Weierstraß-Institut
für Angewandte Analysis und Stochastik
(WIAS)

im Forschungsverbund Berlin e. V.

Jahresforschungsbericht 1998

Berlin 1999

Arbeitsfassung

Herausgegeben vom Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS)
Mohrenstraße 39
D – 10117 Berlin

Fax: + 49 30 2044975
e–mail (Internet): preprint@wias-berlin.de
e–mail (X.400): c=de;a=d400-gw;p=wias-berlin;s=preprint
World Wide Web: http://www.wias-berlin.de/

Inhaltsverzeichnis

1 Vorwort

Das Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS) legt hiermit Kollegen und Förderern des Instituts seinen Jahresforschungsbericht 1998 vor. Der Bericht gibt in seinem ersten Teil Auskunft über die gemachten Fortschritte und die erzielten Resultate, gegliedert nach Forschungsgebieten, Projekten und Einzelthemen. Im zweiten Teil wird ein Überblick über das wissenschaftliche Leben am WIAS gegeben.

In wissenschaftlicher Hinsicht war das Jahr 1998 wiederum erfolgreich. Die Realisierung des *Forschungsprogramms 1997 – 1999* wurde konsequent fortgesetzt, und das Institut konnte seine Stellung als führende Institution im Bereich der mathematischen Behandlung konkreter Problemstellungen aus komplexen Anwendungsfeldern weiter ausbauen. Dabei konnten wesentliche Beiträge sowohl zur Lösung konkreter Anwendungsprobleme als auch zu innermathematischen Problemstellungen geleistet werden, und die interne Verflechtung innerhalb des Instituts sowie die Anzahl der interdisziplinär bearbeiteten Aufgabenstellungen aus Industrie, Wirtschaft und Wissenschaft nahmen weiter zu.

Die positive Entwicklung spiegelt sich wider in einer im Vergleich zum Vorjahr erheblich gesteigerten Drittmitteleinwerbung sowie in der Anzahl der Promotionen, Habilitationen und Berufungen. Die Anzahl der in referierten Fachzeitschriften erschienenen Publikationen nahm wiederum zu. Besonders augenfällig wird der hohe Stellenwert, den die am WIAS geleistete Arbeit in der Scientific Community hat, im Bereich der Berufungen: Seit der Gründung des Instituts im Jahre 1992 sind nunmehr schon 15 Mitarbeiter des Instituts auf Professuren berufen worden (davon acht auf C4-Professuren und drei auf Professuren im Ausland), eine Bilanz, die sich bei einer Zahl von derzeit 54 etatisierten Wissenschaftlern wirklich sehen lassen kann.

Die an sich schon intensive Kooperation mit den Hochschulen im Raum Berlin wurde weiter vertieft. Prof. Gröger, stellvertretender Forschungsgruppenleiter am WIAS, war im Berichtsjahr Erster Vizepräsident der Humboldt-Universität, und Prof. Gajewski hielt eine Honorarprofessur an der Freien Universität inne; ferner wurde im Oktober mit der Freien Universität ein Kooperationsvertrag geschlossen, der neben der Regelung der Zusammenarbeit die Gemeinsame Berufung des Leiters der Forschungsgruppe *Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen* auf eine C4-S-Professur an der FU vorsieht. Das Besetzungsverfahren für diese Stelle ist angelaufen, und es besteht die Hoffnung, daß noch im laufenden Jahr eine Berufung erfolgen wird und somit ein zentrales strukturelles Problem des WIAS endlich behoben werden kann.

Neben diesen rein personellen Verbindungen wurde die Zusammenarbeit mit den Hochschulen durch die vielfältigen von Mitarbeitern des WIAS abgehaltenen Lehrveranstaltungen, durch die Beteiligung an Sonderforschungsbereichen, Schwerpunktprogrammen und Graduiertenkollegs der DFG, durch die gemeinschaftliche Bearbeitung von Forschungsprojekten sowie durch die Betreuung von Diplom- und Doktorarbeiten mit Leben erfüllt.

Eines der aus fachlicher Sicht wichtigsten Ereignisse im Berichtsjahr war der nach 94 Jahren erstmalig wieder nach Deutschland vergebene Mathematikerweltkongreß *International Congress of Mathematicians 1998*, der vom 18. bis 27. August 1998 an der Technischen Universität Berlin stattfand. Mehr als 3200 Teilnehmer aus über 90 Ländern nahmen an diesem Ereignis teil, auf dem traditionell die *Fields-Medaillen* (die "Nobelpreise der Mathematik") und der *Nevanlinna-Preis* verliehen wurden. Besonders erfreulich war die unerwartet große Resonanz in der Berliner Bevölkerung und in den Medien. Das WIAS beteiligte sich sowohl an der Organisation als auch am wissenschaftlichen Programm des Kongresses in erheblichem Umfang und konnte hierdurch einen wichtigen Beitrag zu dessen Gelingen leisten.

Unverändert bleibt es das übergeordnete Ziel des Instituts, Grundlagenforschung und anwendungsorientierte Forschung miteinander zu verbinden und durch neue wissenschaftliche Erkenntnisse zur Fortentwicklung innovativer Technologien beizutragen. Die Erfüllung dieser Aufgabe wird dabei angesichts der Mittelknappheit in allen Bereichen immer schwieriger. Das WIAS hat sich dabei erfolgreich dem wissenschaftlichen Wettbewerb um die Fördermittel gestellt; so ist es dem Institut im Berichtsjahr gelungen, die erfolgten Kürzungen durch vermehrte Anstrengungen in der Drittmitteleinwerbung weitgehend zu kompensieren. Damit das Institut auch weiterhin eine angemessene Chance im Wettbewerb um externe Fördermittel behält, muß ihm auch zukünftig eine hinreichende Grundausstattung gewährt werden.

Wie in den vergangenen Jahren hoffen wir, daß dieser Bericht möglichst vielen Kollegen und Förderern aus Industrie, Wirtschaft und Wissenschaft zur Information dienen und Anregungen zur Zusammenarbeit geben möge.

Berlin, im Februar 1998

J. Sprekels
Direktor

2 Wissenschaftlicher Beirat des WIAS

Prof. Dr. P. Deuflhard

Konrad-Zuse-Zentrum
für Informationstechnik
Berlin (ZIB)
Takustraße 7

14195 Berlin

Prof. Dr. H. Föllmer

Humboldt-Univ. zu Berlin
Math.-Naturwiss. Fakultät II
Institut für Mathematik
Unter den Linden 6

10099 Berlin

Prof. Dr. K.-H. Hoffmann

Gründungsdirektor der
Stiftung caesar

Friedensplatz 16

53111 Bonn

Prof. Dr. W. Jäger

Interdisziplinäres Zentrum für
Wissenschaftliches Rechnen
Universität Heidelberg
Im Neuenheimer Feld 368

69120 Heidelberg

Prof. Dr. M. Niezgódka

Interdisciplinary Centre for
Math. and Comput. Modelling
Warsaw University
Pawienskiego 5 A

PL–02-106 Warsaw
Poland

Prof. Dr. M. J. Vishik

Institute for Problems
of Information Transmission

Ermolova Street 19

101447 Moscow GSP-4
Russia

Prof. Dr. C. J. van Duijn

Centre for Mathematics and
Computer Science (CWI)
P.O. Box 94079
Kruislaan 413

NL–1090 GB Amsterdam
The Netherlands

Prof. Dr. E. Zeidler

Max-Planck-Institut
für Mathematik in den
Naturwissenschaften
Inselstraße 22–26

04103 Leipzig

3 Aufgabenstellung und Struktur des WIAS

3.1 Aufgabenstellung des WIAS

Das *Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS)* im Forschungsverbund Berlin e. V. verfolgt als Institut der Wissenschaftsgemeinschaft Gottfried Wilhelm Leibniz e. V. (WGL) Forschungsziele, die von gesamtstaatlichem Interesse und überregionaler Bedeutung sind. Entsprechend den Empfehlungen des Wissenschaftsrats betreibt das WIAS *projektorientierte* Forschungen in Angewandter Mathematik, insbesondere in *Angewandter Analysis* und *Angewandter Stochastik*, mit dem Ziel, zur Lösung *komplexer Problemkreise aus Wirtschaft, Wissenschaft und Technik* beizutragen. Die Herangehensweise ist dabei ganzheitlich, d. h., am WIAS wird der gesamte Problemlösungsprozeß von der interdisziplinären Modellierung über die mathematisch-theoretische Behandlung des Modells bis hin zur konkreten numerischen Simulation betrieben.

Die Forschungen am WIAS konzentrieren sich hauptsächlich auf die *Anwendungsfelder*

- Halbleiter, Nano- und Optoelektronik,
- Phasenübergänge,
- Stochastik in Wirtschafts- und Ingenieurwissenschaften und
- Kontinuumsmechanik,

die für die Fortentwicklung von Schlüsseltechnologien wie Materialwissenschaften, Fertigungstechnik, Qualitätssicherung und Umwelttechnologie zentrale Bedeutung haben. Im Rahmen dieser Schwerpunktthemen erstrecken sich die Untersuchungen auf ausgewählte mathematische Problemstellungen u. a. aus den Bereichen

- Entwicklung von Heterobipolartransistoren,
- Modellierung von Quantum-Well-Halbleiterlasern,
- Dynamik von Mehrsektions-DFB-Lasern,
- Wärmebehandlung und Widerstandsschweißen von Stählen,
- Modellierung und Anwendung moderner Materialien (z. B. Legierungen mit Formgedächtnis, Superlegierungen, Materialien mit piezoelektrischen und magnetostriktiven Eigenschaften),
- Modellierung von Spingläsern,
- mikro-, meso- und makroskopische Modellierung von Phasenumwandlungen,
- Optimierung von Prozessen der chemischen Verfahrenstechnik,
- Diffraktive Optik,
- Strömungen durch poröse Medien und Mechanik poröser Körper (z. B. Böden, Beton, Katalysatoren),

– Modellierung von Aktien-, Zins- und Wechselkursen und Bewertung von Zinsderivaten,

– Statistische Verfahren für Ökonometrie und Finanzmathematik, Value-at-Risk,

– Stochastische Modelle für Partikelverhalten in turbulenten Strömungen,

– Signalverarbeitung in Magnetresonanz- und Ultraschalltomografie.

