist, ob es innerhalb des betrachteten Orts/Zeit-Intervalls von Wellen verlassen wird. Die zur Berechnung der Lösung im inneren Gebiet benötigten Randbedingungen müssen daher die Eigenschaft haben, Wellen ungehindert hindurchzulassen (Transparenz), es soll sich dieselbe Lösung ergeben, als ob über einem unendlich ausgedehnten Gebiet gerechnet worden wäre.

Das formulierte Prinzip der Transparenz führt, angewendet auf die Fresnel-Gleichung, zu nichtlokalen Cauchy-Randbedingungen. Die benötigten Koeffizienten ergeben sich aus einer Rekursion, die direkt aus der Diskretisierung abgeleitet wird. Es zeigt sich, daß jede Diskretisierung der Ausgangsgleichung ihre eigene diskrete Form von transparenten Randbedingungen erzeugt. Die Schwierigkeit bei der Umsetzung der Rekursion besteht darin, daß Terme der Struktur „ $0/0$ “ entstehen, die numerisch stabil aufgelöst werden müssen. Für die Familie der linearen, impliziten Einschrittverfahren konnte ein allgemeiner und effizienter Rekursionsalgorithmus zur Berechnung des transparenten Randbedingungen für Probleme mit eindimensionalem Querschnitt gefunden werden. Dabei wurden angepaßte rationale Basisfunktionen verwendet, deren Koeffizienten wieder direkt aus der Diskretisierung gewonnen werden. Die Einschränkung auf eindimensionale Querschnitte ist nicht von prinzipieller Natur, die angewandte Technik läßt sich auch auf höhere Dimension übertragen. Die allgemeine Formulierung gestattet es, dasselbe Verfahren auch auf andere Gleichungen anzuwenden.

## Literatur

- [1] V. A. Baskakov and A. V. Popov: *Implementation of transparent boundaries for numerical solution of the Schrödinger equation*. Wave Motion **14** (1991), pp. 123-128.
- [2] P. Deuffhard: *On Algorithms for the Summation of Certain Special Functions*. Computing **17** (1976), pp. 37-48.
- [3] G. R. Hadley: *Transparent Boundary Condition for the Beam Propagation Method*. IEEE J. Quantum El. **28** (1992), pp. 363-370.
- [4] F. Schmidt, P. Deuffhard: *Discrete Transparent Boundary Conditions for the Numerical Solution of Fresnel's Equation*. Preprint SC 93-24, ZIB-Berlin 1993.



# Adaptive Berechnung kompressibler Strömungsfelder mit Finite-Volumen-Verfahren

TH. SONAR<sup>1</sup> UND G. WARNECKE<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institut für Strömungsmechanik, DLR Göttingen  
Bunsenstraße 10, D-37073 Göttingen, Germany  
E-mail: tommy@ts.go.dlr.de

<sup>2</sup>Mathematisches Institut A, Universität Stuttgart  
Pfaffenwaldring 57, D-70569 Stuttgart, Germany  
E-mail: warnecke@mathematik.uni-stuttgart.de

## Abstract

Eines der wichtigsten Ziele der modernen numerischen Strömungsmechanik ist die adaptive Berechnung kompressibler Strömungsfelder in komplexen Geometrien. Neben Algorithmen zur Verfeinerung und Vergrößerung gegebener Rechnernetze ist die Wahl eines Verfeinerungsindikators entscheidend für die Güte der numerischen Approximation.

Der im Institut für Strömungsmechanik der DLR entwickelte  $\tau$ -Code ist die Implementation einer Finite-Volumen-Methode auf Dreiecksnetzen, die dynamische Adaption zeitgenau erlaubt und in deren Rahmen verschiedene Verfeinerungstechniken und -indikatoren getestet werden können. Die Methode basiert auf einer upwind-Diskretisierung, bei der räumliche Genauigkeit durch MUSCL- bzw. ENO-Techniken erzielt wird. Eine explizite TVD-Runge-Kutta-Methode nach Shu und Osher erlaubt eine maximale Genauigkeit von dritter Ordnung in der Zeit.

Im Vortrag werden die algorithmischen Bestandteile des  $\tau$ -Codes vorgestellt. Besonderes Gewicht wird dabei auf die zur Adaption benötigten Techniken gelegt, die eine Netzverfeinerung bzw. Vergrößerung erlauben. Es werden Verfeinerungsindikatoren vorgestellt, die auf dem Residuum der kompressiblen Bewegungsgleichungen beruhen. Diskutiert werden auch Differenzenindikatoren, die im Fall von transsonischen Potentialströmungen entwickelt und untersucht wurden.

## Literatur

- [1] Th. Sonar: *On the Design of an Upwind Scheme for Compressible Flow on General Triangulations*. Numerical Algorithms **4** (1993), pp. 135-149.
- [2] Th. Sonar: *Strong and Weak Norm Refinement Indicators Based on the Finite Element Residual for Compressible Flow Computation*. Impact of Computing in Science and Engineering **5** (1993), pp. 111-127.
- [3] Th. Sonar, V. Hannemann, D. Hempel: *Dynamic Adaptivity and Residual Control in Unsteady Compressible Flow Computation*. to appear: Mathematical and Computer Modelling.
- [4] G. Warnecke, U. Göhner: *A Shock Indicator for Adaptive Transonic Flow Computations*. to appear: Numerische Mathematik.
- [5] G. Warnecke, U. Göhner: *A Second Order Finite Difference Error Indicator for Adaptive Transonic Flow Computations*. Mathematisches Institut A, Universität Stuttgart, Preprint 93-10.

# Parallele Implementierung von BEM–Gebietszerlegungsmethoden

O. STEINBACH, W. L. WENDLAND

Mathematisches Institut A, Universität Stuttgart  
Pfaffenwaldring 57, D–70569 Stuttgart, Germany  
E–mail: [steinbach@mathematik.uni-stuttgart.de](mailto:steinbach@mathematik.uni-stuttgart.de)

## Abstract

Gebietszerlegungsmethoden eignen sich auf Grund ihrer Parallelisierbarkeit ausgezeichnet zur numerischen Behandlung komplexer mathematischer Modelle. Die DD–Variationsformulierung unter Verwendung des mit Randintegralgleichungen hergeleiteten Steklov–Poincaré Operators führt auf eine Vielzahl von parallelen iterativen Lösungsverfahren, die aber durch die Problematik möglicher Vorkonditionierungen [1] eng miteinander verbunden sind.

Die Galerkin–Diskretisierung der symmetrischen Formulierung [3] führt auf ein positiv definites, aber schiefsymmetrisches System, welches durch eine Transformation und eine entsprechende CG Iteration nach Bramble/Pasciak [2] gelöst werden kann [5]. Die Bildung des Schurkomplements führt gleichfalls auf ein symmetrisches System, welches im Gegensatz zu oben mit einem Standard CG behandelt werden kann. Da dies dem Lösen lokaler Dirichlet–Probleme entspricht, können auch Verfahren ohne den bei der symmetrischen Formulierung auftretenden hypersingulären Operator eingesetzt werden.

Diese Methoden können dann als Zweigitter–Algorithmen interpretiert werden, durch den Einsatz des Glowinski–Wheeler Vorkonditioniers kann diese aber auch als Neumann–Neumann Abbildung charakterisiert werden [4].

Die Realisierung verschiedener Algorithmen auf MIMD–Systemen (Paragon, Parsytec, Workstation–Cluster) unterstreicht die Effektivität und Leistungsfähigkeit der vorgestellten Methoden.

## Literatur

- [1] J. H. Bramble, J. E. Pasciak and A. H. Schatz, *The construction of preconditioners for elliptic problems by substructuring I*, Math. Comput. **47** (1986), 103–134.
- [2] J. H. Bramble and J. E. Pasciak, *A preconditioning technique for indefinite systems resulting from mixed approximations of elliptic problems*, Math. Comput. **50** (1988), 1–17.
- [3] M. Costabel, *Symmetric methods for the coupling of finite elements and boundary elements*, Boundary Elements IX (C. A. Brebbia, G. Kuhn and W. L. Wendland eds.), Springer, Berlin, 1987, pp. 411–420.
- [4] G. C. Hsiao and W. L. Wendland, *Domain decomposition via boundary element methods*, Numerical Methods in Engineering and Applied Sciences Part I (H. Alder et. al., eds.), CIMNE, Barcelona, 1992, pp. 198–207.
- [5] U. Langer, *Parallel iterative solution of symmetric coupled FE/BE–equations via domain decomposition*, SIAM J. Sci. Stat. Comput. (submitted).

# Ein adaptives Verfahren zur Lösung der biharmonischen Gleichung auf dünnen Gittern

THOMAS STÖRTKUHL

Institut für Informatik, Technische Universität München  
Arcisstr. 21, D-80290 München, Germany  
E-mail: [stoertku@informatik.tu-muenchen.de](mailto:stoertku@informatik.tu-muenchen.de)

## Abstract

In diesem Vortrag wird ein Finite-Element-Verfahren zur Lösung des biharmonischen Dirichlet-Problems vorgestellt. Die Diskretisierung erfolgt mit konformen Rechteckselementen (Bogner-Fox-Schmit Element) vom  $C^1$ -Typ. Mit ihrer Hilfe wird eine hierarchische bikubische Basis konstruiert, die eine additive Zerlegung des aufgespannten Raumes  $S_h \in H^2$  in Teilräume  $T_h$  induziert. Die Anwendung der Dünn-Gitter-Methode [1] liefert dann ein Verfahren, das bei genügend glatten Funktionen zu einer starken Reduktion der zur Berechnung notwendigen Gitterpunkte führt. Zudem ist eine adaptive Gitterverfeinerung einfach zu bewerkstelligen. Der Algorithmus erlaubt auch, modifizierte Elemente und somit neue Teilräume  $\tilde{T}_h$  dort einzuführen, wo es die Genauigkeitsanforderungen an die Lösung erlauben. Die Korrektur der Lösung erfolgt iterativ mit der Gauß-Seidel Relaxation in den Teilräumen.

Adaptiv berechnete Ergebnisse von Testbeispielen der Laplace-Gleichung, der biharmonischen Gleichung und des Stokes Problems werden vorgestellt. Insbesondere wird die Einführung modifizierter Elemente und ihr Einfluß auf die Genauigkeit der Lösung studiert.

## Literatur

- [1] C. Zenger: *Sparse Grids*. Notes on Numerical Fluid Mechanics, **31** (1991).

—

# Implizite und explizite Lösungsverfahren der Wellengleichung am Beispiel der Beam Propagation Methods

DETLEF UHLENDORF

Institut für Hochfrequenztechnik, Technische Universität Berlin  
Einsteinufer 25, D-10587 Berlin, Germany  
E-mail: [uhdf1935@ibm1hft.ee.tu-berlin.de](mailto:uhdf1935@ibm1hft.ee.tu-berlin.de)

## Abstract

Die BPM (Beam Propagation Methods) beschäftigen sich mit der Ausbreitung elektromagnetischer Wellen in integriert optischen Strukturen. Die lateralen Abmessungen derartiger Strukturen, wie Wellenleiter, Koppler, Schalter, Taper und andere liegen im  $\mu m$ -Bereich, während typische Bauteillängen im  $mm$ -Bereich bis hin zu einigen Zentimetern liegen.

Ausgehend von den Maxwell'schen Gleichungen der Elektrodynamik über die vektorielle Wellengleichung läßt sich eine partielle Differentialgleichung für die Ausbreitung elektromagnetischer Wellen entlang der Struktur aufstellen. Wendet man den in der Differentialgleichung enthaltenen Ausbreitungsoperator auf die (vorgegebene) Feldverteilung an der Stelle  $z_o$  ( $z =$  Ausbreitungsrichtung) an, so erhält man als Resultat eines Propagationsschrittes die Feldverteilung an der Stelle  $z_o + \Delta z$ . Mit zehntausenden von Propagationsschritten im  $\mu m$ -Bereich können so Strukturlängen in Zentimeterbereich mit zweidimensionalem Querschnitt skalar oder vektoriell simuliert werden. Die klassische BPM [1] arbeitet unter Zuhilfenahme der Fouriertransformation und benötigt daher eine erhebliche Rechenzeit. Dargestellt werden in diesem Vortrag vergleichsweise eine implizite Methode basierend auf dem Crank-Nicolson-Schema sowie eine direkte Methode basierend auf einer Reihenentwicklung des Ausbreitungsoperators [2].

Prinzipielle Probleme bei Beam-Propagation-Methoden sind transparente Randbedingungen an den Begrenzungen des Simulationsfensters, die Akzeptanz großer Sprünge im Brechzahlprofil sowie lange Rechenzeiten aufgrund hoher erforderlicher Gitterpunktdichten bei der Simulation extrem schmaler Wellenleiter, deren Feldverteilung sich weit ins Substrat erstreckt.