Das WIAS ist ständig um eine Erweiterung des Spektrums seiner Anwendungsfelder bemüht. Zu den vielfältigen diesbezüglichen Aktivitäten des Instituts (z. B. Teilnahme an den Hannover-Messen), die vom Institutsbeauftragten für Technologietransfer koordiniert werden, zählt seit Anfang 1995 ein Institutskolloquium, in dem Praktiker mathematische Probleme aus konkreten Anwendungssituationen vorstellen und Kontakte zu deren Lösung angebahnt werden sollen.

3.2 Organisatorische Struktur des WIAS

Zur Erfüllung seiner wissenschaftlichen Aufgabenstellung war das WIAS im Berichtsjahr 1998 nach fachspezifischen Gesichtspunkten in sieben Forschungsgruppen gegliedert; hinzu kamen die wissenschaftlich-technischen Dienste. Im folgenden sind die Aufgaben dieser Abteilungen angegeben. Dabei ist zu bemerken, daß zur Lösung konkreter Anwendungsprobleme in der Regel *längerfristig kooperierende interdisziplinäre Projektgruppen* zusammen mit Anwendern gebildet werden, in die Institutsmitarbeiter aus verschiedenen Fachrichtungen ihre jeweilige mathematische Expertise einbringen. Diese Arbeitsweise nutzt die spezifischen Möglichkeiten eines außeruniversitären Instituts und trägt mit zur *horizontalen Vernetzung* innerhalb des Instituts bei. Die Verbesserung der horizontalen Vernetzung innerhalb des Instituts im Sinne eines möglichst effektiven Einsatzes der personellen Ressourcen ist eine ständige Aufgabe des Instituts.

WEIERSTRASS-INSTITUT FÜR ANGEWANDTE ANALYSIS UND STOCHASTIK
im Forschungsverbund Berlin e. V.
10117 Berlin, Mohrenstraße 39
Tel.: 20372-587, Fax: 2044975

DIREKTOR
Prof. Dr. J. Sprekels
App. 586

FORSCHUNGSGRUPPE 1	FORSCHUNGSGRUPPE 2	FORSCHUNGSGRUPPE 3	FORSCHUNGSGRUPPE 4	FORSCHUNGSGRUPPE 5	FORSCHUNGSGRUPPE 6	FORSCHUNGSGRUPPE 7
Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen	*Dynamische Systeme und Steuerungstheorie*	*Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen*	*Integralgleichungen und Pseudodifferentialgleichungen*	*Stochastische Systeme mit Wechselwirkung*	*Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik*	*Kontinuumsmechanik*
Leiter: Prof. Dr. H. Gajewski	Leiter: Priv.-Doz. Dr. K. R. Schneider	Leiter: N.N.	Leiter: Prof. Dr. S. Prößdorf †	Leiter: Priv.-Doz. Dr. A. Bovier	Leiter: Priv.-Doz. Dr. M. Nussbaum	Leiter: Prof. Dr.-Ing. K. Wilmański
App. 563	App. 302	App. 561	App. 553	App. 547	App. 575	App. 545

WISS. ASSISTENTIN DES DIREKTORS	BIBLIOTHEK	RECHENTECHNIK	VERWALTUNG	TECHNOLOGIEBEAUFTRAGTER
Dipl.-Ing. M. Teuchert	Dipl.-Math. H. Rothkirch	Dr. G. Telschow	Dr. U. Schulze	Dr. D. Hömberg
App. 594	App. 296	App. 590	App. 458	App. 491

3.2.1 Forschungsgruppe Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen

Die Arbeiten der Forschungsgruppe befassen sich mit der qualitativen Analyse von Systemen nichtlinearer partieller Differentialgleichungen und, darauf aufbauend, mit der Entwicklung von Verfahren zu ihrer numerischen Lösung. Die betrachteten Gleichungen modellieren komplexe Phänomene und Prozesse insbesondere aus Physik, Chemie, Materialwissenschaften und Technik und bilden die Grundlage zu deren numerischer Simulation.
Die Forschungsschwerpunkte der Forschungsgruppe liegen auf den Gebieten

- Mathematische Modelle von Ladungstransportvorgängen in Halbleitern unter Einbeziehung optischer, magnetischer, thermoelektrischer und quantenmechanischer Effekte,
- Reaktions-Diffusionsgleichungen zur Beschreibung des Transports von Fremdatomen in Festkörpern,
- Polymerisationsvorgänge,
- Phasenfeldmodelle zur Beschreibung diffusiver Phasenübergänge,
- Modellierung von Hysterese-Phänomenen (z. B. in Legierungen mit Gestalterinnerung),
- Stabilität von Verdichtersystemen.

3.2.2 Forschungsgruppe Dynamische Systeme und Steuerungstheorie

Die Arbeiten dieser Forschungsgruppe befassen sich mit der qualitativen Analyse und numerischen Untersuchung parameterabhängiger dynamischer Systeme aus den Anwendungen und ihrer Steuerung. Die betrachteten Systeme modellieren Prozesse in Natur, Wirtschaft und Technik. Aufgrund der Komplexität der zu untersuchenden Prozesse kann ihr Verhalten nur in seltenen Fällen rein analytisch bestimmt werden. Ein zentrales Problem stellt deshalb die *Reduktion* der mathematischen Modelle unter Beibehaltung essentieller Eigenschaften dar. Im Berichtsjahr lagen die Forschungsschwerpunkte der Forschungsgruppe auf den Arbeitsfeldern

- Optoelektronik,
- Chemische Verfahrenstechnik,
- Geophysik.

3.2.3 Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen

Die Simulation und Steuerung naturwissenschaftlicher und technologischer Vorgänge erfordert die effiziente numerische Lösung von Systemen nichtlinearer partieller Differentialgleichungen, von großen Systemen von Algebro-Differentialgleichungen und von großen nichtlinearen kontinuierlichen Optimierungsproblemen. Die Hauptaufgabe der Forschungsgruppe besteht in der Entwicklung, Begründung und Implementation numerischer Algorithmen zur Lösung solcher Systeme. Gleichzeitig sind anwenderfreundliche Schnittstellen und Benutzeroberflächen zu entwickeln.

Die Forschungsgruppe erfüllt dabei auch *Servicefunktionen von zentraler Bedeutung* innerhalb des WIAS: Sie arbeitet an entscheidender Stelle an der Entwicklung und Implementation nutzerorientierter Softwarepakete mit und sorgt in enger Abstimmung mit den fachlich jeweils zuständigen Forschungsgruppen für deren Aktualisierung und Pflege. Insbesondere ist sie für die Entwicklung benutzerfreundlicher graphischer Oberflächen und Fragen der *Visualisierung* im WIAS zuständig.

Die von der Forschungsgruppe in eigener Verantwortung zu bearbeitenden Anwendungsprobleme entstammen derzeit den Problemfeldern

- Chemische Prozeßsimulation,
- Transportprozesse in porösen Medien,
- Simulation elektromagnetischer Felder.

3.2.4 Forschungsgruppe Integralgleichungen und Pseudodifferentialgleichungen

Integralgleichungsmethoden werden zunehmend zur Modellierung und numerischen Behandlung schwieriger Anwendungsprobleme aus den Natur- und Ingenieurwissenschaften (z. B. Kontinuumsmechanik, Aero- und Hydrodynamik, Elektromagnetismus, Optik) eingesetzt. Sie spielen bei der Behandlung *inverser Probleme* eine zentrale Rolle. Insbesondere die *Randelementmethoden* sind als Gegenstück bzw. Ergänzung zu den Finite-Element-Methoden fester Bestandteil moderner Softwarepakete in diesen Anwendungsgebieten.

Die Hauptaufgabe der Forschungsgruppe bestand im Berichtsjahr darin, spezifische Beiträge zur Entwicklung, Implementation und effektiven Nutzung von Integralgleichungs- und Randelementmethoden in komplexen Anwendungsfeldern zu liefern und anwendungsorientierte interdisziplinäre Projekte durchzuführen.

Die Schwerpunkte der Arbeiten der Forschungsgruppe lagen in den Anwendungsfeldern

- Elastizitätstheorie, Bruchmechanik und Tragflügeltheorie,
- Inverse Probleme in Bruchmechanik, Optik, Hydrologie und Seismik,
- diffraktive Strukturen in der Optik.

3.2.5 Forschungsgruppe Stochastische Systeme mit Wechselwirkung

Die mathematische Analyse sehr großer Systeme und Strukturen mit wechselwirkenden Komponenten steht derzeit im besonderen Interesse der theoretischen Physik und der Angewandten Mathematik. Solche Systeme sind in zahlreichen Bereichen der Naturwissenschaften (Festkörperphysik, Materialwissenschaften, Biologie, Neurophysiologie) und im Rahmen der fortschreitenden Miniaturisierung zunehmend auch in technologischen Anwendungen (Neuronale Netze, Kommunikationsnetze, Mikrobauelemente) von Bedeutung. In derartig großen Systemen treten qualitativ neue *kollektive Phänomene* auf, die von spezifischen Details weitgehend unabhängig sind. Die Hauptaufgabe der Forschungsgruppe besteht darin, anwendungsorientierte Beiträge zur Klärung derartiger Phänomene zu liefern. Insbesondere geht es um die Entwicklung von Methoden und Verfahren zur Herleitung von Gleichungen für eine Beschreibung der globalen, makroskopischen Größen dieser Systeme.

Die Forschungsschwerpunkte der Forschungsgruppe liegen auf den Gebieten

- Statistische Mechanik und mikroskopische Modelle von Phasenübergängen,
- Elektronentransport in ungeordneten Materialien,
- kinetische Gleichungen der Gasdynamik,
- wechselwirkende Diffusionen.

3.2.6 Forschungsgruppe Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik

Die Forschungsgruppe befaßt sich mit Arbeiten zur angewandten Wahrscheinlichkeitstheorie und zur Mathematischen Statistik. Im Vordergrund stehen dabei Anwendungen in den Wirtschafts- und Ingenieurwissenschaften. Im Berichtsjahr erfolgte eine teilweise Neuorientierung in Richtung auf anwendungsorientierte Forschungen zur Stochastik der Finanzmärkte. Hierbei sollen, außer einigen Problemen der Derivatenbewertung, hauptsächlich numerische und statistische Fragen der Mathematical Finance behandelt werden. Die bestehenden Forschungsschwerpunkte zur stochastischen Turbulenz und zur Effizienz von Monte-Carlo-Methoden wurde ausgebaut. Auf dem Gebiet der Nichtparametrischen Statistik erfolgte einerseits eine verstärkte Hinwendung zu Fragen der Ökonometrie, andererseits zu inversen Problemen der Bild- und Signalerkennung.

Die Forschungstätigkeit der Gruppe orientiert sich derzeit an den Anwendungsfeldern

- Modellierung von Aktien-, Zins- und Wechselkursen und Bewertung von Zinsderivaten,
- Statistische Verfahren für Ökonometrie und Finanzmathematik, Value-at-Risk,
- Stochastische Modelle für Partikelverhalten in turbulenten Strömungen,
- Signalverarbeitung in Magnetresonanz- und Ultraschalltomografie.

3.2.7 Forschungsgruppe Kontinuumsmechanik

Die zentrale Aufgabe der Forschungsgruppe Kontinuumsmechanik besteht in der Modellierung und Auswertung komplexer Phänomene in thermomechanischen Prozessen. Zur Zeit untersucht die Fachgruppe Phänomene in

- porösen und granularen Stoffen, z. B. Böden, Beton und Mörtel,
- modernen Legierungen, z. B. Formgedächtnislegierungen in Steuerungselementen und Zinn/Blei-Legierungen in mikroelektronischen Bauteilen.

Die hier auftretenden Phänomene sind

- Diffusion von Schadstoffen sowie Wellenausbreitung in porösen und granularen Stoffen,
- Phasenübergänge und insbesondere spannungsunterstützte Entmischungsvorgänge in Legierungen.

Ferner wird neben der Etablierung von neuen Lösungsmethoden für Anfangs- und Randwertprobleme für gewisse Klassen hyperbolischer Systeme die Molekulardynamik als wichtiges Hilfsmittel verwendet und im Hinblick auf eine neue Begründung der Statistischen Mechanik ausgebaut.

3.2.8 Wissenschaftlich-technische Dienste

Zur Versorgung der Forschungsgruppen mit Fachliteratur und Fachinformationen betreibt das WIAS eine *wissenschaftliche Bibliothek*, die den Charakter einer *Spezialbibliothek* hat, d. h., sie stellt aus eigenen Beständen und durch Mitnutzung fremder Bestände die Literatur für die wissenschaftliche Arbeit bereit und führt die auf klassische und moderne Technologien gestützte Literaturinformation durch. Dies geschieht in enger Zusammenarbeit mit der im Bereich der Rechentechnik angesiedelten *Fachinformation*. Das Profil der Bibliothek orientiert sich an den wissenschaftlichen Zielsetzungen des Instituts. Dementsprechend wird vorrangig Literatur zur Angewandten Analysis und Stochastik erworben. Wichtige Standardwerke auf den Gebieten Mathematische Physik, Kontinuumsmechanik, Numerik und Informatik werden ebenfalls beschafft, soweit sie nicht nur kurzfristig benötigt werden. Gehalten werden Zeitschriften, Serien, Monographien, Preprints, Reports und CD-ROM.

Die Gruppe *Rechentechnik* ist zuständig für die Versorgung des Instituts mit den Kapazitäten im Bereich der EDV, die zur Erfüllung der wissenschaftlichen Aufgabenstellung des Instituts benötigt werden. Ihr obliegt neben der Hardware- und Software-Wartung das gesamte Systemmanagement und ferner die Betreuung des hausinternen Rechnernetzes. Außerdem ist die Ankoppelung des Netzes an die nationalen und internationalen Netzdienste zu gewährleisten. Die Gruppe Rechentechnik wirkt beratend bei der Beschaffung der EDV-Ausstattung des Instituts mit.

Die *Verwaltung* erledigt die für die Arbeitsfähigkeit des Instituts notwendigen verwaltungstechnischen und organisatorischen Aufgaben. Das WIAS ist mit derzeit sieben weiteren naturwissenschaftlichen Forschungsinstituten im Forschungsverbund Berlin e. V. (FVB) rechtlich zusammengeschlossen. Administrative Aufgaben werden im FVB zwecks einer effizienten einheitlichen Verwaltungsleistung arbeitsteilig von der *Gemeinsamen Verwaltung des FVB* und den *Institutsverwaltungen* erbracht. Zentrale administrative Leistungen und Servicefunktionen sind der Gemeinsamen Verwaltung zugeordnet, während institutsspezifische Verwaltungsvorgänge und „Interface-Funktionen“ im Verhältnis zur wissenschaftlichen Arbeit direkt im Institut wahrgenommen werden. Die Zusammenarbeit zwischen Gemeinsamer Verwaltung, Geschäftsführung, Institutsleitung und Institutsverwaltung wird durch die *Geschäftsordnung des FVB* geregelt. Dem *Geschäftsführer* des FVB obliegt danach die Führung der Verwaltungsgeschäfte. Er ist der Beauftragte des Institutshaushaltes im Sinne der haushaltsrechtlichen Bestimmungen und übt die Fachaufsicht in den administrativen Angelegenheiten unter Berücksichtigung der personalrechtlichen und sachlichen Entscheidungsbefugnisse des Institutsdirektors aus.

4 Forschungsergebnisse und Anwendungsprojekte

4.1 Forschungsgruppe Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen

4.1.1 Zusammenfassung

Die Forschungsgruppe hat ihre im Institutsforschungsprogramm konzipierten Arbeiten zur mathematischen und numerischen Untersuchung komplexer Systeme nichtlinearer partieller Differentialgleichungen, die relevante naturwissenschaftliche und technologische Prozesse modellieren, fortgesetzt. Die Schwerpunkte lagen dabei auf den Gebieten:

- Mathematische Modelle von Ladungstransportvorgängen in Halbleitern unter Einbeziehung optischer, magnetischer, thermoelektrischer und quantenmechanischer Effekte,
- Reaktions-Diffusionsgleichungen zur Beschreibung des Transports von Fremdatomen in Festkörpern,
- Phasenfeldmodelle zur Beschreibung diffusiver Phasenübergänge,
- Modellierung von Shape-Memory-Phänomenen,
- Stabilität von Verdichtersystemen,
- Polymerisations- und Chemotaxisvorgänge.

Die mathematische Modellierung erfolgt typischerweise in enger interdisziplinärer Kooperation mit anderen Forschungseinrichtungen.
Das Spektrum der Arbeiten reicht von grundlegenden qualitativen Untersuchungen zur Existenz, Einzigkeit, Regularität und dem asymptotischen Verhalten von Lösungen der Gleichungen über die Begründung, Implementation und praktische Erprobung von Näherungsverfahren bis zur Installation von Lösungsalgorithmen bei Kooperationspartnern. Bei letzterem arbeitet die Gruppe eng mit anderen Forschungsgruppen, namentlich der Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen, zusammen.
Ein wesentlicher Teil der Arbeiten steht in direkter Beziehung zu Anwendungsprojekten. Dazu gehörten im Berichtsjahr vor allem die folgenden vom Bundesministerium für Bildung und Forschung im Rahmen des Programms „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“ geförderten Projekte:

- 3D-Simulation von Halbleiterdetektoren
- Modellierung, Analyse und Simulation des Widerstands-Impulsschweißens
- Modellierung und Simulation von hochsperrenden Bauelementen für Schaltkreise der angesteuerten Leistungselektronik
- Thema: Modellierung und Simulation verspannter Quantenschichten in Halbleiterlasern
- Thema: Züchtung von SiC-Kristallen durch Sublimation

Ein Höhepunkt im internationalen mathematischen Leben war der Internationale Mathematikerkongreß (ICM'98) in Berlin. Die Forschungsgruppe nahm an seiner Organisation und am wissenschaftlichen Programm aktiv teil.
Im Anschluß werden ausgewählte Projekte der Forschungsgruppe detaillierter vorgestellt.

4.1.2 Projekte

Modellierung und Simulation von Halbleiterlasern mit verspannten Quantenschichten

Bearbeiter: U. Bandelow, H. Gajewski, H.-Chr. Kaiser, J. Rehberg

Kooperation: BOSCH Telekom GmbH, M. Möhrle (Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin (HHI)), H. Wenzel (Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik Berlin), H.-J. Wünsche (Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Physik)

Förderung: BMBF

Ziel des Projekts ist die Realisierung eines Tools im Rahmen von `Tosca98`® (**T**w**o** dimensional **s**emi**c**onductor **a**nalysis package, WIAS), das eine möglichst realistische Simulation von Halbleiterlasern mit verspannten Multi Quantum Well Schichten (SMQW-Laser, siehe Abb. 1) und damit deren Optimierung erlaubt [1]. Es erfolgte in diesem Zusammenhang einerseits eine Erweiterung des Drift-Diffusionsmodells im Simulator `Tosca98`®, um selbstkonsistent die Erwärmung und die Photonenpopulation im Bauelement berücksichtigen zu können, andererseits erfolgten Untersuchungen von grundsätzlichen Problemen, die die Quanten-Natur der Ladungsträger betreffen.