## Literatur

- [1] M.D. Feit and J.A. Fleck: *Light propagation in graded-index optical fibers*, Applied Optics, Vol. **17**, No.24, pp. 3990-3998, 1978.
- [2] A. Splett, M. Maid and K. Petermann: *A Novel Beam Propagation Method for Large Refractive Index Steps and Large Propagation Distances*, IEEE Photonics Technology Letters, Vol. **3**, No.5, pp. 466-468, 1991.

## C. Monte–Carlo Methoden und Molekulardynamik

### Simulation of Near–Continuum Rarefied Flows Using the Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) Method

FRANK BERGEMANN

DLR–Institute of Fluid Mechanics  
Bunsenstr. 10, D–37073 Göttingen, Germany  
E–mail: frankie@hotmail.ts.go.dlr.de

#### Abstract

The direct simulation Monte Carlo (DSMC) method discussed in this presentation is used to calculate gas flows by simulating the dynamics of a number of representative gas particles in a given flow domain. This mainly includes the simulation of movement, binary collisions and interactions of the particles with domain boundaries, especially solid walls. As the key idea of the method particle movement and collisions are treated in a decoupled fashion within a chosen small time step. The flow domain is decomposed into cells which define spaces for the selection of collision pairs and the calculation of macroscopic flow quantities. Collisions and boundary interactions are performed statistically, i.e. by sampling the outcome velocities or energies of the particles involved from probability densities derived from kinetic theory or statistical mechanics using uniform random numbers. Currently, the DSMC method is limited to rarefied flows, because the number of particles, time steps and collisions to be simulated increases sharply with decreasing degree of rarefaction of the flow. In the rarefied regime the DSMC method can substitute the usual continuum Navier–Stokes–type methods which are not applicable here, since large departures from thermodynamic equilibrium must be expected.

The talk deals with DSMC–applications to near–continuum rarefied flows resembling conditions during reentry of space vehicles in the upper atmosphere. Here, a variety of high–temperature phenomena, such as excitation of the vibrational mode of molecules, chemical reactions – and possibly – wall–catalytic effects occur. The modelling of these effects within the DSMC scheme and simulation results are presented. From a comparison with Navier–Stokes calculations it is found that even at rather large Knudsen numbers the Navier–Stokes equations seem to be appropriate. Nevertheless unexpected differences at sharp trailing edges of flow geometries are apparent.

#### Literatur

- [1] G.A. Bird: *Molecular Gas Dynamics*. Oxford University Press, Oxford, UK, 1976.
- [2] Many contributions about special topics within DSMC methods in: *Proceedings of the Symposium on Rarefied Gas Dynamics*.

# Mehrgitter–Monte–Carlo–Algorithmen für nichtabelsche Gittereichtheorie

MARTIN GRABENSTEIN<sup>1</sup>

II. Institut für Theoretische Physik  
Luruper Chaussee 149, 22761 Hamburg, Germany  
E-mail: i02gra@dsyibm.desy.de

## Abstract

Nichtabelsche Eichtheorien sind ein wichtiger Bestandteil des Standardmodells der Elementarteilchen. Numerische Simulationen von Eichtheorien auf dem Gitter nahe am Kontinuumslimit mit konventionellen, lokalen Monte–Carlo–Methoden leiden unter *critical slowing down*: Die Rechenzeit für die Erzeugung einer neuen, statistisch unabhängigen Feldkonfiguration steigt dort rapide an.

Mehrgitter–Monte–Carlo–Algorithmen versuchen, die Simulation durch nichtlokale Updates auf allen Längenskalen zu beschleunigen. Eine theoretisches Kriterium, das aussagt, unter welchen Umständen ein stochastisches Mehrgitterverfahren erfolgreich sein kann, wurde in verschiedenen Spinmodellen erprobt und etabliert. Einfach formuliert ist die Aussage: Für nichtlokale Update-Vorschläge in einem kritischen Modell kann die Abwesenheit von *critical slowing down* nur dann erwartet werden, wenn die Energiekosten eines Update-Vorschlages höchstens proportional zu der Oberfläche, aber nicht proportional zum Volumen des nichtlokalen Bereiches sind.

Dieses Kriterium kann bei der Entwicklung neuer Algorithmen als roter Faden dienen: Wir schlagen eine neue Mehrgittermethode für nichtabelsche Gittereichtheorie vor, das *time slice blocking*. Für  $SU(2)$ –Eichfelder in zwei Dimensionen führt diese Methode zu fast vollständiger Überwindung des *critical slowing down*, im Einklang mit der theoretischen Vorhersage. Die Verallgemeinerung des *time slice blockings* auf die  $SU(2)$ –Eichtheorie in vier Dimensionen wird analytisch und durch numerische Simulationen untersucht. Im Vergleich zu zwei Dimensionen führt die lokale Unordnung im vierdimensionalen Eichfeld zu Problemen.

## Literatur

- [1] J. Goodman, A.D. Sokal: *Multigrid Monte Carlo for Lattice Field Theories*. Phys. Rev. Lett. **56** (1986), p. 1015.
- [2] G. Mack: *Multigrid Methods in Quantum Field Theory*. In: *Nonperturbative Quantum Field Theory*, Proceedings, Cargèse, France, 1987, G. 't Hooft *et al.*, eds., (Plenum, New York, 1988).
- [3] M.L. Laursen, J. Smit, J.C. Vink: *Multigrid Updating of  $U(1)$  Gauge Fields*. Phys. Lett. **B** 262 (1991), p. 467.
- [4] M. Grabenstein, K. Pinn: *Kinematics of Multigrid Monte Carlo*. J. Stat. Phys. **71** (1993), p. 607.
- [5] M. Grabenstein: *Analysis and Development of Stochastic Multigrid Algorithms in Lattice Field Theory*. Dissertation, preprint DESY 94-007, Januar 1994.

---

<sup>1</sup>Adresse ab April '94: Department of Applied Mathematics and Computer Science, The Weizmann Institute of Science, Rehovot 76100, Israel

# Ab Initio–Vorhersage von Protein–Strukturen — der multikanonische Ansatz

ULRICH H.E. HANSMANN

Department of Physical Sciences, Embry Riddle Aeronautical University  
Daytona Beach, FL 32114, U.S.A.

SCRI, The Florida State University  
Tallahassee, FL 32306, U.S.A.

E–mail: `hansmann@scri.fsu.edu`

## Abstract

Zu den neuen und erfolgsversprechenden Ansätzen in der Computational Physics gehört auch der multikanonische Algorithmus [1]. Eine kurze Einführung in die neue Methode wird präsentiert und ihre Effektivität für die Vorhersage der tertiären Struktur von Proteinen und Peptiden wird gezeigt. Thermodynamische Größen können im Prinzip von einem Monte–Carlo–Run für jede Temperatur berechnet werden [2]. Als einfache Beispiele werde kurze Peptide wie etwa Met–Enkephalin studiert.

## Literatur

- [1] B.A. Berg and T. Neuhaus: *Multicanonical algorithms for first order phase transitions*, Phys. Lett. **B267** (1991) 249.
- [2] U.H.E. Hansmann and Y. Okamoto, *Prediction of Peptide Conformation by Multicanonical Algorithm: New Approach to the Multiple Minima Problem*, J. Comp. Chem. **14** (1993) 1333.

---

# Multigrid Monte Carlo applied to 2D nonlinear $\sigma$ models

MARTIN HASENBUSCH

Theory Division, CERN  
CH-1211 Geneva 23, Switzerland  
E-mail: [hasenbus@surya13.cern.ch](mailto:hasenbus@surya13.cern.ch)

## Abstract

Critical slowing down is a major drawback in Monte Carlo simulations of lattice field theories near criticality. The number of update steps needed to generate a statistically independent field configuration grows like  $\tau \propto \xi^z$ , where  $\xi$  is the correlation length and  $z$  the critical dynamical exponent. For traditional local update procedures one typically has  $z \approx 2$ .

In order to overcome this severe problem non-local update schemes like Fourier acceleration, cluster algorithms, and multigrid algorithms have been proposed. The idea behind such algorithms is, that the field configuration can be changed to a large extent on all length scales in one update cycle.

I will discuss how we implemented a multi-scale algorithm for various 2D nonlinear  $\sigma$  models [1, 2]. An important feature of our implementation is the restriction to a single  $U(1)$  subgroup of the spin manifold during one update cycle. This trick allowed a high performance in terms of CPU-time per cycle and a good portability of the implementation to various models. On the other hand we showed that the performance of the algorithm in terms of  $\tau$  was not degraded by this restriction. Our practical tests include simulations of the 2D  $O(3)$  model, the 2D  $CP^3$  model [2, 3] and the 2D  $SU(3) \times SU(3)$  [2] model. One should note that for the  $CP^{N-1}$  and  $SU(N) \times SU(N)$  models no implementation of the cluster algorithm was found that eliminates critical slowing down.

## Literatur

- [1] M. Hasenbusch, S. Meyer, and G. Mack: *Noncritical Multigrid Monte Carlo:  $O(3)$  Nonlinear Sigma Model*. Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 20 (1991) 110.
- [2] M. Hasenbusch and S. Meyer: *Multigrid Acceleration for Asymptotically Free Theories*. Phys. Rev. Lett. 68 (1992) 435.
- [3] M. Hasenbusch and S. Meyer: *Testing Accelerated Algorithms In The Lattice  $CP(3)$  Model*. Phys. Rev. D45 (1992) 4376.



# Nichtgleichgewichts-Molekulardynamik (NEMD)

## Untersuchungen an strömenden Fluiden

SIEGFRIED HESS

Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Berlin, Sekr. PN 7-1  
Hardenbergstr. 36, D-10623 Berlin, Germany

### Abstract

Methoden zur Teilchen-Simulation einer einfachen Scherströmung (Couette-Geometrie) werden vorgestellt. Anwendungen des Verfahrens zur Untersuchung der Viskosität, des rheologischen Verhaltens und der strukturellen Veränderungen im Nichtgleichgewichts-Zustand werden für verschiedene Modell-Fluide vorgestellt. Ergebnisse für einfache molekulare Fluide, kolloidale Dispersionen, Polymerflüssigkeiten und Flüssigkristalle werden mit theoretischen Vorhersagen und mit experimentellen Daten verglichen.

### Literatur

- [1] W. Loose, S. Hess: *Anisotropy in velocity space induced by transport processes*. Physica **A174** (1991), pp. 47–59; *Rheology of dense model fluids via nonequilibrium molecular dynamics, Shear thinning and ordering transition*. Rheol. Acta **28** (1989) p. 91; *Velocity distribution function of a streaming gas via nonequilibrium molecular dynamics*. Phys. Rev. Lett. **58** (1987) p. 2443.
- [2] S. Hess, J.F. Schwarzl, D. Baals: *Anisotropy of the viscosity of nematic liquid crystals and of oriented ferro-fluids via nonequilibrium molecular dynamics*. J. Phys. Condens. Matter **2 8A** (1990) p. 279.
- [3] T. Weider, M.A. Glaser, H.J.M. Hanley, N.A. Clark: *Shear induced melting of two-dimensional solids*. Phys. Rev. **B 47** (1993) pp. 5622–5628.
- [4] T. Weider, U. Stottut, W. Loose, S. Hess: *Order in fluids: Shear-induced anisotropy in dense fluids of spherical particles and in gases of rotating molecules*. Physica **A 174** (1991) pp. 1–14.
- [5] M. Kröger, W. Loose, S. Hess: *Rheology and structural changes of polymer melts via nonequilibrium molecular dynamics*. J. Rheol. **37** (1993) pp. 1057–1079.