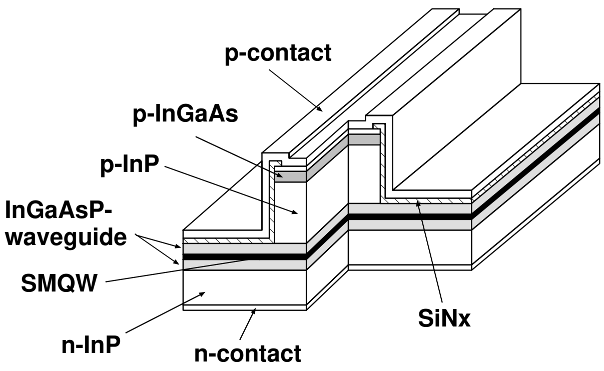


Abb. 1: Schema eines SMQW-Lasers, HHI.

Auf der Grundlage des im Drift-Diffusionmodell verankerten Ladungsträgertransports wurden exemplarische Anwendungsrechnungen zu konkreten Strukturen vom HHI, wie in Abb. 1 dargestellt, durchgeführt. Sie dienten dem Test der numerischen Tools bzw. der Bewertung des Modells und lieferten Hinweise für die Anwender. Speziell standen Probleme der transversalen Wellenleitung (Transversalmodenkonkurrenz, siehe Abb. 2) im Vordergrund, die u. a. in Kombination mit thermischer Aufheizung, Dotierung und Geomtrie untersucht wurden.

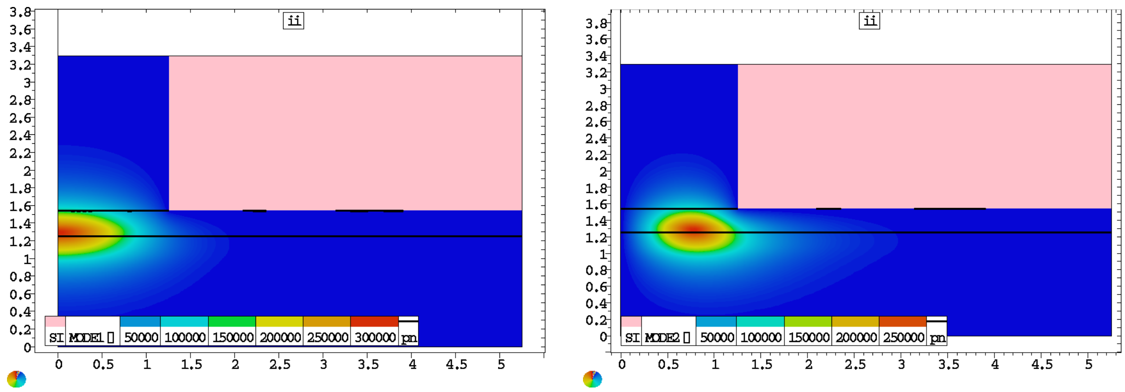


Abb. 2: Intensitätsverteilung der transversalen Grundmode (links) und der lateralen Obermode (rechts) der Referenzstruktur in Abb. 1. Mit zunehmender Intensität verschlechtern sich die energetischen Verhältnisse für die Grundmode und die Obermode schwingt an.

Die selbstkonsistente Modellierung erforderte die Implementierung von Bilanzgleichungen für die Photonenzahlen in den einzelnen Moden und deren simultane Lösung zusammen mit Drift-Diffusions-, Poisson-, Temperatur- (siehe Abb. 3) und Helmholtzgleichungen (siehe Abb. 2) im Rahmen der Fermistatistik.

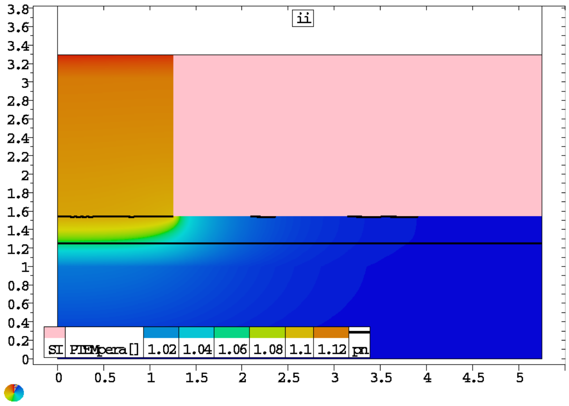


Abb. 3: Temperaturverteilung im SMQW-Laser (analog zu Abb. 1 und Abb. 2). Die Wärmeproduktion am p-Kontakt erhöht die Temperatur lokal um ca. 40K.

Die Erfassung der Quantisierungseffekte in den Wells (SMQW-Schicht in Abb. 1) erfordert erhebliche Erweiterungen des Modellrahmens. Wesentliche Effekte dieser Art resultieren aus quantenspezifischen Modifikationen folgender Größen, die sich insbesondere auf den *optischen Gewinn* für die Moden auswirken.

Bandstruktur Die (im Drift-Diffusions-Modell parabolisch unterstellte) Bandstruktur erfährt, insbesondere durch die Brechung der Translationssymmetrie in den Quantenschichten, wesentliche Modifikationen. Durch die Quantisierung zerfallen die Hauptbänder in ein System von Subbändern, wobei der Translationsfreiheitsgrad in Quantisierungsrichtung entfällt. Die Bandstruktur weicht erheblich von der Parabolizität ab (was u. a. den Übergang von der rein energieabhängigen Zustandsdichte zur *lokalen* Zustandsdichte erzwingt) und wird durch weitere Effekte wie *Spin-Bahn-Wechselwirkung* und mechanische *Verspannung* zusätzlich aufgespalten. Zur Simulation der Bänder und Zustände wurde, basierend auf der *kp-Methode* in *Enveloppenfunktionsapproximation*, das Tool *kplib* (siehe S. 146) geschaffen.

Einfangkinetik Ein besonderes Problem stellt die *Besetzung* der berechneten Zustände dar, für die verschiedene Herangehensweisen denkbar sind. Im Laufe der diesbezüglichen Untersuchungen etablierte sich das sog. *Capture-Escape-Modell*, welches von einer *energetischen Unterscheidung* nach freien und lokalisierten Zuständen der Ladungsträger Gebrauch macht. Zwischen diesen so definierten Spezies vermittelt ein sog. Capture-Escape-Term in den entsprechenden Transportgleichungen, der die zugrundeliegenden Streuprozesse wie Elektronen-Phononen- bzw. Elektronen-Elektronen-Streuung parametrisch beschreibt [1].

Literatur

1. H. GAJEWSKI, H.-CHR. KAISER, *Transversal modeling of semiconductor lasers with ToSCA*, in: Report of the Workshop Scientific Computing in Electrical Engineering, (P. Deuflhard, H. Gajewski, G. Hebermehl, W. Heinrich, A. Koste, U. Langer, T. Weiland, Hrsg.), WIAS-Report No. **16**, 1998, Berlin, pp. 16–17.

Energieberechnungen für lokalisierte Vielteilchenzustände in Quantenstrukturen

Bearbeiter: U. Bandelow, H.-Chr. Kaiser, J. Rehberg

Kooperation: H.-J. Wünsche (Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Physik)

Die Lokalisierung von Excitonen (Elektron-Loch-Paare) bzw. von Mehr-Excitonenkomplexen scheint eine erhebliche Rolle beim Laserprozeß in Quantenstrukturen aus breitlückigen, zu Mischungsfluktuationen neigenden Materialien wie z. B. (In,Ga)N/GaN zu spielen. Sie ist eine Interpretation für die großen experimentell ermittelten Linienbreiten in den Emissionsspektren von (In,Ga)N/GaN Quantum Wells (QWs), die mit ca. 100–300meV weit über der thermischen Linienbreite (25meV) liegen.
Quantenstrukturen in Materialien mit Phasensegregation einzelner Komponenten lassen sich als Ensemble von Quanten-Boxen (siehe Abb. 1) simulieren, die in QWs eingebettet sind [1, 2].

Die Vorhersage der Emissionsspektren erfordert die Berechnung der Energien $E(X)$, $E(XX)$, ... von Excitonen- und Mehr-Excitonenkomplexen für eine Vielzahl möglicher Quanten-Boxen mit unterschiedlichen Radien, QW-Dicken und Potentialtiefen, was wir mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie in LDA durch numerische Lösung eines räumlich zweidimensionalen Kohn-Sham-Systems mit `Tosca98`® getan haben [3]. Exemplarisch wurde das ternäre Materialsystem (In,Ga)N/GaN untersucht, welches besondere Bedeutung für die Funktion von blauen Halbleiterlasern hat.

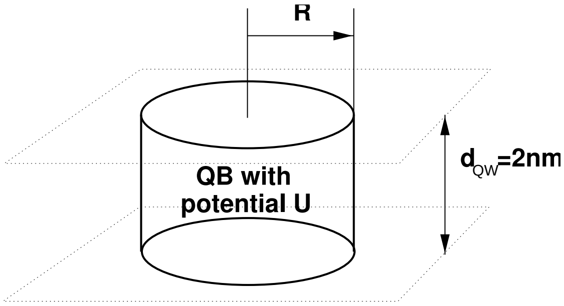


Abb. 1: Quanten-Box, eingebettet in einen Quanten-Well. Parameter sind Radius R, Welldicke d_{QW} und Potentialverlauf U.

Das zu lösende Kohn-Sham-System ist ein Schrödinger-Poisson-System mit selbstkonsistentem effektivem Austausch-Korrelationspotential für Elektronen und Löcher [4]. Aus den resultierenden Gesamtenergien folgen die *Lokalisierungsenergien* (in Abb. 3 für verschiedene Box- und Well-Parameter) und schließlich die *Bindungsenergien*, die für Biexcitonen exemplarisch in Abb. 4 dargestellt sind.

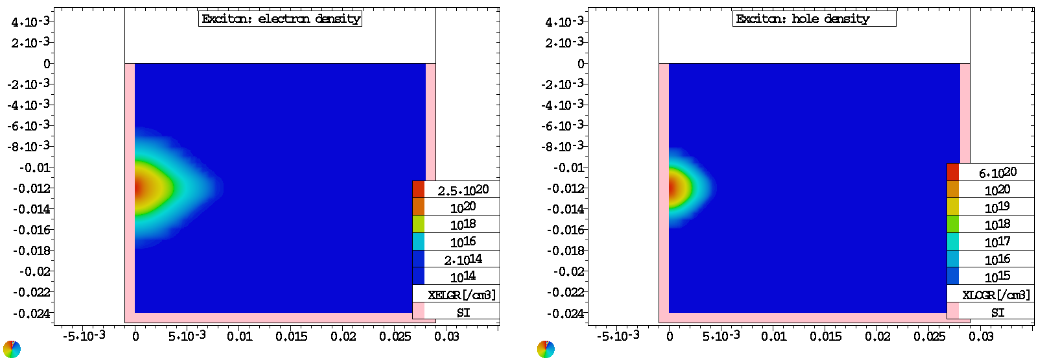


Abb. 2: Dichteverlauf für Elektronen (l.) und Löcher (r.) in der ρ, z Ebene. R=0.6nm und Potentialtiefe U=1eV in der Box. Die Löcher lokalisieren wegen der größeren Masse stärker.

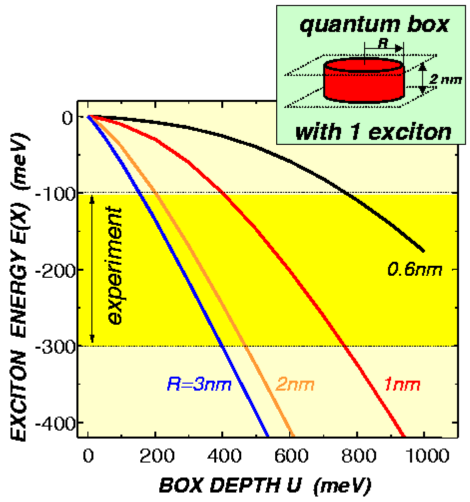
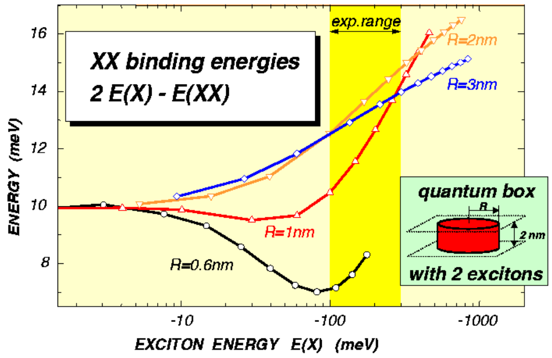


Abb. 3: Lokalisierungsenergie von Excitonen. Bemerkenswert ist die monotone Abhängigkeit der Lokalisierungsenergie von den Box-Parametern. Der experimentell gemessene Bereich (gelb) wurde mit plausiblen Modellparametern erfaßt [1].

Abb. 4: Bindungsenergie von Biexcitonen. Auffällig ist die Nichtmonotonie bei kleinen Radien, die die stärkere Lokalisation der Löcher (siehe Abb. 1) und die damit verbundene Coulomb-Abstoßung widerspiegelt [1].



Neben der guten Übereinstimmung der Modellrechnungen mit Meßdaten ergab sich eine stabile Lokalisation von Mehr-Excitonenkomplexen (3, 4 ...) bei relevanten Box-Parametern. Genauere Untersuchungen zu diesen interessanten Fällen erfordern verbesserte Bandstrukturmodelle, die mit Hilfe der *kplib* (siehe S. 146) implementiert werden sollen.

Literatur

1. H.-J. Wünsche, F. Henneberger, O. Brandt, U. Bandelow, H.-Chr. Kaiser, *Gain calculations for localized excitons and biexcitons: (In,Ga)N versus (Zn,Cd)Se quantum wells*, in: Conference Digest of the 16th International Semiconductor Laser Conference (ISLC'98), 4-8 October, 1998, Nara, Japan, pp. 191–192.

2. O. Mayrock, H.-J. Wünsche, F. Henneberger, O. Brandt, U. Bandelow, H.-Chr. Kaiser, *Calculation of localized multi-particle states in (Zn,Cd)Se and (In,Ga)N quantum wells*, in: Conference Proceedings of the International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS 24) 2–7 August, 1998, Jerusalem, Israel, in Vorbereitung.

3. U. Bandelow, H.-Chr. Kaiser, H.-J. Wünsche, *Energy calculations for localized multiparticle states in quantum wells*, in: Report of the Workshop Scientific Computing in Electrical Engineering (P. Deuflhard, H. Gajewski, G. Hebermehl, W. Heinrich, A. Koste, U. Langer, T. Weiland, Hrsg), WIAS-Report No. **16**, 1998, Berlin, pp. 28–29.

4. H.-Chr. Kaiser, J. Rehberg, *About a stationary Schrödinger-Poisson system with Kohn-Sham potential in a bounded two- or three-dimensional domain*, erscheint in: Nonlinear Anal.

Theoretische Untersuchungen zum Stabilitätsverhalten von Verdichtern

Bearbeiter: J. Förste, W. Höppner, O. Schmidtmann

Kooperation: J. Anders (BMW Rolls-Royce GmbH, Dahlewitz)

Förderung: BMBF, BMW Rolls-Royce GmbH, Dahlewitz

Verdichter als Teile von Flugtriebwerken haben die Aufgabe, mittels eines Rotors kinetische Energie auf das Gas zu übertragen, was durch die Wirkung des Stators eine Erhöhung der Enthalpie und des Drucks zur Folge hat. Ein zentrales Problem bei der Entwicklung von Verdichtern ist es, das Auftreten von Strömungsinstabilitäten zu modellieren und vorherzusagen, da sie zu einer Verringerung des Wirkungsgrades oder zur Zerstörung des Verdichters führen können. Gegenstand des Projektes sind numerische Untersuchungen solcher Instabilitäten in Verdichtern. Es wurde ein Modell entwickelt, in dem die Strömung im unbeschaufelten Gebiet durch die 2D-Euler-Gleichungen der Gasdynamik simuliert wird. Zur Kopplung der verschiedenen Teile des Verdichters, die durch den Einfluß von Rotor und Stator charakterisiert ist, wurden Übergangsbedingungen mit Hilfe von Erhaltungsgleichungen und Quelltermen aus Verdichterkennlinien formuliert. Diese Übergangsbedingungen berücksichtigen die Effekte der Viskosität. Am Eintritt und Austritt des Verdichters sind nichtreflektierende Randbedingungen benutzt worden (Giles [1]), um nichtphysikalische Reflektionen am Rand zu vermeiden. Das in diesem Projekt entwickelte Modell ist in der Lage, verschiedene Strömungszustände durch Veränderung eines einzigen Parameters, nämlich des Austrittsdrucks, zu erzeugen.
Für die numerische Berechnung der Strömung in den unbeschaufelten Gebieten des Modells wurde ein Godunov-Verfahren mit einem Roe-Solver von LeVeque [2] benutzt. Die Strömung ist in einem zweistufigen Verdichter untersucht worden. Das Rechengebiet besteht aus fünf unbeschaufelten Gebieten, am Eintritt und hinter jedem Rotor bzw. Stator (siehe Abb. 1).

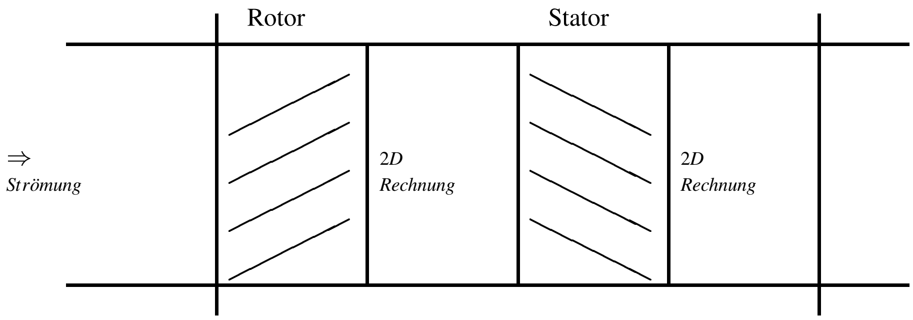


Abb. 1: Schematische Darstellung einer Verdichterstufe

Das Lösungsverhalten des Modells ist durch die Werte für Dichte, Geschwindigkeit und Druck am Eintritt und Austritt des Verdichters, über die die Euler-Gleichungen zur Formulierung nichtreflektierender Randbedingungen linearisiert wurden, bestimmt. Für einen gegebenen Massenstrom sind die Werte dieser Variablen durch die Verdichtercharakteristik gegeben. Ausgehend von diesen Werten für einen bestimmten Massenstrom wurde das Lösungsverhalten des Modells durch Erhöhung des Drucks $\hat{p}_r$ am Austritt gesteuert. Mit wachsendem Austrittsdruck verliert eine anfangs stabile stationäre Lösung ihre Stabilität in einer Hopfbifurkation an verschiedene koexistierende, zeitlich periodische Lösungen mit unterschiedlich vielen rotierenden Ablösezellen (rotierende Ablösung), gefolgt von Lösungen mit einer zeitlichen Änderung des Drucks in den Ablösezellen (rotierende Instabilität). Während für diese zeitlich periodischen Zustände der Massenstrom zeitunabhängig ist, wird der Massenstrom zeitabhängig (Pumpen), falls der Austrittsdruck hinreichend groß ist. Ein Überblick über die verschiedenen Lösungszweige ist schematisch in Abb. 2 dargestellt.