# Ising–Spins in der Quantengravitation

CHRISTIAN HOLM<sup>1</sup>, WOLFHARD JANKE<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institut für Theoretische Physik, FU Berlin  
Arnimallee 14, D–14195 Berlin, Germany  
E–mail: holm@einstein.physik.fu-berlin.de

<sup>2</sup> Institut für Physik, Johannes Gutenberg-Universität Mainz  
Staudingerweg 7, D–55099 Mainz, Germany  
E–mail: <sup>2</sup>janke@galileo.physik.uni-mainz.de

## Abstract

Wir präsentieren die Ergebnisse einer numerischen Simulation von Ising–Spins, die an 2D Quantengravitation gekoppelt sind [1]. Als Diskretisierungsmethode benutzen wir den simplizialen Regge–Kalkül [2]. Die geometrischen Freiheitsgrade sind dort die Kantenlängen  $l_i$  einer vorgegebenen simplizialen Zerlegung einer Fläche. Die Ising–Spins sitzen auf den Vertices dieser Zerlegung und sind durch Flächenfluktuationen an die Gravitation gekoppelt. Als Maß im Pfadintegral benutzen wir das skaleninvariante Maß  $dl/l$ . Die Wirkung, die wir untersuchen, ist eine diskretisierte Version der Kontinuumswirkung  $I = \int dx^2 \sqrt{g} [\lambda - \frac{k}{2}R + \frac{a}{4}R^2 + Kg^{\mu\nu}(\partial_\mu\phi)(\partial_\nu\phi)]$ . Der kosmologische Term trägt durch die Einschränkung auf konstante Flächen nicht bei, während der zweite Ausdruck durch das Gauss–Bonnet–Gesetz proportional zur Euler Charakteristik und damit ebenfalls konstant ist. Wir haben unsere Simulationen bei drei verschiedenen  $a$ -Werten, bzw. zwei verschiedenen  $K$ -Werten laufen lassen. Die Gittergrößen lagen zwischen  $6^2$  und  $512^2$  Vertices, wobei wir die globale Torus–Topologie benutzten. Für den Gravitationsupdate verwenden wir den Metropolis–Algorithmus, während für den den Update der Ising–Spins der effizientere 1–Clusteralgorithmus Anwendung findet. Durch ‘Reweighten’ einer einzigen Simulation in der Nähe des kritischen Punktes  $K_c$  sind wir in der Lage, die benötigte thermodynamische Information für eine ‘Finite Size Scaling’ Studie zu erhalten. Unsere gemessenen kritischen Exponenten sind in Übereinstimmung mit denen des Ising–Modells auf statischen 2D Gittern, und erhärten somit die in Ref. [3] vermutete Verhaltensweise. Sie liegen damit aber im Widerspruch zu der alternativen Formulierungen der Quantengravitation mit der Methode der dynamischen Triangulierung, für die analytische [4] wie auch numerische Rechnungen [5] ein geändertes kritisches Verhalten des Ising Systems vorhersagen.

## Literatur

- [1] C. Holm, W. Janke: *The Critical Behavior of Ising Spins on 2D Regge Lattices*. (1994), Berlin preprint.
- [2] T. Regge: *General Relativity without Coordinates*. *Nuovo Cimento* **19** (1961), pp.558–571.
- [3] M. Gross, H. Hamber: *Critical Properties of Two-Dimensional Simplicial Quantum Gravity*. *Nucl. Phys.* **B364** (1991), pp. 703–754.
- [4] V. A. Kazakov: *Ising Model on a Dynamical Planar Random Lattice: Exact Solution*. *Phys. Lett.* **A119** (1986), pp. 140–144.
- [5] J. Jurkiewicz, A. Krzywicki, B. Petersson, B. Söderberg: *Ising Spins on a Dynamically Triangulated Random Surface*. *Phys. Lett* **B213** (1988), pp. 511–515.

# Monte-Carlo-Verfahren in der statistischen Physik und Quantenfeldtheorie

WOLFHARD JANKE

Institut für Physik, Johannes Gutenberg-Universität Mainz  
Staudingerweg 7, D-55099 Mainz, Germany  
E-mail: `janke@galileo.physik.uni-mainz.de`

## Abstract

Monte-Carlo-Verfahren spielen seit vielen Jahren eine wichtige Rolle für numerische Untersuchungen in der statistischen Physik und Quantenfeldtheorie. Dabei werden thermische oder quantenmechanische Fluktuationen nach einem “importance sampling” Prinzip simuliert und Erwartungswerte als zeitliche Mittelwerte über die so erzeugte Markovkette berechnet. Obwohl seit langem bekannt ist, daß Standardverfahren (z.B. Metropolis oder Wärmebad, kanonische Verteilungen) gerade in den interessantesten Anwendungen (Phasenübergänge bzw. Kontinuumslices) nicht sehr effizient sind, konnten entscheidende Fortschritte erst in den letzten Jahren erzielt werden.

Die erste Verbesserung betrifft die Update-Algorithmen. Bei kontinuierlichen Phasenübergängen divergiert die räumliche Korrelationslänge  $\xi$ . Dies führt bei Standard-Updates zu stark korrelierten Stichproben mit Autokorrelationszeiten  $\tau \propto \xi^z$  ( $z \approx 2$ ) und damit sehr großen statistischen Fehlern  $\epsilon \propto \tau^{1/2}$ . Das Ziel der neuen Algorithmen ist, den dynamischen Exponenten  $z$  und damit das sogenannte “critical slowing down” zu reduzieren [1]. Neben einer kurzen Diskussion von “overrelaxation” Techniken wird ein Überblick über nichtlokale Mehrgitter- und Cluster-Algorithmen gegeben, die sich in vielen Anwendungen als sehr erfolgreich erwiesen haben.

Für die Auswertung der Simulationen sind Histogrammtechniken wichtig, die es ermöglichen, thermodynamische Funktionen vom Simulationspunkt aus fortzusetzen und so detailliertere Informationen zu gewinnen [2].

Auch die neue multikanonischen Methode [3] zur Simulation von Phasenübergängen 1. Ordnung kann als spezielle Histogrammtechnik interpretiert werden. Hier besteht die Schwierigkeit der Standardsimulationen darin, daß die Übergangsraten zwischen koexistierenden Phasen sehr klein sind. Durch gezieltes Anheben dieser Wahrscheinlichkeiten in multikanonischen Simulationen können die statistischen Fehler um Größenordnungen reduziert werden. Abschließend wird eine zusätzliche Verbesserung durch Kombination mit Mehrgitterverfahren [4] vorgestellt.

## Literatur

- [1] A.D. Sokal: *Bosonic Algorithms*. In *Quantum Fields on the Computer*, ed. M. Creutz (World Scientific, Singapore, 1992), pp. 211–274.
- [2] R.H. Swendsen, J.-S. Wang, A.M. Ferrenberg: *New Monte Carlo Methods for Improved Efficiency of Computer Simulations in Statistical Mechanics*. In *The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics*, ed. K. Binder (Springer, Berlin, 1992), pp. 75–91.
- [3] B.A. Berg: *The Multicanonical Ensemble: A New Approach to Computer Simulations*. In *Dynamics of First Order Phase Transitions*, ed. H.J. Herrmann, W. Janke, F. Karsch (World Scientific, Singapore, 1992), pp. 311–326.
- [4] W. Janke, T. Sauer: *Multicanonical Multigrid Monte Carlo Method*. Phys. Rev. **E49** (März 1994), im Druck.

# Cluster Identification on a Distributed Memory Multiprocessor

KARL JANSEN

DESY

Notkestr. 85, 22603 Hamburg, Germany

E-mail: `kjansen@x4u2.desy.de`

## Abstract

We present a method to implement cluster algorithms on parallel computers using the Quad algorithm. This algorithm can be extended to arbitrary dimension. We test the proposed scheme on the Ising model in 3 dimensions and give a theoretical and numerical performance analysis. We find that by adding two optimizations, border compression and bubble elimination, the performance is improved substantially, especially in the physically interesting critical region of the Ising model.

## Literatur

- [1] K.P. Belkale and P. Banerjee: *Parallel Algorithms for Geometric Connected Component Labeling on a Hypercube Multiprocessor*. IEEE transactions on Computers, 41 (1992) 699.
- [2] T.H. Cormen, C.E. Leiserson and R.L. Rivest: *Introduction to Algorithms*. McGraw-Hill Book Company, San Francisco, 1990.
- [3] R.H. Swendsen and J.-S. Wang: *Nonuniversal Critical Dynamics in Monte Carlo Simulations*. Phys. Rev. Lett. 58 (1987) 58.

---

# Korrelationslänge in 2D-Pottsmodellen: numerische vs. exakte Ergebnisse

STEFAN KAPPLER UND WOLFHARD JANKE

Johannes-Gutenberg Universität Mainz

Staudingerweg 7, D-55099 Mainz, Germany

E-mail: [kappler@balthasar.physik.uni-mainz.de](mailto:kappler@balthasar.physik.uni-mainz.de)

## Abstract

Das zweidimensionale  $q$ -Zustands-Pottsmodell ist eines der wenigen Systeme der statistischen Physik, für das einige exakte Ergebnisse bekannt sind. Für  $q \geq 5$  zeigt das System einen Phasenübergang erster Ordnung bei der inversen Temperatur  $\beta_t = \ln(1 + \sqrt{q})$ , und die Energien  $e_o$  und  $e_d$  der geordneten und ungeordneten Phase sind bei  $\beta_t$  exakt bekannt. Erst kürzlich wurden an diesem Modell numerische Techniken zur Bestimmung der Oberflächenspannung  $\sigma_{od}$  zwischen den koexistierenden Phasen getestet [1]. Je nach Methode unterscheiden sich die Ergebnisse für  $\sigma_{od}$  um den Faktor 8. Kurz nach diesen Untersuchungen konnte aus einem neuen analytischen Ergebnis [2] für die Korrelationslänge  $\xi_d$  in der ungeordneten Phase eine explizite Formel für  $\sigma_{od}$  abgeleitet werden [3],  $\sigma_{od} = 1/2\xi_d$ , die die Ergebnisse aus der Histogrammtechnik klar favorisiert.

Da diese neuen exakten Ergebnisse bisher nur indirekt geprüft wurden und frühere numerische Bestimmungen der Korrelationslänge nicht mit den neuen analytischen Ergebnissen verträglich sind, konzentrieren wir uns hier auf eine direkte numerische Bestimmung der Korrelationslänge [4]. Mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen der Korrelationsfunktion der ungeordneten Phase auf großen Gittern wird der exponentielle Zerfall über mehrere Größenordnungen gemessen. Heat-Bath-, Single-Cluster- und Multiple-Cluster-Algorithmen wurden dabei verglichen. Um die gewünschte Genauigkeit zu erzielen, haben wir ausgiebigen Gebrauch von Clusteralgorithmen und sogenannten “improved estimators” gemacht. Mit einem passenden Fitansatz für die Korrelationsfunktion erhalten wir Werte für die Korrelationslänge, die mit den exakt bekannten Werten vereinbar sind. Als Nebenergebnis erhalten wir die ersten drei Momente der Energieverteilung der ungeordneten Phase in ausgezeichneter Übereinstimmung mit den Werten einer neuen “large  $q$ ”-Entwicklung [5].

## Literatur

- [1] Für eine Übersicht und Referenzen, siehe W. Janke: *Interface tension and correlation length of 2D Potts models: numerical vs. exact results.* in *IMACS '93* proceedings, St. Louis, zur Veröffentlichung in *Int. J. Mod. Phys. C*.
- [2] E. Buffenoir und S. Wallon: *The correlation length of the Potts model at the first-order transition point.* *J. Phys. A*26 (1993) 3045; A. Klümper: *Investigation of excitation spectra of exactly solvable models using inversion relations.* *Int. J. Mod. Phys. B*4 (1990) 871; A. Klümper, A. Schadschneider und J. Zittartz: *Inversion relations, phase transitions and transfer matrix excitations for special spin models in two dimensions.* *Z. Phys. B*76 (1989) 247.
- [3] C. Borgs und W. Janke: *An explicit formula for the interface tension of the 2D Potts model.* *J. Phys. I (France)* 2 (1992) 2011.
- [4] W. Janke und S. Kappler: *Correlation length of 2D Potts models: numerical vs exact results.* in *LATTICE '93* proceedings, Dallas, zur Veröffentlichung in *Nuc. Phys. B (Proc. Suppl.)*.
- [5] T. Bhattacharya, R. Lacaze und A. Morel: *The free energy of the Potts model: from the continuous to the first-order transition region.* *Europhys. Lett.* 23 (1993) 547.