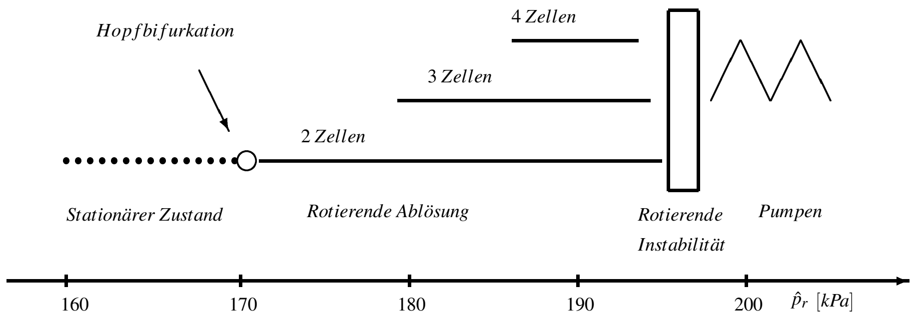


Abb. 2: Schematisches Bifurkationsdiagramm

Für $\hat{p}_r = 167400$ Pa existiert eine stabile stationäre Lösung, d. h. alle Trajektorien werden von dieser Lösung angezogen. Der Zustand des Systems konvergiert gegen eine Lösung, die in jedem einzelnen Rechengebiet zeitlich und räumlich konstant ist. Falls der Austrittsdruck einen kritischen Wert, $\hat{p}_r \approx 170000$ Pa, übersteigt, entsteht eine periodische Lösung mit zwei rotierenden Ablösezellen in jedem einzelnen Rechengebiet des Modells. In Abb. 3 ist der Druck in den fünf unbeschaufelten Gebieten des Verdichters zu einem Zeitpunkt für $\hat{p}_r = 172160$ Pa gegeben. In jedem einzelnen Gebiet entstehen zwei Ablösezellen, die sich in Umfangsrichtung bewegen. In Abb. 4 ist die Instabilität der stationären Lösung demonstriert. Der Druck über dem Umfang am Austritt des Verdichters ist als Funktion der Zeit gegeben. Der Zustand des Systems verläßt den ursprünglich stationären Zustand und konvergiert gegen die neue Lösung mit zwei Ablösezellen.

Bei einer Erhöhung des Austrittsdrucks entstehen neue Lösungszweige mit drei und vier Ablösezellen. Der Zweig mit zwei Zellen bleibt stabil. Damit koexistieren drei stabile periodische Lösungen. Die Drehrichtung der Zellen entspricht der Drehrichtung des Rotors, und die Rotationsfrequenz der Zellen beträgt ca. 150 Hz.

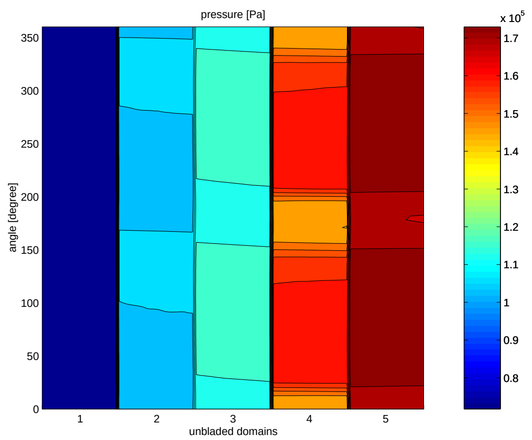


Abb. 3: Druck im Verdichter für eine periodische Lösung mit 2 rotierenden Ablösezellen in jedem unbeschaufelten Gebiet, die sich in Umfangsrichtung bewegen, $\hat{p}_r = 172160$ Pa

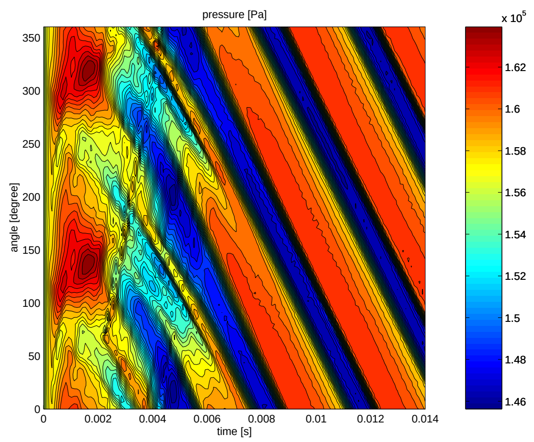


Abb. 4: Druck am Verdichteraustritt als Funktion der Zeit, $\hat{p}_r = 172160$ Pa

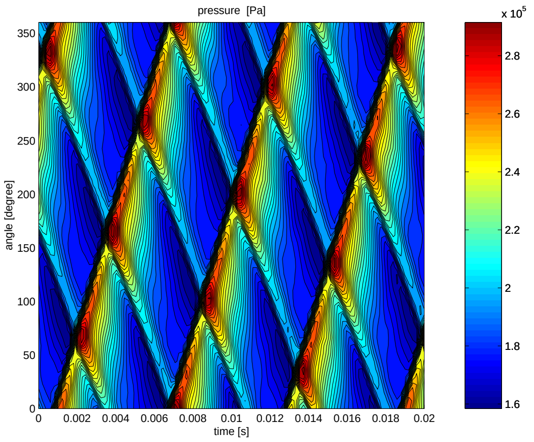


Abb. 5: Druck am Verdichteraustritt als Funktion der Zeit, $\hat{p}_r = 199740$ Pa

Für $\hat{p}_r \approx 199740$ Pa verschwinden die periodischen Lösungen mit Ablösezellen, und es entsteht eine neue Lösung mit zwei Zellen, deren Druck sich jetzt zeitlich ändert (siehe Abb. 5). Der Massenstrom bleibt zeitunabhängig. Diese rotierende Instabilität wurde bereits von Kameier [3] sowie von Mailach et al. [4] experimentell beobachtet. Wenn der Austrittsdruck weiter erhöht wird, $\hat{p}_r \geq 205110$ Pa, werden alle Lösungszweige mit Ablösezellen instabil, und es entsteht eine Lösung mit einer zeitlichen Änderung des Massenstroms. In Abb. 6 und Abb. 7 ist der über den Umfang gemittelte Druck und der Massenstrom am Austritt des Verdichters als Funktion der Zeit gegeben. Der Anstieg des Drucks ist mit einem Abfall des Massenstroms gekoppelt, der Massenstrom wird negativ, gefolgt von einer Periode regulären Verhaltens bis der nächste Pumpstoß beginnt. Die Pumpfrequenz beträgt etwa 5 Hz, was mit gemessenen Werten übereinstimmt.

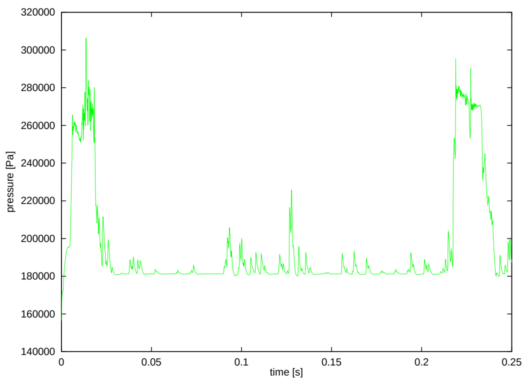


Abb. 6: Umfangsgemittelter Druck am Verdichteraustritt als Funktion der Zeit, $\hat{p}_r = 205110$ Pa

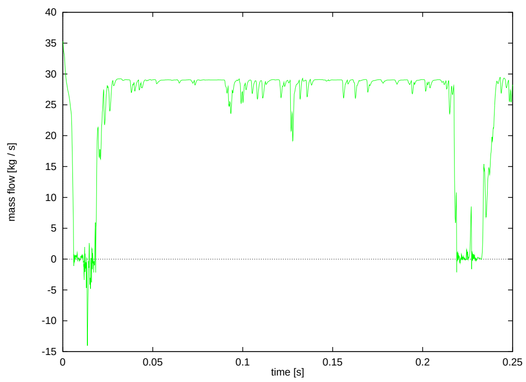


Abb. 7: Massenstrom als Verdichteraustritt als Funktion der Zeit, $\hat{p}_r = 205110$ Pa

Dieser Übergang zum Pumpen ähnelt einem Schema, das bereits von Day [5] gefunden wurde, d. h. das Pumpen erscheint nach einem Strömungszustand mit rotierender Ablösung. Außerdem ist der Weg zum Pumpen ähnlich dem Übergang zu irregulärem Verhalten, das aus vielen Beispielen in der Hydrodynamik bekannt ist. Ein anfangs stabiler stationärer Zustand verliert seine Stabilität an eine periodische Lösung, gefolgt von einer quasiperiodischen Lösung mit zwei beteiligten Frequenzen und schließlich irregulärem turbulentem Verhalten.

Literatur

1. M. GILES, *Nonreflecting Boundary Conditions for Euler Equation Calculations*, AIAA Journal, **28** (1990), No. 12, pp. 2050–2057.

2. R. J. LEVEQUE, *Wave propagation algorithms for multi-dimensional hyperbolic systems*, J. Comput. Phys., **131** (1997), pp. 327–353.

3. F. KAMEIER, *Experimentelle Untersuchung zur Entstehung und Minderung des Blattspitzen-Wirbellärms axialer Strömungsmaschinen*, Fortschritt-Berichte VDI, Reihe 7, **243** (1994).