# Simulation der Quantenelektrodynamik auf dem Gitter in Anwesenheit dynamischer Wilson Fermionen

T. NEUHAUS

Universität Bielefeld, Fakultät für Physik  
Postfach 10 01 31, D-33501 Bielefeld, Germany  
E-mail: neuhaus@physw.uni-bielefeld.de

## Abstract

Die Quantenelektrodynamik (QED) beschreibt die Wechselwirkung geladener Teilchen und ist eine der erfolgreichsten Theorien der Elementarteilchenphysik. Im Jahre 1974 hat Wilson [1] die Gittereichtheorieformulierung (GET) der Feldtheorie vorgeschlagen, welche es ermöglicht die Eigenschaften von Eichtheorien unabhängig von bestimmten Näherungen, d. h. mit nichtstörungstheoretischen Methoden auf Gittern mit der Hilfe von Computersimulationen zu untersuchen. Das Studium der QED im Rahmen der Gittereichtheorie ist heute ein aktueller Forschungsgegenstand für die Hochenergiephysik. Dabei ist es notwendig in dieser Theorie die Eigenschaften der Eichteilchen (Photonen) und der fermionischen Materiefelder (Elektronen) gleichermaßen genau zu behandeln. Dies geschieht in der Computersimulation durch die Berücksichtigung dynamischer fermionischer Freiheitsgrade. Aufgrund der speziellen Eigenschaften von Fermionen ist das entsprechende numerische Problem sehr komplex, da es die Invertierung großer Matrizen im Computer benötigt. Die GET hat ferner Ähnlichkeit mit Modellen der statistischen Mechanik. Man benötigt für das Studium der physikalischen Gesetze eine genaue Kenntniss der in der Theorie enthaltenden Phasenübergänge. Wir studieren hier die Phasenstruktur einer bestimmten Formulierung der QED: kompakte QED mit Wilson Fermionen. In dieser Formulierung ist es notwendig den chiralen Phasenübergang zu lokalisieren und Aussagen über seine Ordnung zu treffen. Im Detail beschreiben wir die Methoden der Computersimulation dynamischer Fermionfreiheitsgrade, Algorithmen zur Invertierung großer fermionischer Matrizen, Methoden zur Bestimmung der Lage und Ordnung von Phasenübergangspunkten und unsere derzeitige Kenntniss über die Physik der Theorie. Ein besonderer Aspekt unserer Vorgehensweise besteht darin, daß wir verschiedene Versionen der Gittertheorie betrachten, welche sich nur um Terme unterscheiden, die bestimmte Gitterartefakte unterdrücken. Die hier dargestellte Arbeit entstand in Zusammenarbeit mit A. Hoferichter, V. K. Mitrjushkin und M. Müller Preussker von der Humboldt Universität Berlin.

## Literatur

- [1] K. G. Wilson: *Confinement of quarks*. Phys. Rev. D10 (1974) 2445.

# Stochastische Simulationen von Nichtgleichgewichts-Systemen

H. P. BREUER UND F. PETRUCCIONE

Fakultät für Physik, Universität Freiburg  
Hermann-Herder Strasse 3, D-79104 Freiburg i. Br., Germany  
E-mail: frpe@phyq1.physik.uni-freiburg.de

## Abstract

Es wird eine stochastische Formulierung der Bilanzgleichungen der Nichtgleichgewichtsthermodynamik formuliert. In diesem Ansatz werden die intensiven Größen, d. h. Massendichte, Impulsdichte und Energiedichte als multivariate Zufallsvariablen auf einem in Zellen zerlegten Ortsraum aufgefaßt. Die probabilistische Dynamik der stochastischen Felder ist über eine Mastergleichung definiert [1].

Eine systematische Entwicklung der Mastergleichung in Potenzen der inversen Zahl der Freiheitsgrade pro Zelle ergibt, daß der Erwartungswert des stochastischen Prozesses den makroskopischen Bilanzgleichungen genügt. Ferner lassen sich auf diese Weise die Langevin-Gleichungen der fluktuierenden Hydrodynamik im Nichtgleichgewicht ableiten [2, 3].

Der Ansatz läßt sich auch auf turbulente Strömungen anwenden [4]. In der Tat kann man zeigen, daß sich aus der Mastergleichung für das Geschwindigkeitsfeld die Hopf-Gleichung des charakteristischen Funktionals der statistischen Fluidodynamik ableiten läßt. Somit beschreibt der stochastische Prozeß im Kontinuumslimit vollständig die statistischen Eigenschaften des turbulenten Geschwindigkeitsfeldes.

Die stochastische Formulierung führt außerdem zu einem neuen Simulationsverfahren. Als Beispiel werden Simulationen zur fluktuierenden Hydrodynamik [3] und zur zweidimensionalen Navier-Stokes Turbulenz [5] vorgestellt und diskutiert.

## Literatur

- [1] H. P. Breuer, F. Petruccione: *A stochastic approach to computational fluid dynamics*. Continuum Mech. Thermodyn. **4** (1992) pp. 247–267.
- [2] H. P. Breuer, F. Petruccione: *A master equation description of fluctuating hydrodynamics*. Physica **A 192** (1993) pp. 569–588.
- [3] H. P. Breuer, F. Petruccione: *A master equation approach to fluctuating hydrodynamics: Heat conduction*. Phys. Lett. A, in press.
- [4] H. P. Breuer, F. Petruccione: *Burgers' turbulence model as a stochastic dynamical system: Master equation and simulation*. Phys. Rev. **E 47** (1993) pp. 1803–1814.
- [5] H. P. Breuer, F. Petruccione: *A master equation representation of two-dimensional turbulence*. J. Phys. A: Math. Gen. **26** (1993) pp. 7563–7582.



# Simulation von SOS-Modellen mit Cluster-Algorithmen

KLAUS PINN

Institut für Theoretische Physik I  
Wilhelm-Klemm-Str. 9, D-48149 Münster, Germany  
E-mail: `pinn@yukawa.uni-muenster.de`

## Abstract

Solid-On-Solid-Modelle spielen eine große Rolle in der Statistischen Mechanik von Grenzflächen und Oberflächen. Einige dieser Modelle sind dual zu bekannten Spin-Modellen. Zum Beispiel ist das 2-dimensionale diskrete Gaußsche Modell dual zum XY-Modell mit Villain-Wirkung. 2-dimensionale SOS-Modelle haben eine “rauhe” und eine “glatte” Phase. Dazwischen gibt es einen Phasenübergang unendlicher Ordnung, die sogenannte “roughening transition”.

Das Studium von SOS-Modellen wird sehr gefördert durch Monte-Carlo-Simulationen mit effizienten Cluster-Algorithmen [1]. Wir nennen diese Algorithmen VMR- (Valleys-to-Mountains-Reflection-) Algorithmen. Man stelle sich eine Oberfläche als eine Landschaft von Hügeln und Tälern vor. Clusterflips entsprechen dann im wesentlichen der Reflektion von Hügeln und Tälern an einer passend gewählten Spiegelebene. Wir haben demonstriert, daß VMR-Algorithmen in der Lage sind, das gefürchtete “Critical Slowing Down” ganz oder in hohem Maße zu eliminieren.

Wir haben VMR-Algorithmen erfolgreich auf das Studium der kritischen Eigenschaften von SOS-Modellen angewendet [2].

Im Vortrag soll erklärt werden, wie VMR-Algorithmen funktionieren, und es soll ein kleiner Überblick über die bisherigen Anwendungen gegeben werden.

## Literatur

- [1] H.G. Evertz, M. Hasenbusch, M. Marcu, K. Pinn, S. Solomon: Stochastic Cluster Algorithms for Discrete Gaussian (SOS) Models, *Phys. Lett. B* 254 (1991) 185.  
M. Hasenbusch, G. Lana, M. Marcu, K. Pinn: Cluster Algorithm for a Solid-On-Solid Model with Constraints *Phys. Rev. B* 46 (1992) 10472.  
M. Hasenbusch, M. Marcu, K. Pinn, in preparation.
- [2] H.G. Evertz, M. Hasenbusch, M. Marcu, K. Pinn, S. Solomon: High Precision Measurement of the SOS surface Thickness in the Rough Phase, *J. Phys. I France* (1991) 1669;  
M. Hasenbusch, M. Marcu, K. Pinn: *Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.)* 26 (1992) 598, High Precision Verification of the Kosterlitz-Thouless Scenario, and in preparation;  
H.G. Evertz, M. Hasenbusch, M. Marcu, K. Pinn: The Solid-On-Solid Surface Width around the Roughening Transition, *Physica A* 199 (1993) 31.

# A comparison between Monte Carlo and Schwinger–Dyson calculations for a lattice Nambu–Jona–Lasinio model

PAUL RAKOW

Institut für Theoretische Physik, Freie Universität Berlin  
Arnimallee 14, D-14195 Berlin, Germany  
E-mail: rakow@dirac.physik.fu-berlin.de

## Abstract

Nambu and Jona-Lasinio proposed [1] a model in which fermions interact with one another through a strong four-fermi coupling. Using approximate methods they found that above a critical value of the coupling the chiral symmetry of the theory is spontaneously broken, and found that two bound states (‘mesons’) occur in this strongly coupled phase.

We investigated a lattice version of this model [2, 3], paying particular attention to the identification of bound states and resonances and to renormalisation group trajectories in the neighbourhood of the chiral phase transition. We used two different methods. One was the hybrid Monte Carlo method, which in principle yields correct results at all values of the coupling, but which is expensive in computer time. The other was an approximate calculation based on a truncated set of Schwinger-Dyson equations. We found that the agreement between the two methods was very good. Comparison between the results of the two calculations was particularly useful in helping us to extrapolate our results to lattices of infinite volume.

## Literatur

- [1] Y. Nambu and G. Jona-Lasinio: *Dynamical Model of Elementary Particles Based on Analogy with Superconductivity*. Phys. Rev. **122** (1961), pp. 345–358.
- [2] A. Ali Khan, M. Göckeler, R. Horsley, P.E.L. Rakow, G. Schierholz and H. Stüben: *Spectroscopy and Renormalisation Group Flow of a Lattice Nambu–Jona-Lasinio model*. Berlin preprint FUB-HEP/93-14, DESY preprint DESY 93-195 (1993).
- [3] A. Ali Khan, M. Göckeler, R. Horsley, P.E.L. Rakow, G. Schierholz and H. Stüben: *The Nambu–Jona-Lasinio model with staggered fermions*. Berlin preprint FUB-HEP/93-21 (1993).

---

# Pfadintegral-Monte-Carlo mit Mehrgitter-Verfahren

TILMAN SAUER<sup>1</sup> UND WOLFHARD JANKE<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Institut für Theoretische Physik, Freie Universität Berlin  
Arnimallee 14, 14195 Berlin  
E-mail: [tilman@einstein.physik.fu-berlin.de](mailto:tilman@einstein.physik.fu-berlin.de)

<sup>2</sup>Institut für Physik, Johannes Gutenberg-Universität Mainz  
Staudingerweg 7, D-55099 Mainz, Germany  
E-mail: [janke@galileo.physik.uni-mainz.de](mailto:janke@galileo.physik.uni-mainz.de)

## Abstract

Feynmans Pfadintegraldarstellung der Quantenmechanik in euklidischer Formulierung weist eine strukturelle Ähnlichkeit mit der kanonischen Zustandssumme aus der statistischen Mechanik auf und gestattet so die numerische Behandlung von Problemen der Quantenmechanik mit der Monte-Carlo-Methode [1]. Heuristischen Argumenten zufolge erwartet man allerdings für die üblichen lokalen Update-Algorithmen eine Divergenz der Autokorrelationszeiten, die quadratisch im Diskretisierungsparameter ist. Kürzlich konnte zunächst für Einteilchenprobleme gezeigt werden, daß eine Anwendung der Mehrgitter-Monte-Carlo Methode, wie sie für die Gitterfeldtheorie und Statistische Mechanik bereits erfolgreich verwendet wurde [2], auch in diesem Fall möglich ist und die Divergenz der Autokorrelationen im Kontinuumsimes vollständig beseitigt [3]. Die Allgemeinheit der Mehrgitter-Formulierung gestattet zudem eine Kombination mit der sogenannten multikanonischen Formulierung. Mit dieser Kombination können die Autokorrelationen noch weiter reduziert werden, insbesondere bei der Behandlung von Tunnelproblem und bei der Simulation von Phasenübergängen erster Ordnung [4]. Schließlich zeigen wir, daß die Anwendung der Mehrgitter-Monte-Carlo Methode auch für die Simulation von Quantenketten einsetzbar ist und in Verbindung mit zusätzlichen konvergenzbeschleunigenden Modifizierungen die Simulation solcher Systeme erstmals mit einer Genauigkeit ermöglicht, die eine signifikante Überprüfung analytischer Approximationsverfahren gestattet.

## Literatur

- [1] M. Creutz, B. Freedman: *A Statistical Approach to Quantum Mechanics*. Ann. Phys. **132** (1981) pp. 427-462.
- [2] J. Goodman, A.D. Sokal: *Multigrid Monte Carlo method. Conceptual foundations*. Phys. Rev. **D40** (1989) pp. 2035-2071.
- [3] W. Janke, T. Sauer: *Path integral Monte Carlo using multigrid techniques*. Chem. Phys. Lett. **201** (1993), pp. 499-505.
- [4] W. Janke, T. Sauer: *Multicanonical multigrid Monte Carlo method*. Phys. Rev. **E** (1994), in press.

# Methode und Anwendung der Nichtgleichgewichts- Molekulardynamik Computersimulation

MARTIN KRÖGER UND HARALD VOIGT

Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Berlin, Sekr. PN 7 –1  
Hardenbergstr. 36, D–10623 Berlin, Germany  
E-mail: maok0433@w421zrz.physik.tu-berlin.de

## Abstract

Die Molekulardynamik-Computersimulation hat sich zur Untersuchung der Eigenschaften komplexer Systeme im Nichtgleichgewicht bewährt. Speziell wird eine Anwendung und die Methode an Polymerschmelzen unter dem Einfluß einer Strömung beschrieben [1]. Die Berechnung von Teilchentrajektorien geschieht über die 'Hochintegration' der Newtonschen Bewegungsgleichungen mittels Algorithmen, die sich aus der klassischen Liouville-Gleichung ableiten lassen. Makroskopische Phänomene, wie Strukturbildung und viskoelastisches Verhalten der Polymerschmelzen im Nichtgleichgewicht werden simuliert, indem Oberflächeneffekte durch periodische Grundvolumina vermieden, und effiziente Auswertungen der Wechselwirkungen über Nachbarschaftslisten vorgenommen werden. Erst solche Eingriffe lassen Simulationen zu, in denen das viskose Verhalten von Polymerschmelzen analysiert werden kann, denn die Relaxationszeiten allgemeiner makromolekularer Flüssigkeiten übertreffen diejenigen einfacher Fluide um mehrere Größenordnungen. Im Vortrag wird darauf eingegangen, wie die Qualität der Simulation aus der Sicht theoretischer und experimenteller Untersuchungen zu werten ist und welchen Beitrag die Simulation zur Verifizierung theoretischer Ansätze liefern kann [2–4].

## Literatur

- [1] M. Kröger, W. Loose und S. Hess: *Structural Changes and Rheology of Polymer Melts via Nonequilibrium Molecular Dynamics*, J. Rheology **37** (1993) 1057-1080.
- [2] R. Muller, J.J. Pesce and C. Picot: *Chain Conformation in Sheared Polymer Melts as Revealed by SANS*, Macromolecules **26** (1993) 4356-4362.
- [3] M. Kröger und S. Hess: *Viscoelasticity of polymeric melts and concentrated solutions. The effect of flow-induced alignment of chain ends*, Physica A**195** (1993) 336-353.
- [4] M. Kröger: *Flow-Alignment and Rheology of Polymer Melts. Calculation of the Single-Link Orientational Distribution Function*, erscheint in: *Polymer Theory* (ed. T. Vilgis) Macromol. Chem. - Macromol. Symp. (1994).

— — —

## D. Sonstige Themen

# Numerische Aspekte bei der Approximation des (gemessenen) Magnetfeldes in Teilchenspektrographen mittels des Ersatzladungsverfahrens

RALF DEGENHARDT<sup>1</sup>

National Superconducting Cyclotron Laboratory  
Michigan State University, East Lansing, MI 48824-1321, USA  
E-mail: [degenhardt@fhi-berlin.mpg.de](mailto:degenhardt@fhi-berlin.mpg.de)

### Abstract

Die für das Design hochauflösender Teilchenspektrographen essentielle Berechnung der Teilchentrajektorien erfordert eine genaue Kenntnis des Magnetfeldes sowie dessen Ableitungen höherer Ordnung. Nach der Optimierung eines Designs verbleibende, die Auflösung des Spektrographen begrenzende Aberrationen lassen sich mit Hilfe eines numerischen Verfahrens zur rekonstruktiven Korrektur herausrechnen [1]. Der hierdurch erzielbare Auflösungsgewinn wird wesentlich durch den Rechenaufwand bestimmt. Um daher bei dieser Vorgehensweise differential-algebraische Methoden [2] effektiv zum Einsatz bringen zu können, ist die genaue analytische Approximation der gemessenen Magnetfelddaten entscheidend.

Ein Ersatzladungsverfahren erlaubt es, für eine gegebene Anordnung durch Überlagerung von exakten Lösungen der Laplace-Gleichung das Potential beziehungsweise Feld in jedem Raumpunkt analytisch zu berechnen [3]. Als Ersatzladungen werden in dem vorliegenden Fall Gaußsche Ladungsverteilungen gewählt, die auf regelmäßigen Gitternetzen innerhalb der Polschuhe des Sektormagneten plaziert sind. Hierbei zeigt es sich, daß die Überlagerung einer regelmäßigen Anordnung einzelner Gaußverteilungen in einer relativ glatten Gesamtverteilung resultiert.

Typischerweise gilt es,  $10^5 - 10^6$  Feldmeßwerte in dem Bereich zwischen den Polschuhplatten zu approximieren. Der hierfür eingesetzte Least-Square-Algorithmus führt auf ein lineares Gleichungssystem, dessen Lösung die Stärken der Ersatzladungen sind. Um in dem betrachteten Testbeispiel ein Dipolfeld mit einer relativen Genauigkeit, die besser als  $10^{-4}$  ist, zu approximieren, werden etwa 2000 Ersatzladungen benötigt [4].

## Literatur

- [1] M. Berz, K. Joh, J. A. Nolen, B. M. Sherrill, A. F. Zeller: *Reconstructive Correction of Aberrations in Nuclear Particle Spectrographs*. Phys. Rev. C (1993) **47**, pp. 537-544.
- [2] M. Berz: *Arbitrary Order Description of Arbitrary Particle Optical Systems*. Nucl. Instr. and Meth. A **298** (1990) pp. 426-440.
- [3] H. R. Lewis: *Computation of Electrostatic and Rapidly Pulsed Magnetic Fields*. J. Appl. Phys. **37** (1966) pp. 2541-2550.
- [4] R. Degenhardt, M. Berz: *High-Accuracy Approximation of the Fringe Fields in Particle Spectrographs Using the Image Charge Method*. submitted to Nucl. Instr. and Meth. A.

---

<sup>1</sup>Neue Anschrift: Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Faradayweg 4-6, D-14195 Berlin

# Struktur und Gravitationsfelder von rotierenden Neutronensternen: ein nichtlineares elliptisches Variationsproblem

HEINZ HEROLD

Lehr- und Forschungsbereich Computational Physics, Universität Tübingen  
Auf der Morgenstelle 10, D-72076 Tübingen, Germany Germany  
E-mail: herold@tat.physik.uni-tuebingen.de

## Abstract

Zur Bestimmung der Gravitationsfelder und der Struktur von schnell rotierenden Neutronensternen ist es notwendig, die Gleichungen der allgemeinen Relativitätstheorie zu verwenden. Es werden stationäre, axialsymmetrische Lösungen der Einsteinschen Feldgleichungen für ideale fluide Medien, die mit der Winkelgeschwindigkeit  $\Omega$  rotieren, gesucht. In diesem Fall läßt sich das Problem in ein Minimalflächenproblem in einem pseudo-Riemannschen Potentialraum umformulieren [1]. Dies führt zu dem Variationsproblem  $\delta\mathcal{L} = 0$  mit

$$\mathcal{L} = \int_0^\infty dr \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta r \left[ W(\nabla U)^2 - \frac{e^{4U}}{4W}(\nabla A)^2 - \nabla\alpha \cdot \nabla W - 8\pi G W e^{2\alpha-2U}(\nabla W)^2 p(V) \right]$$

zur Bestimmung der vier Potentiale  $U(r, \theta)$ ,  $A(r, \theta)$ ,  $\alpha(r, \theta)$ ,  $W(r, \theta)$ . Dabei ist  $p(V)$  mit  $V = U + \frac{1}{2} \log((1 + \Omega A)^2 - \Omega^2 W^2 e^{-4U})$  bei gegebener Zustandsgleichung eine bekannte Funktion, die den Druck der Materie beschreibt. Dieses Variationsprinzip, das *nicht* positiv-definit ist, ist die Basis für die Diskretisierung mit Hilfe von finiten Elementen zur Bestimmung von numerischen Lösungen [2, 3]. Für realistische Zustandsgleichungen der Neutronensternmaterie werden die sich ergebenden Metrikfunktionen und die Struktur der rotierenden Neutronensterne als Funktion von Winkelgeschwindigkeit und Masse diskutiert. Als koordinatenunabhängige Veranschaulichung der Lösungen wird die Geometrie der Sternoberfläche und der weiteren Flächen konstanten Drucks durch Einbettung in den euklidischen 3-Raum dargestellt. Außerdem wird gezeigt, wie solche schnell rotierenden Objekte für einen asymptotischen Beobachter aussehen. Diese Resultate erhält man durch Berechnung der Photonenbahnen (“4D ray tracing”) in der numerisch bestimmten Metrik.

## Literatur

- [1] G. Neugebauer, E. Herlt: *Einstein-Maxwell fields inside and outside rotating sources as minimal surfaces*. Class. Quant. Grav. **1** (1984), pp. 695–703.
- [2] H. Herold, G. Neugebauer: *Gravitational Fields of Rapidly Rotating Neutron Stars: Numerical Results*. In: J. Ehlers, G. Schäfer (eds.): Relativistic Gravity Research. Springer Verlag (1992), pp. 319–340.
- [3] H. Herold, J. Heimberger, H. Ruder, X. Wu: *How Fast Can Neutron Stars Rotate?* In: K.A. Van Riper, R. Epstein, C. Ho (eds.): Isolated Pulsars. Cambridge University Press (1993), pp. 58–65.

# Effiziente Simulation der Wechselwirkung ultrakurzer Laserpulse mit molekularen Freiheitsgraden

CHRISTOF SCHÜTTE

Konrad-Zuse-Zentrum Berlin  
Heilbronner Str. 10, D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
E-mail: schuette@sc.zib-berlin.de

## Abstract

In der sogenannten Femto-Chemie wird die Möglichkeit untersucht, mittels ultrakurzer (Femto- oder Pikosekunden langer) Laserpulse ausgewählte Zustandsänderungen von Molekülen zu bewirken und dadurch die Reaktionskinetik dieser Molekül zu kontrollieren [1]. Bei der Realisation eines solchen Kontrollmechanismus ist genaue Kenntnis der Auswirkungen eines Laserpulses auf den Molekülzustand notwendig. Ausreichende Kenntnis kann man sich kostengünstig nur durch numerische Simulation der Reaktion des Moleküls auf den Laserpuls beschaffen.

Die zeitliche Entwicklung des Molekülzustandes wird durch die Schrödingergleichung beschrieben, die durch Entwicklung in Eigenfunktionen in eine komplexe, nichtautonome, gewöhnliche Differentialgleichung übergeht. Die Lösungen dieser Gleichung sind allerdings hochoszillatorisch, so daß jeder Standard-Integrator zu sehr kleinen Schrittweiten gezwungen wird, was große Rechenzeiten erzeugt. Eine wesentliche Verringerung des Aufwandes der Integration kann nur durch größere Schrittweiten erreicht werden und diese kann man nur erwarten, wenn es gelingt zu glatteren Trajektorien überzugehen. Leider sind alle bekannten Glättungsverfahren (averaging, Filtermethoden) für dieses spezielle Problem ungeeignet: sie zerstören die chemisch relevante Information, die zeitliche Entwicklung der Betragsquadrate der Lösungskomponenten.

In diesem Vortrag wird eine neue Methode (QRS = quasiresonant smoothing [3]) vorgestellt, die zu einer Glättung der Trajektorien unter Erhaltung der relevanten Information führt. Ihr zentraler Mechanismus ist ein physikalisch motiviertes Ausdünnen der rechten Seite der Differentialgleichung, kontrolliert durch einen Parameter  $\delta$ . Ausgehend von QRS wird ein adaptiver Algorithmus (AQRS) beschrieben, in dem  $\delta$  mit Hilfe eines speziellen Fehlerschätzers permanent an eine gegebene Genauigkeitsanforderung angepaßt wird. In Anwendungen auf real-life Probleme werden für AQRS im Vergleich mit Standardmethoden typischerweise speedup-Faktoren in der Größenordnung von  $10^2$  beobachtet.

## Literatur

- [1] J.E. Combariza, B. Just, J. Manz and G.K. Paramonov: *Isomerization controlled by ultrashort infrared laser pulses: model simulations*. J. Phys. Chem. **95** (1991), pp. 10351.
- [2] B. Just, J. Manz and G. Paramonov: *Series of ultrashort infrared laser pulses with analytical shapes for selective vibrational excitations*. Chem. Phys. Letters **193** (1992), pp. 429-433.
- [3] Ch. Schütte: *A quasiresonant smoothing algorithm for the fast analysis of selective vibrational excitation*. Impact of Computing in Science and Engineering **5** (1993), pp. 176-200.