4. R. MAILACH, T. BREUER, F. HOLSTE, F. KAMEIER, *Untersuchung von Verdichterinstabilitäten am Niedergeschwindigkeitsverdichter Dresden*, 6. Statusseminar, AG-TURBO, Köln, 1998.

5. I. J. DAY, *Stall Inception in Axial Flow Compressors*, ASME Journal of Turbomachinery, **115** (1993), No. 1, pp. 1–9.

Numerische Simulation des Strom- und Wärmetransportes bei hoher Trägerinjektion und hohen Temperaturen

Bearbeiter: H. Gajewski, H. Stephan, G. Albinus

Kooperation: G. Wachutka (Lehrstuhl für Technische Elektrophysik der Technischen Universität München)

Förderung: DFG-Schwerpunktprogramm „Halbleiterbauelemente hoher Leistung“ [1]

Ziel dieses Projektes ist die numerische Implementierung, Validierung und Kalibrierung eines erweiterten, physikalisch basierten Transportmodells für den Strom- und Wärmefluß in Halbleiterhochleistungsbauelementen unter Hochinjektions- und Hochtemperaturbedingungen. Ausgehend von einem auf den Prinzipien der irreversiblen Thermodynamik beruhenden elektrothermischen Transportmodell für die physikalisch konsistente Beschreibung des gekoppelten Ladungsträger- und Wärmetransports sowie der Selbstaufheizung des Halbleiterbauelements sollen geeignete numerische Algorithmen im Bauelementesimulator `Tosca98`® implementiert und an realen Bauelementen getestet werden.
In das bisher behandelte Drift-Diffusionsmodell (1) – (3) (die Nummern beziehen sich auf das unten angeführte Gleichungssystem) geht die Temperatur lediglich als Parameter ($T =$ const.) ein, die Elektronen-Loch-Streuung wird vernachlässigt ($\sigma_{np} = 0$ in (5) – (6)), die Dynamik tiefer Störstellen wird nicht betrachtet ($S = 0$ in (1)). Bei Leistungsbauelementen müssen Hochinjektions-, Hochfeldeffekte, innere Temperaturgradienten und die Dynamik tiefer Störstellen berücksichtigt werden. Das ist im unten angeführten Gleichungssystem der Fall durch:

- Bestimmung des **Gittertemperaturfeldes** durch eine zusätzliche Gleichung (4). Sie ist mit den anderen Gleichungen nichtlinear über die Temperaturspannung (7) und (8), temperaturabhängige Materialparameter und stromabhängige Wärmequellen (H in (4)) gekoppelt [4, 5].

- Berücksichtigung der **Elektronen-Loch-Streuung** bei hoher Injektion durch $\sigma_{np} \neq 0$ in den Ladungsträgerstromansätzen (5) und (6) [3].

- Berücksichtigung der **Dynamik tiefer Störstellen** durch das zusätzliche System gewöhnlicher Differentialgleichungen (13), das mit den anderen Gleichungen nichtlinear durch die Definitionen (9) – (11) über S, R_n und R_p in (1) – (3) gekoppelt ist [4].

Zur Simulation dieser Effekte wird das folgende Gleichungssystem betrachtet:

Grundgleichungen
Poissongleichung:

$$-\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \psi) \quad = \quad q\,(C + S + n - p); \tag{1}$$

Kontinuitätsgleichungen:

$$\frac{\partial n}{\partial t} \quad = \quad \frac{1}{q} \nabla \cdot J_n + G_n(T, J_n, J_p, \nabla \psi) + R_n(n, p, T), \tag{2}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} \quad = \quad -\frac{1}{q} \nabla \cdot J_p + G_p(T, J_n, J_p, \nabla \psi) - R_p(n.p, T); \tag{3}$$

Wärmeleitungsgleichung:

$$\frac{\partial(cT)}{\partial t} = \nabla\cdot(\kappa\nabla T) + H(J_n, J_p, \nabla\psi, \nabla T). \tag{4}$$

Hierbei sind
ψ – elektrostatisches Potential,
ε – Dielektrizitätskonstante,
$n,\ p$ – Elektronen-/Löcherdichten,
$C,\ S$ – Dotierung/Störstellen,
$G_{n,p},\ R_{n,p}$ – Generations/Rekombinationsraten,
H – Wärmequellen,
$\kappa,\ c$ – Wärmeleitfähigkeit/-kapazität.

Ladungsträgerströme:

$$J_n = -\sigma_n\nabla\varphi_n - \sigma_{np}\nabla\varphi_p - \sigma_n P_n\nabla T, \tag{5}$$
$$J_p = -\sigma_p\nabla\varphi_p - \sigma_{pn}\nabla\varphi_n - \sigma_p P_p\nabla T; \tag{6}$$

$\varphi_n,\ \varphi_p$ – Quasi-Fermi-Niveaus,
$\sigma_n,\ \sigma_p,\ \sigma_{np} = \sigma_{pn}$ – elektrische Leitfähigkeiten,
$P_{n,p}$ – elektrothermische Kräfte.
Zustandsgleichungen:

$$n = N_c\mathcal{F}((q(\psi - \varphi_n) - E_c)/kT), \tag{7}$$
$$p = N_v\mathcal{F}((q(\varphi_p - \psi) - E_v)/kT); \tag{8}$$

$\mathcal{F}(s)$ – Verteilungsfunktion (Boltzmann- oder Fermistatistik),
$N_{c,v}(T)$ – Zustandsdichten,
$E_{c,v}(T)$ – Energiebandkanten.

Störstellenmodell (Volumen/Materialgrenzen)

$$S = \sum_j (\delta N_t f)_j\ , \tag{9}$$
$$R_n = \sum_j (N_t[R_{\mathrm{SRH}} - \delta(s_n n + e_n)(f - f_e)])_j\ , \tag{10}$$
$$R_p = \sum_j (N_t[R_{\mathrm{SRH}} - \delta(s_p p + e_p)(f - f_e)])_j\ , \tag{11}$$
$$R_{\mathrm{SRH}} = s_n s_p(n_i^2 - np)/z; \tag{12}$$

Evolution der Verteilungsfunktionen $f = f_j$:

$$\frac{df_j}{dt} + zf_j = zf_{je}\ , \tag{13}$$
$$f_{je} = \frac{1}{2}[1 - \delta(s_n n - e_n - s_p p + e_p)/z]_j, \tag{14}$$
$$z_j = [s_n n + e_n + s_p p + e_p]_j; \tag{15}$$

N_t – Zustandsdichten,
$\delta = +1$ donator-, $\delta = -1$ akzeptorartig,
$s_{n,p}$ – Einfangkoeffizienten,
$e_n = n_i s_n e^{(E_t - E_i)/kT}$, $n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-(E_c - E_v)/(2kT)}$,
$e_p = n_i s_p e^{(E_i - E_t)/kT}$ – Emissionsraten,
E_t – Aktivierungsenergien,
$E_i = (kT \log \frac{N_v}{N_c} + E_c + E_v)$.
In diesem ersten Jahr der Bearbeitung des Projektes wurden numerische Algorithmen zur Lösung folgender Probleme implementiert:

- Drift-Diffusionsmodell unter Berücksichtigung der Fermipotentiale beider Ladungsträger als Triebkraft für den Elektronen- bzw. Löcherstrom.

- Berücksichtigung eines Temperaturfeldes durch eine zusätzliche Gleichung (Wärmeleitungsgleichung) und selbstkonsistente, nichtlineare Kopplung der Gleichungen über die Temperaturspannung, temperaturabhängige Materialparameter und stromabhängige Wärmequellen.

Literatur

1. H. GAJEWSKI, G. WACHUTKA, *DFG-Antrag zum Projekt „Physikalische Modellierung und numerische Simulation von Strom- und Wärmetransport bei hoher Trägerinjektion und hohen Temperaturen“*, 1996.

2. H. GAJEWSKI, *Analysis und Numerik des Ladungsträgertransports in Halbleitern*, GAMM-Mitteilungen, **16** (1993), pp. 35–57.

3. D. REZNIK, *Generalized Drift-Diffusion Model of Bipolar Transport in Semiconductors*, SISDEP, 1995.

4. A. SCHENK, *Advanced Physical Models for Silicon Device Simulation*, Springer Verlag, 1998.

5. G. WACHUTKA, *Rigorous thermodynamic treatment of heat generation and conduction in semiconductor device modeling*, IEEE Trans. on CAD, CAD-9 (1990), pp. 1141–1149.

Lineare elliptische Randwertprobleme mit nichtglatten Daten: Normale Lösbarkeit in Sobolev-Campanato-Räumen

Bearbeiter: J. A. Griepentrog

Kooperation: L. Recke (Humboldt-Universität zu Berlin)

Gegenstand unserer Untersuchungen sind schwache Lösungen zu Randwertproblemen für lineare elliptische Gleichungen zweiter Ordnung der Gestalt

$$\left.\begin{array}{rcll} -\nabla\cdot(A\nabla u+bu)+c\cdot\nabla u+du &=& -\nabla\cdot f+g & \text{in } \Omega, \\ (A\nabla u+bu)\cdot\nu+eu &=& f\cdot\nu+h & \text{auf } \Gamma, \\ u &=& 0 & \text{auf } \partial\Omega\setminus\Gamma, \end{array}\right\} \tag{1}$$

wobei der Nichtglattheit der Daten des Problems eine besondere Bedeutung zukommt.