# Numerische Analyse von Photostrom-Meßdaten

HEINZ W. ENGL <sup>1</sup>, DIETRICH HAARER <sup>2</sup>, HARALD F. KAUFFMANN <sup>3</sup>, GERHARD LANDL <sup>1</sup>,  
HARALD MEYER <sup>2</sup>, ALEXANDER SEIDEL <sup>3</sup>

<sup>1</sup> Ordinariat Industriemathematik, Johannes-Kepler-Universität Linz  
Altenbergerstr. 69, A-4040 Linz, Austria

<sup>2</sup> Lehrstuhl für Experimentalphysik IV, Universität Bayreuth  
D-95440 Bayreuth, Germany

<sup>3</sup> Institut für Physikalische Chemie der Universität Wien  
Währingerstr. 42, A-1090 Wien, Austria  
E-mail: seidel@pap.univie.ac.at

## Abstract

Ziel des Vortrages ist die Präsentation eines stabilen Algorithmus zur Behandlung eines inversen Problems der Photoleitungsforschung. Gegeben sei der zeitliche Verlauf der Stromstärke, der aus einem Time-of-Flight (TOF) Experiment gewonnen wurde [5]. Gesucht ist jene Fallenverteilung, die im Rahmen des Multiple-Trapping (MT) Modelles [2, 4] die beste Approximation an die Meßdaten liefert und damit am ehesten als Ursache des gemessenen Phänomens betrachtet werden kann.

Die Berechnung des Photostroms aus einer gegebenen Fallenverteilung (direktes Problem) entspricht dem Lösen eines gekoppelten Differentialgleichungssystems. Das zugehörige inverse Problem weist erhebliche numerische Instabilitäten auf [1].

Unter Einführung geeigneter Approximationen zerfällt das inverse Problem in zwei stabil lösbar Teilprobleme. Gültigkeitsbereiche der Approximationen und Stabilität der einzelnen Schritte werden detailliert diskutiert. Die getroffenen Aussagen werden durch numerische Beispiele untermauert.

## Literatur

- [1] E. Müller-Horsche, D. Haarer, H. Scher: *Transition from dispersive to nondispersive transport: Photoconduction of polyvinylcarbazole*. Phys. Rev. B **35** (1987), pp. 1273–1280.
- [2] F.W. Schmidlin: *Theory of trap-controlled transient photoconduction*. Phys. Rev. B **16** (1977), pp. 2362–2385.
- [3] G. Landl, T. Langthaler, H.W. Engl, H.F. Kauffmann: *Distribution of Event Times in Time-Resolved Fluorescence: The Exponential Series Approach — Algorithm, Regularization, Analysis*. J. Comp. Phys. **95** (1991), pp. 1–28.
- [4] J. Noolandi: *Equivalence of multiple-trapping model and time-dependent random walk*. Phys. Rev. B **16** (1977), pp. 4474–4479.
- [5] H. Meyer: *Ladungsträgertransport in konjugierten Polymeren*. Dissertation Univ. Bayreuth (1993)



# Extraction Methods for Boundary Integral Equations – a Combination of Computer Algebra and Numerical Methods

CHRISTOPH SCHWAB<sup>1</sup> UND WOLFGANG L. WENDLAND<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Mathematics, University of Maryland  
Baltimore County, Baltimore, MD 21228, U.S.A.

<sup>2</sup>Mathematisches Institut A, Universität Stuttgart  
Pfaffenwaldring 57, D-70569 Stuttgart, Germany  
E-mail: wendland@mathematik.uni-stuttgart.de

## Abstract

In this paper we develop and analyze a bootstrapping algorithm for the extraction of potentials and arbitrary derivatives of the Cauchy data of regular three-dimensional second order elliptic boundary value problems in connection with corresponding boundary integral equations of the so-called first kind. The method rests on the derivatives of the generalized Green's representation formula which are expressed in terms of singular boundary integrals as Hadamard's finite parts. Their regularization together with asymptotic pseudohomogeneous kernel expansions yields a constructive method for obtaining generalized jump relations. These expansions are obtained via composition of Taylor expansions of the local surface representation, the density functions, differential operators and the fundamental solution of the original problem, together with the use of local polar coordinates in the parameter domain. For piece-wise polynomial surface approximation and explicitly given fundamental solution, the corresponding expansion terms can be computed automatically by symbolic manipulation. The output is used for applying appropriate numerical integration procedures to weakly singular integrals after regularization. For boundary integral equations obtained by the direct method, this method allows the recursive numerical extraction of potentials and their derivatives near and up to the boundary surface.

## Literatur

- [1] J.-L. Guermond: *Numerical quadratures for layer potentials over curved domains in  $\mathbb{R}^3$* . SIAM J. Numer. Anal. **29** (1992) 1347–1369.
- [2] M. Guiggiani: *Accurate evaluation of stresses on the boundary using hypersingular integral equations*. In: (Ch. Hirsch ed.) First European Conf. Numer. Methods in Engrg. Brussels 1992, Elsevier Sc. Publ.
- [3] R. Kieser, C. Schwab, W.L. Wendland: *Numerical evaluation of singular and finite-part integrals on curved surfaces using symbolic manipulations*. Computing **49** (1992) 279–301.
- [4] C. Schwab, W.L. Wendland: *Kernel properties and representation of boundary integral operators*. Math. Nachrichten **156** (1992) 187–218.
- [5] C. Schwab, W.L. Wendland: *On the extraction technique in boundary integral equations*. In preparation.

# Rechnender Raum

KONRAD ZUSE

Im Haselgrund 21, D – 36088 Hünfeld, Germany

## Abstract

Die bisherigen Modelle der theoretischen Physik haben analogen Charakter. Sie setzen ein Kontinuum in einer isotropen Raumzeit voraus. Das gilt auch für die der Relativitätstheorie zugrunde liegenden Raumstrukturen und die analytischen Verfahren, wie die Differential- und Integralrechnung. Die modernen physikalischen Untersuchungen arbeiten unter weitgehender Zuhilfenahme des Computers, der stets nur mit begrenzter Genauigkeit arbeiten kann. Es ist daher in letzter Zeit der Begriff *diskrete Mathematik* entstanden.

Dem *Rechnender Raum* liegt von vornherein die Hypothese zugrunde, daß der Kosmos ein gigantischer Computer ist. Das mathematische Modell des *Zellularen Automaten* bietet ein gutes Werkzeug für derartige Untersuchungen. Die Fortschaltung von Mustern in einem solchen *Rechnender Raum* kann man in Beziehung setzen zur Bewegung von physikalischen Teilchen. Das wird an Pfeilfiguren demonstriert. Neue Erkenntnisse zeigen, daß im *Rechnenden Raum* physikalische Phänomene wie die *non-local correlation* leicht erklärt werden können (von Bedeutung z.B. beim *Einstein-Podolski-Rosen-Paradox*).

## Literatur

- [1] K. Zuse: *Rechnender Raum*. Schriften zur Datenverarbeitung Band 1. Friedrich Vieweg & Sohn Braunschweig (1969).
- [2] K. Zuse: *The Computing Universe*. International Journal of Theoretical Physics, Vol. **21**, Nos. 6/7, pp. 589-600, Plenum Press (1982).
- [3] K. Zuse: *Cellular Structures Space (Rechnender Raum) and Physical Phenomena*. Technical Report TR 93-12, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin.

---

## Teilnehmerliste

1. G. Albinus, Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (IAAS)  
Mohrenstr. 39  
D-10117 Berlin, Germany  
albinus@iaas-berlin.d400.de
2. Dipl.-Math. Robert Balder  
Institut für Informatik  
Technische Universität München,  
Arcisstr. 21  
D-80290 München Germany  
Tel.: (089) 2105-8276,  
balder@informatik.tu-muenchen.de
3. Dr. Holger Beck  
Institut für Astronomie und Astrophysik  
Technische Universität Berlin  
Hardenbergstr. 36  
D-10623 Berlin, Germany  
Tel.: (030) 314-23739  
beck0434@w415zrz.physik.TU-Berlin.de
4. Dipl.-Ing. Frank Bergemann  
DLR Institut für Strömungsmechanik  
Bunsenstraße 10  
D-37073 Göttingen, Germany  
Tel.: (0551) 709-2416  
bergemann@ts.go.dlr.de
5. Achim Bode  
Fachbereich Physik  
Universität Wuppertal  
Gausstr. 20  
D-42097 Wuppertal, Germany  
ACHIM@WPTU10.PHYSIK.UNI-WUPPERTAL.DE
6. Dipl.-Phys. Uwe Bolick  
Institut für Astronomie und Astrophysik  
Technische Universität Berlin  
Skr. PN 8-1  
Hardenbergstr. 36  
D-10623 Berlin, Germany  
Tel.: (030) 314-26406 / -22378  
bolick@alt.physik.TU-Berlin.DE
7. Sumit Bose  
Institut für theoretische Physik  
Technische Universität Berlin  
Skr. PN 7-1  
Hardenbergstraße 36  
D-10623 Berlin, Germany  
Tel.: (030) 314-22087  
bose@lorenz.physik.tu-berlin.de
8. Dipl.-Math. Rolf Bronstering  
Institut für Numerische Mathematik  
Universität Münster  
Einsteinstr. 62  
D-48149 Münster, Germany  
Tel.: (0251) 833097  
bronski@math.uni-muenster.de
9. Dipl.-Phys. Nikolaus Bubner  
Universität-GH Essen  
Universitätsstr. 2  
D-45117 Essen, Germany  
Tel.: (0201) 183-3775  
bubner@ing-math.uni-essen.de
10. Prof. Colin Cryer  
Institut für Numerische Mathematik  
Einsteinstraße 62  
D-48149 Münster, Germany  
Tel.:(0251) 833775  
cryer@math.uni-muenster.de
11. Prof. Dr. Wolfgang Dahmen  
Institut für Geometrie und  
Praktische Mathematik  
RWTH Aachen  
Templergraben 55  
D-52056 Aachen, Germany  
Tel.: (0241) 80 3959  
dahmen@igpm.rwth.Aachen.de
12. Dr. Ralf Degenhardt  
Fritz-Haber-Institut der  
Max-Planck-Gesellschaft  
Faradayweg 4-6  
D-14195 Berlin, Germany  
Tel.: (030) 8305-332  
Degenhardt@FHI-Berlin.MPG.de

13. Prof. Dr. Peter Deuffhard  
Konrad-Zuse-Zentrum für  
Informationstechnik Berlin (ZIB)  
Heilbronner Str. 10  
D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
Tel.: (030) 89604-101, Sekr. -104  
`deuffhard@zib-berlin.de`
14. Ulf Dieckmann  
ATOE / Forschungszentrum Jülich  
Postfach 1913  
D-52425 Jülich, Germany  
Tel.: (02461) 612513  
`u.dieckmann@kfa-juelich.de`
15. Dr. Ernst Dorfi  
Institut für Astronomie  
Universität Wien  
Türkenschanzstr. 17  
A-1180 Wien, Austria  
Tel.: +43 (1) 470 6800-92  
`ead@avia.una.ac.at`
16. Dipl.-Math. Oliver Dorn  
Institut für Numerische Mathematik  
Universität Münster  
Einsteinstr. 62  
D-48149 Münster, Germany  
Tel.: (0251) 833799  
`dorn@math.uni-muenster.de`
17. Axel J. Fleischer  
Institut für Astronomie & Astrophysik  
Technische Universität Berlin  
Skr. PN 8-1  
Hardenbergstr. 36  
D-10623 Berlin, Germany  
Tel.: (030) 314-26463  
`ajf10434@w415zrz.physik.TU-Berlin.DE`
18. Dipl.-Math. Karin Frank  
Fachbereich Informatik  
Universität Kaiserslautern  
Postfach 3049  
D-67653 Kaiserslautern, Germany  
Tel.: (0631) 205-3428  
`frank@informatik.uni-kl.de`
19. Dr. Jochen Fröhlich  
Konrad-Zuse-Zentrum für  
Informationstechnik Berlin (ZIB)  
Heilbronner Str. 10  
D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
Tel.: (030) 89604-258  
`froehlich@zib-berlin.de`
20. Jürgen Fuhrmann  
Institut für Angewandte  
Analysis und Stochastik (IAAS)  
Mohrenstr. 39  
D-10117 Berlin, Germany  
Tel.: (030) 20377 560  
`fuhrmann@iaas-berlin.d400.de`
21. Prof. Dr. Herbert Gajewski  
Institut für Angewandte  
Analysis und Stochastik (IAAS)  
Mohrenstraße 39  
D-10117 Berlin, Germany  
Tel.: (030) 20377-563  
`gajewski@iaas-berlin.d400.de`
22. Martin Grabenstein  
II. Institut für Theoretische Physik  
Luruper Chaussee 149  
D-22761 Hamburg, Germany  
Tel.: (040) 8998/2261  
`i02gra@dsyibm.desy.de`
23. Prof. Dr. Friedrich Grund  
Institut für Angewandte  
Analysis und Stochastik (IAAS)  
Mohrenstraße 39  
D-10117 Berlin, Germany  
Tel.: (030) 20377-583  
`grund@iaas-berlin.d400.de`
24. Otto Hainzl  
Porzellangasse 60/1/24  
A-1090 Wien, Austria  
Tel.: +43 (1) 317 85 41  
`otto@hainzl.co.at`

25. Dr. Wolf-Rainer Hamann  
 Institut für Theoretische Physik und Sternwarte  
 der Universität Kiel  
 Olshausenstraße 40  
 D-24118 Kiel, Germany  
 Tel.: (0431) 8804102  
 pas81@rz.uni-kiel.d400.de
26. Dr. Ulrich Hansmann  
 Supercomputer Computations Research Institute  
 Florida State University  
 Tallahassee, FL 32306, U.S.A.  
 Tel.: +1 (904) 644-0176  
 hansmann@scri.fsu.edu
27. Dr. Martin Hasenbusch  
 CERN, TH Division  
 CH-1211 Geneva 23, Switzerland  
 Tel.: +41 (22) 767-2481  
 hasenbus@surya13.cern.ch
28. Dipl.-Phys. Hans-Christian Hege  
 Konrad-Zuse-Zentrum für  
 Informationstechnik Berlin (ZIB)  
 Heilbronner Str. 10  
 D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
 Tel.: (030) 89604-141  
 hege@zib-berlin.de
29. Dr. Wolfram Hergert  
 Fachbereich Physik  
 Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg  
 Friedemann-Bach-Platz 6  
 D-06099 Halle, Germany  
 Tel.: (0345) 2003232  
 hergert@physik.uni-halle.d400.de
30. Prof. Dr. Heinz Herold  
 Lehr- und Forschungsbereich Computational Physics  
 Universität Tübingen  
 Auf der Morgenstelle 10  
 D-72076 Tübingen, Germany  
 Tel.: (07071) 292043  
 herold@tat.physik.uni-tuebingen.de
31. Sascha Hilgenfeldt  
 Heßstraße 50, App. 411  
 D-80798 München, Germany  
 Tel.: (089) 5420879  
 hilgenfe@informatik.tu-muenchen.de
32. Dipl.-Math. Ralf Hiptmair  
 Mathematisches Institut  
 Technische Universität München  
 Arcisstr. 21  
 D-80290 München, Germany  
 Tel.: (089) 2105-84290  
 hiptmair@mathematik.tu-muenchen.de
33. Dr. Dietmar Hömberg  
 Universität-Gesamthochschule Essen  
 Universitätsstr. 2  
 D-45117 Essen, Germany  
 Tel.: (0201) 183-2504  
 hoemberg@ing-math.uni-essen.de
34. Dr. Christian Holm  
 Institut für Theoretische Physik  
 Arnimallee 14  
 D-14195 Berlin, Germany  
 Tel.: (030) 8386068  
 holm@einstein.physik.fu-berlin.de
35. Prof. Dr. Ulrich Hornung  
 Fakultät für Informatik  
 Universität der Bundeswehr München  
 D-85577 Neubiberg, Germany  
 Tel.: (089) 6004-3386  
 ulrich@informatik.unibw-muenchen.de
36. Dr. Ernst-Michael Ilgenfritz  
 Fachbereich Physik  
 Humboldt-Universität zu Berlin  
 Invalidenstr. 110  
 D-10115 Berlin, Germany  
 HLZ002@DJUKFA11.bitnet

37. Dr. Hans-Thomas Janka  
Max-Planck-Institut für Astrophysik  
Karl-Schwarzschild-Str. 1  
D-85740 Garching (bei München)  
Tel.: (089) 3299-3225  
THJ@ibm-2.mpa-garching.mpg.de
38. Dr. Wolfhard Janke  
Institut für Physik, WA 331  
Johannes Gutenberg-Universität  
D-55099 Mainz, Germany  
Tel.: (06131) 39 3641  
Janke@galileo.physik.uni-mainz.de  
Janke@hlrserv.hlrz.kfa-juelich.de(sicherheit)
39. Dr. Karl Jansen  
DESY-T  
Notkestr. 85  
D-22603 Hamburg, Germany  
Tel.: (040) 8998-3605  
kjansen@x4u2.desy.de
40. Dr. Hans-Christoph Kaiser  
Institut für Angewandte  
Analysis und Stochastik (IAAS)  
Mohrenstraße 39  
D-10117 Berlin, Germany  
TEL.: (030) 20377552  
kaiser@iaas-berlin.d400.de
41. Dr. Dietmar Kaletta  
Zentrum für Datenverarbeitung  
Universität Tübingen  
Brunnenstr. 27  
D-72074 Tübingen, Germany  
Tel.: (07071) 292901  
kaletta@zdv.uni-tuebingen.de
42. Dr. Thomas Kalkreuter  
II. Institut für Theoretische Physik  
Universität Hamburg  
Luruper Chaussee 149  
D-22761 Hamburg, Germany  
Tel.: (040) 8998-2234  
kalkreut@ips102.desy.de
43. Dipl.-Math. Guido Kanschat  
Institut für Angewandte Mathematik  
Universität Heidelberg  
Im Neuenheimer Feld 293  
D-69120 Heidelberg, Germany  
Tel.: (06221) 56-5447  
kanschat@gaia.iwr.uni-heidelberg.de
44. Dipl.-Math. Kerstin Kantiem  
Institute of Applied Mathematics and Mechanics  
Warsaw University  
Banacha 2,  
02-097 Warsaw, Poland  
Tel.: 0048 (2) 658 32 36  
kerstin@apli.mimuw.edu.pl
45. Dipl. Phys. Stefan Kappler  
Institut für Physik, WA 331  
Johannes Gutenberg Universität  
D-55099 Mainz, Germany  
Tel.: (06131) 39 3645  
kappler@galileo.physik.uni-mainz.de
46. Burkhard Klaus  
Institut für Theoretische Physik  
Freie Universität Berlin  
Arnimallee 14  
D-14195 Berlin, Germany  
Tel.: (030) 838-3027  
klausb@risc4.physik.fu-berlin.de
47. Dipl.-Math. Olaf Klein  
FB 10, Lehrstuhl für Ing. Mathematik  
Universität-Gesamthochschule Essen  
Universitätsstr. 2  
D-45117 Essen, Germany  
Tel.: (0201) 183-3775  
klein@ing-math.uni-essen.de
48. Dr. Oswald Knoth  
Institut für Troposphärenforschung  
Permoserstr. 15  
D-04303 Leipzig, Germany  
Tel.. (0341) 235 2869  
knoth@tropos.de  
knoth@mathematik.uni-halle.d400.de

49. Uwe Koch  
Zentrum für Datenverarbeitung  
Universität Tübingen  
Brunnenstr. 27  
D-72074 Tübingen, Germany  
Tel.: (07071) 296783  
koch@tat.physik.uni-tuebingen.de
50. Dr. Hans Jürgen Kölsch  
Springer-Verlag GmbH & Co. KG  
Tiergartenstr. 17  
D-69121 Heidelberg, Germany  
Tel.: (06221) 487 537  
koelsch@spint.compuserve.com
51. Martin Kröger  
Institut für Theoretische Physik  
Sekt. PN 7 - 1  
Technische Universität Berlin  
Hardenbergstr. 36  
D-10623 Berlin, Germany  
Tel.: (030) 314-25225  
maok0433@w421zrz.physik.tu-berlin.de
52. Dipl.-Phys. Daniel Krüger  
Institut für Astronomie und Astrophysik  
Technische Universität Berlin  
Sekt. PN 8-1  
Hardenbergstr. 36  
D-10623 Berlin, Germany  
Tel.: (030) 314-23739  
krueger@weizen.physik.TU-Berlin.de
53. Dr. Angela Kunoth  
Institut für Informatik  
Freie Universität Berlin  
Takustr. 9  
D-14195 Berlin, Germany  
Tel.: (030) 838 75157  
kunoth@inf.fu-berlin.de
54. Dr. Jens-Peer Kuska  
Institut für Ionen- und Elektronenphysik  
Fachbereich Physik  
Humboldt-Universität zu Berlin  
Invalidenstr. 110  
D-10115 Berlin, Germany  
Tel.: (030) 2803323  
kuska@irz.hu-berlin.de
55. Prof. Dr. Dierck-Ekkehard Liebscher  
Astrophysikalisches Institut Potsdam  
An der Sternwarte 16  
D-14482 Potsdam, Germany  
Tel.: (0331) 7499-0  
deliebscher@aip.de
56. Prof. Dr. Volkard Linke  
Institut für Theoretische Physik  
Freie Universität Berlin  
Arnimallee 14  
D-14195 Berlin, Germany  
Tel.: (030) 838 3740/5248  
linke@dirac.physik.fu-berlin.de
57. Thomas Linner  
Institut für Angewandte Mathematik und Statistik  
Technische Universität München  
Dachauerstraße 9  
D-80335 München, Germany  
Tel.: (089) 55 22 48 23  
linner@appl-math.tu-muenchen.de
58. Dr. Thomas Lippert  
Fachbereich Physik  
Universität Wuppertal  
Gausstr. 20  
D-42097 Wuppertal, Germany  
Tel.: (0202) 439-2615  
lippert@wptu21.physics.uni-wuppertal.de
59. Marcus Lüttke  
Institut für Astronomie und Astrophysik  
Technische Universität Berlin  
Hardenbergstr. 36  
D-10623 Berlin, Germany  
Tel.: (030) 314-21062  
luet0434@w415zrz.physik.TU-Berlin.DE
60. Prof. Dr. Wolfgang Mackens  
Institut für Angewandte Mathematik  
Bundesstraße 55  
D-20146 Hamburg, Germany  
Tel.: (040) 4123-5160  
mackens@math.uni-hamburg.de

61. Detlef Merbach  
 Institut für Theoretische Physik  
 Technische Universität Berlin  
 Sekr. PN 7-1  
 Hardenbergstr. 36  
 D-10623 Berlin, Germany  
 merbach@itp1.physik.tu-berlin.de
62. Dipl.-Math. Francesco Montrone  
 Bayerischer Forschungsverbund für  
 technisch-wissenschaftliches Hochleistungsrechnen  
 Mathematisches Institut  
 Technische Universität München  
 Arcisstr. 21  
 D-80333 München, Germany  
 montrone@mathematik.tu-muenchen.de
63. Prof. Dr. Michael Müller-Preußker  
 Fachbereich Physik  
 Humboldt-Universität zu Berlin  
 Invalidenstr. 110  
 D-10099 Berlin, Germany  
 Tel.: (030) 2803-459 oder -230  
 mmp@ifh.de
64. Andreas Münch  
 Institut für Angewandte Mathematik und Statistik  
 Technische Universität München  
 Dachauerstraße 9  
 D-80335 München, Germany  
 Tel.: (089) 55 22 48 25  
 amue@appl-math.tu-muenchen.de
65. Prof. Dr. Herbert Muthsam  
 Institut für Mathematik  
 Universität Wien  
 Boltzmannng. 5  
 A-1090 Wien, Austria  
 a8131daa@vm.univie.ac.at
66. PD Dr. Thomas Neuhaus  
 Fakultät für Physik  
 Universität Bielefeld  
 D-33501 Bielefeld, Germany  
 Tel.: (05201) 106-6221  
 neuhaus@physw.uni-bielefeld.de
67. Dr. Ulrich Nowak  
 Konrad-Zuse-Zentrum für  
 Informationstechnik Berlin (ZIB)  
 Heilbronner Str. 10  
 D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
 Tel.: (030) 89604-175  
 nowak@zib-berlin.de
68. Dr. Francesco Petruccione  
 Fakultät für Physik  
 Universität Freiburg  
 Hermann-Herder Strasse 3  
 D-79104 Freiburg i. Br., Germany  
 frpe@phyq1.physik.uni-freiburg.de
69. Dr. Klaus Pinn  
 Institut für Theoretische Physik I  
 Universität Münster  
 Wilhelm-Klemm-Str. 9  
 D-48149 Münster, Germany  
 Tel.: (0251) 83-4948  
 pinn@yukawa.uni-muenster.de
70. Dipl. Phys. Dirk Pleiter  
 Fachbereich Physik  
 Freie Universität Berlin  
 Arnimallee 14  
 D-14193 Berlin, Germany  
 Tel.: (030) 838-3742  
 pleiter@dirac.physik.fu-berlin.de
71. Dr. Wolfgang Quade  
 Institut für Theoretische Physik  
 Hardenbergstr. 36  
 D-10623 Berlin, Germany  
 quade@itp1.physik.tu-berlin.de
72. Dr. Paul E.L. Rakow  
 Institut für Theoretische Physik  
 Freie Universität Berlin  
 Arnimallee 14  
 D-14195 Berlin, Germany  
 Tel.: (030) 838-3742  
 rakow@dirac.physik.fu-berlin.de



73. Dr. Harald Riffert  
 Lehr- und Forschungsbereich  
 Theoretische Astrophysik  
 Universität Tübingen  
 Auf der Morgenstelle 10  
 D-72076 Tübingen  
 (07071) 292043  
 riffert@tat.physik.uni-tuebingen.de
74. Dr. Maximilian Ruffert  
 Max-Planck-Institut für Astrophysik  
 Karl-Schwarzschild-Str. 1  
 D-85740 Garching  
 Tel.: (089) 3299-3219  
 mor@mpa-garching.mpg.de
75. Tilman Sauer  
 Institut für Theoretische Physik  
 Freie Universität Berlin  
 Arnimallee 14  
 D-14195 Berlin, Germany  
 Tel.: (030) 838 3041  
 tilman@einstein.physik.fu-berlin.de
76. Dr. Frank Schmidt  
 Konrad-Zuse-Zentrum für  
 Informationstechnik Berlin (ZIB)  
 Heilbronner Str. 10  
 D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
 Tel.: (030) 89604-200  
 schmidt@zib.berlin.de
77. Werner Schmid  
 Mathematisches Institut der Technischen  
 Universität München  
 Arcisstr. 21  
 D-80290 München, Germany  
 Tel.: (089) 2105-8473  
 schmid@mathematik.tu-muenchen.de
78. Prof. Dr. rer. nat. Eckehard Schöll  
 Institut für Theoretische Physik  
 Technische Universität Berlin  
 Sekr. PN 7-1  
 Hardenbergstr. 36  
 D-10623 Berlin, Germany  
 Tel.: (030) 314-23500  
 schoell@itp1.physik.tu-berlin.de
79. Dipl. Phys. Christof Schütte  
 Konrad-Zuse-Zentrum für  
 Informationstechnik Berlin (ZIB)  
 Heilbronner Str. 10  
 D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
 Tel.: (030) 89604-182  
 schuette@zib-berlin.de
80. Bernhard Schupp  
 Fakultät für Physik  
 Universität Freiburg  
 Hermann-Herder Str. 3  
 D-79104 Freiburg, Germany  
 Tel.: (0761) 203-5723  
 bernhard@phyv3.physik.uni-freiburg.de
81. Dipl.-Math. Michael Schwarz  
 Fachbereich Bauwesen  
 Universität-Gesamthochschule Essen  
 Universitätsstr. 2  
 D-45117 Essen, Germany  
 Tel.: (0201) 183-3606  
 schwarz@ing-math.uni-essen.de
82. Felix Schwitzer  
 Institut für Mathematik und Geometrie  
 Universität Innsbruck  
 Technikerstraße 13  
 A-6020 Innsbruck, Austria  
 Tel.: +43 512/4166  
 felix@mat1.uibk.ac.at
83. Prof. Dr. E. Sedlmayr  
 Institut für Astronomie und Astrophysik  
 Technische Universität Berlin  
 Hardenbergstr. 36,  
 D-10623 Berlin, Germany  
 Tel. (030) 314-23736  
 sedl0434@w415zrz.physik.tu-berlin.de
84. Dr. Martin Seebaß  
 Konrad-Zuse-Zentrum für  
 Informationstechnik Berlin (ZIB)  
 Heilbronner Str. 10  
 D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
 Tel.: (030) 89604-204  
 seebass@zib-berlin.de

85. Alexander Seidel  
 Institut für Physikalische Chemie  
 Universität Wien  
 Währingerstr. 42  
 A-1090 Wien, Austria  
 Tel.: 0043 (1) 31367-2543  
 seidel@pap.univie.ac.at
86. Laurentios Servissogloul  
 Zentrum für Datenverarbeitung  
 Universität Tübingen  
 Brunnenstr. 27  
 D-72074 Tübingen, Germany  
 Tel.: (07071) 5919  
 servissogloul@zdv.uni-tuebingen.de
87. Dr. Thomas Sonar  
 Institut für Strömungsmechanik  
 DLR Göttingen  
 Bunsenstraße 10  
 D-37073 Göttingen, Germany  
 Tel.: (0551) 709-2416  
 tommi@ts.go.dlr.de
88. Roland Speith  
 Lehr- und Forschungsbereich  
 Theoretische Astrophysik/Comput. Phys.  
 Universität Tübingen  
 Auf der Morgenstelle 10  
 D-72076 Tübingen, Germany  
 Tel.: (07071) 296387  
 speith@tat.physik.uni-tuebingen.de
89. Prof. Dr. Jürgen Sprekels  
 Institut für Angewandte  
 Analysis und Stochastik (IAAS)  
 Mohrenstraße 39  
 D-10117 Berlin, Germany  
 Tel.: (030) 20377 586  
 sprekels@iaas-berlin.d400.de
90. Prof. Dr. Gerhard Starke  
 Institut für Praktische Mathematik  
 Universität Karlsruhe  
 Englerstr. 2  
 D-76128 Karlsruhe, Germany  
 Tel.: (0721) 608-2678  
 starke@ipmsun1.mathematik.uni-karlsruhe.de
91. Dr. Jürgen Staude  
 Astrophysikalisches Institut Potsdam  
 Sonnenobservatorium Einsteinurm  
 Telegrafenberg  
 D-14473 Potsdam, Germany  
 Tel.: (0331) 288-2300  
 jstaude@aip.de
92. Dipl.-Math. Olaf Steinbach  
 Mathematisches Institut A  
 Universität Stuttgart  
 Pfaffenwaldring 57  
 D-70569 Stuttgart, Germany  
 Tel.: (0711) 685-5528  
 steinbach@mathematik.uni-stuttgart.de
93. Thomas Stoertkuhl  
 Institut für Informatik  
 Technische Universität München  
 Arcisstr. 21  
 D-80290 München, Germany  
 Tel.: (089) 2105-2020  
 stoertku@informatik.tu-muenchen.de
94. Dipl.-Phys. Nico Stollenwerk  
 Centrum für Complexe Systeme und Visualisierung  
 Fachbereich 3  
 Universität Bremen  
 Postfach 330 440  
 D-28334 Bremen, Germany  
 Tel.: (0421) 218-4236  
 nico@mathematik.uni-bremen.de
95. Dr. Hinnerk Stüben  
 Konrad-Zuse-Zentrum für  
 Informationstechnik Berlin (ZIB)  
 Heilbronner Str. 10  
 D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
 Tel.: (030) 89604-214  
 stueben@zib-berlin.de
96. Dr. Stefan Turek  
 Institut für Angewandte Mathematik  
 Im Neuenheimer Feld 294  
 D-69120 Heidelberg, Germany  
 Tel.: (06221) 565714  
 turek@gaia.iwr.uni-heidelberg.de

97. Dipl.-Ing. Detlef Uhlendorf  
 Institut für Hochfrequenztechnik  
 Technische Universität Berlin  
 Einsteinufer 25  
 D-10587 Berlin, Germany  
 Tel.: (030) 314-21036  
 uhdf1935@ibm1hft.ee.tu-berlin.de
98. Harald Voigt  
 Institut für Theoretische Physik  
 Technische Universität Berlin  
 Sekr. PN 7-1  
 Hardenbergstr. 36  
 D-10623 Berlin, Germany  
 Tel.: (030) 314-25225  
 vogt0433@w421zrz.physik.tu-berlin.de
99. Prof. Dr. Heinrich Voss  
 Institut für Angewandte Mathematik  
 Bundesstraße 55  
 D-20146 Hamburg, Germany  
 Tel.: (040) 4123-5126  
 voss@math.uni-hamburg.de
100. Andreas Wacker  
 Institut für Theoretische Physik  
 Technische Universität Berlin  
 Hardenbergstr. 36  
 D-10623 Berlin, Germany  
 Tel.: (030) 314-24254  
 wacker@lorenz.physik.tu-berlin.d400.de
101. Dr. habil. Gerald Warnecke  
 Mathematisches Institut A  
 Universität Stuttgart  
 Pfaffenwaldring 57  
 D-70569 Stuttgart, Germany  
 Tel.: (0711) 685-5536/5525  
 warnecke@mathematik.uni-stuttgart.de
102. Prof. Dr.-Ing. Wolfgang L. Wendland  
 Mathematisches Institut A, Lehrstuhl 6  
 Universität Stuttgart  
 Pfaffenwaldring 57  
 D-70569 Stuttgart, Germany  
 Tel.: (0711) 685-5524  
 wendland@mathematik.uni-stuttgart.de
103. Dr. Ralf Wolke  
 Institut für Troposphärenforschung e.V.  
 Permoserstr. 15  
 D-04303 Leipzig, Germany  
 Tel.: (0341) 235 2860
104. Prof. Dr.-Ing. Konrad Zuse  
 Im Haselgrund 21  
 D-36088 Hünfeld, Germany  
 Tel.: (06652) 2928
105. Rudolf Beck  
 Konrad-Zuse-Zentrum für  
 Informationstechnik Berlin  
 Heilbronner Str. 10  
 D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
 Tel.: (030) 896 04-200  
 beck@zib-berlin.de
106. Prof. Dr. Siegfried Hess  
 Institut für Theoretische Physik  
 Technische Universität Berlin  
 Sekr. PN 7-1  
 Hardenbergstraße 36  
 D-10623 Berlin, Germany  
 Tel.: (030) 314-23763
107. Andreas Hohmann  
 Konrad-Zuse-Zentrum für  
 Informationstechnik Berlin  
 Heilbronner Str. 10  
 D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
 Tel.: (030) 896 04-182  
 hohmann@zib-berlin.de
108. Uwe Jaekel  
 MPG Arbeitsgruppe  
 "Staub in Sternentstehungsgebiete"  
 Schillergäßchen 3  
 D-93040 Regensburg, Germany  
 Tel.: (03641) 555 93  
 rast@rchsg11.chemie.uni-regensburg.de

105. Wolfram Koepf  
Konrad-Zuse-Zentrum für  
Informationstechnik Berlin  
Heilbronner Str. 10  
D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
Tel.: (030) 896 04-216  
koepf@zib-berlin.de
110. Ralf Kornhuber  
Konrad-Zuse-Zentrum für  
Informationstechnik Berlin  
Heilbronner Str. 10  
D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
Tel.: (030) 896 04-174  
kornhuber@zib-berlin.de
111. Peter Nettesheim  
Konrad-Zuse-Zentrum für  
Informationstechnik Berlin  
Heilbronner Str. 10  
D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
Tel.: (030) 896 04-170  
nettesheim@zib-berlin.de
112. Sebastian Rast  
Institut für Physikalische  
und Theoretische Chemie  
Universität Regensburg  
Universitätsstr. 31  
D-93040 Regensburg, Germany  
Tel.: (0941) 943-4743  
rast@rchsg11.chemie.uni-regensburg.de
113. Matthias Rheinhardt  
Astrophysikalisches Institut Potsdam  
Stubenrauchstraße 26  
D-14482 Potsdam, Germany  
Tel.: (0331) 77138  
rei@dynamo.aip.de
114. Martin Schüler  
Astrophysikalisches Institut Potsdam  
Stubenrauchstraße 26  
D-10623 Berlin, Germany  
Tel.: (0331) 77138  
scu@plasma.aip.de
115. Detlev Stalling  
Konrad-Zuse-Zentrum für  
Informationstechnik Berlin  
Heilbronner Str. 10  
D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
Tel.: (030) 896 04-171  
strauch@zib-berlin.de
116. Jürgen Steinacker  
MPG Arbeitsgruppe  
“Staum in Sternentstehungsgebieten“  
Schillergäßchen 3  
D-07745 Jena  
Tel.: (3641) 55593  
stein@georg.astro.uni-jena.de
117. Peter Strauch  
Konrad-Zuse-Zentrum für  
Informationstechnik Berlin  
Heilbronner Str. 10  
D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
Tel.: (030) 838 6037  
strauch@zib-berlin.de
118. Roland Wunderling  
Konrad-Zuse-Zentrum für  
Informationstechnik Berlin  
Heilbronner Str. 10  
D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
Tel.: (030) 896 04-260  
wunderling@zib-berlin.de
119. Gerhard W. Zumbusch  
Konrad-Zuse-Zentrum für  
Informationstechnik Berlin  
Heilbronner Str. 10  
D-10711 Berlin-Wilmersdorf, Germany  
Tel.: (030) 896 04-177  
zumbusch@zib-berlin.de