In (1) sind $\Omega\subset\mathbb{R}^N$ ein beschränktes Gebiet und $\Gamma\subset\partial\Omega$ ein offenes Randstück, so daß $G=\Omega\cup\Gamma$ eine reguläre Menge im Sinne von Gröger [3] darstellt. Auf den Randstücken Γ und $\partial\Omega\setminus\Gamma$ werden gemäß (1) inhomogene, gemischte Randbedingungen gestellt. Wir betrachten auf Ω bzw. Γ definierte, beschränkte und meßbare Koeffizienten A,b,c,d und e, wobei A Werte in den positiv definiten $N\times N$-Matrizen annimmt, b und c vektorwertige Größen in $\mathbb{R}^N$ sowie d und e skalare Größen sind.

Als Hauptresultat konnte aufbauend auf Recke [4] und Troianiello [6], in Griepentrog, Recke [2] die Existenz einer Konstanten $N-2<\overline{\omega}<N$ gezeigt werden, so daß für alle Parameter $0\le\omega<\overline{\omega}$ der zur schwachen Formulierung des Problems (1) zugehörige Operator ein Fredholm-Operator vom Index Null vom Sobolev-Campanato-Raum $W_\circ^{1,2,\omega}(G)$ nach $W^{-1,2,\omega}(G)$ ist, wobei die Konstante $\overline{\omega}$ lediglich von der Elliptizitätskonstante und von der Menge $G=\Omega\cup\Gamma$ abhängt. Darüber hinaus liegt eine lineare und stetige Abhängigkeit (im Sinne der Operatornorm) des Fredholm-Operators von den Koeffizienten A,b,c,d und e vor. Verwendet wurden hierbei die Bezeichnungen

$$W^{1,2,\omega}(\Omega)=\{u\in W^{1,2}(\Omega):\nabla u\in\mathfrak{L}^{2,\omega}(\Omega)\}$$

sowie

$$W_\circ^{1,2,\omega}(G)=W^{1,2,\omega}(\Omega)\cap W_\circ^{1,2}(G)$$

und $W^{-1,2,\omega}(G)$ für das Bild von $W_\circ^{1,2,\omega}(G)$ unter der Dualitätsabbildung des Raumes $W_\circ^{1,2}(G)$.

Aufgrund der Fredholm-Eigenschaft ergibt sich insbesondere, daß die schwache Lösung zu Problem (1) – falls sie eindeutig bestimmt ist – im Sinne des Sobolev-Campanato-Raumes $W^{1,2,\omega}(\Omega)$ sowohl glatt von den zu folgenden Campanato-Räumen gehörenden rechten Seiten

$$f\in\mathfrak{L}^{2,\omega}(\Omega;\mathbb{R}^N)\ ,\ g\in\mathfrak{L}^{2,\omega-2}(\Omega)\quad\text{und}\quad h\in\mathfrak{L}^{2,\omega-1}(\Gamma), \tag{2}$$

als auch glatt von den Koeffizienten A,b,c,d und e im Sinne der jeweiligen L^∞-Norm abhängt.

Man beachte, daß im Falle $N-2<\omega<N$ der Sobolev-Campanato-Raum $W^{1,2,\omega}(\Omega)$ für $\alpha=(\omega-N+2)/2$ stetig in den Hölder-Raum $C^{0,\alpha}(\overline{\Omega})$ eingebettet ist.

Es handelt sich im Falle $N > 2$ selbst für $\Gamma = \emptyset$ (reine Dirichlet-Randbedingungen) oder $\Gamma = \partial\Omega$ (rein natürliche Randbedingungen) um neue Ergebnisse. Die obigen Resultate ermöglichen in dieser Raumkonstellation interessante Anwendungen des Satzes über Implizite Funktionen auf quasilineare elliptische Randwertprobleme mit nichtglatten Daten (siehe Griepentrog [1] und Recke [5]). Im Falle $N = 2$ folgt die glatte Abhängigkeit (im Sinne der Hölder-Norm) der schwachen Lösungen zu Problem (1) von den Koeffizienten

$$f \in L^p(\Omega;\mathbb{R}^N)\ ,\ g \in L^{p/2}(\Omega) \quad \text{und} \quad h \in L^{p-1}(\Gamma) \quad \text{mit} \quad p > N$$

aus den Resultaten von Gröger [3].

Abschließend sei noch bemerkt, daß sich die obigen Ergebnisse auch auf den Fall eines linearen elliptischen Systems, dessen Hauptteil einer Dreiecksgestalt nahekommt, verallgemeinern lassen (siehe Griepentrog, Recke [2]).

Literatur

1. J. A. GRIEPENTROG, *An application of the Implicit Function Theorem to an energy model of the semiconductor theory*, Z. Angew. Math. Mech., **79** (1999), pp. 43–51.

2. J. A. GRIEPENTROG, L. RECKE, *Linear elliptic boundary value problems with non-smooth data: Normal solvability on Sobolev-Campanato spaces*, WIAS-Preprint No. 446, 1998.

3. K. GRÖGER, *A $W^{1,p}$-estimate for solutions to mixed boundary problems for second order elliptic differential equations*, Math. Ann., **283** (1989), pp. 679–687.

4. L. RECKE, *Solvability properties of linear elliptic boundary value problems with nonsmooth data*, Preprint Nr. 94–3, Fachbereich Mathematik, Humboldt-Universität zu Berlin, 1994.

5. ——, *Applications of the Implicit Function Theorem to quasi-linear elliptic boundary value problems with non-smooth data*, Comm. Partial Differential Equations, **20** (1995), pp. 1457–1479.

6. G. M. TROIANIELLO, *Elliptic Differential Equations and Obstacle Problems*, Plenum Press, New York, London, 1987.

Rekonstruktion aus zeitaufgelösten Messungen in der optischen Tomographie

Bearbeiter: R. Hünlich

Kooperation: R. Model, M. Orlt, M. Walzel (Physikalisch-Technische Bundesanstalt Berlin-Charlottenburg)

Ziel der Untersuchungen in [4] war es, die im Rahmen eines inzwischen abgeschlossenen BMBF-Projekts [2] entwickelten Verfahren zur Bildrekonstruktion in der optischen Tomographie, die auf zeitaufgelösten Messungen beruhen (siehe auch [3]), an dem Standarddatensatz der Universität von Pennsylvania [1] zu testen.

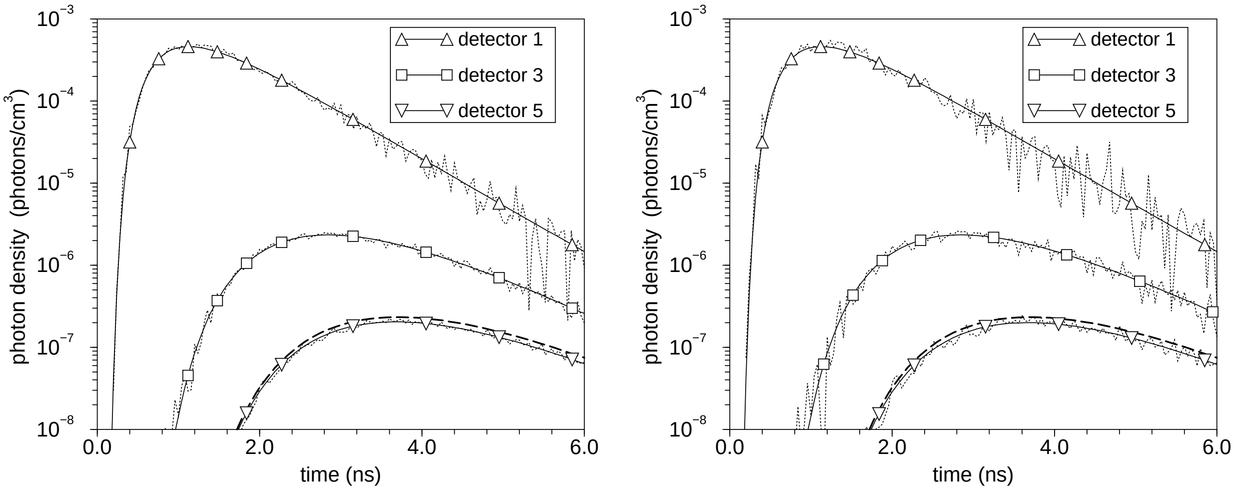


Abb. 1: Rekonstruktionsergebnisse für den zehnfachen Absorber ($\mu_a^{abs} = 10.0\,\mu_{a0}$). Die Bilder zeigen einen Vergleich zwischen den Photonendichten des verrauschten Standarddatensatzes (links 5%, rechts 10% Rauschen) und den simulierten Photonendichten nach Rekonstruktion des Absorbers. Zur Rekonstruktion wurde eine Meßanordnung wie in [5, Abb. 2] benutzt. Zum Vergleich sind auch die Photonendichten für das homogene Medium ($\mu_{a0} = 0.05\,\mathrm{cm}^{-1}$) gezeichnet (gestrichelt), wobei deutlichere Abweichungen nur für Detektor 5 zu erkennen sind.

Meßanordnung, Datensatz, das entwickelte Rekonstruktionsverfahren (least-squares Methode unter Benutzung einer 2D-FEM-Vorwärtsrechnung mit anschließender 3D-Korrektur) sowie erste Ergebnisse wurden in [5] beschrieben. Darauf aufbauend wurde nun der Einfluß eines auf die Daten aufgeprägten Rauschens untersucht. Es zeigte sich, daß vor allem bei stärkerem Rauschen der volle Datensatz (12 Lichtquellen mit jeweils 10 Detektoren) herangezogen werden mußte, um erfolgreich rekonstruieren zu können. In Abb. 2 wird dargestellt, wie die Güte der Rekonstruktion (es sollte $d \leq 5\,\mathrm{mm}$ sein) von der Rauschstärke und dem Absorptionskoeffizienten μ_a^{abs} der Inhomogenität abhängt. Bei stärkerem Rauschen führt eine Datenfilterung zu einer erheblichen Verbesserung der Ergebnisse, vor allem bei Verwendung eines reduzierten Datensatzes mit weniger Lichtquellen und Detektoren.

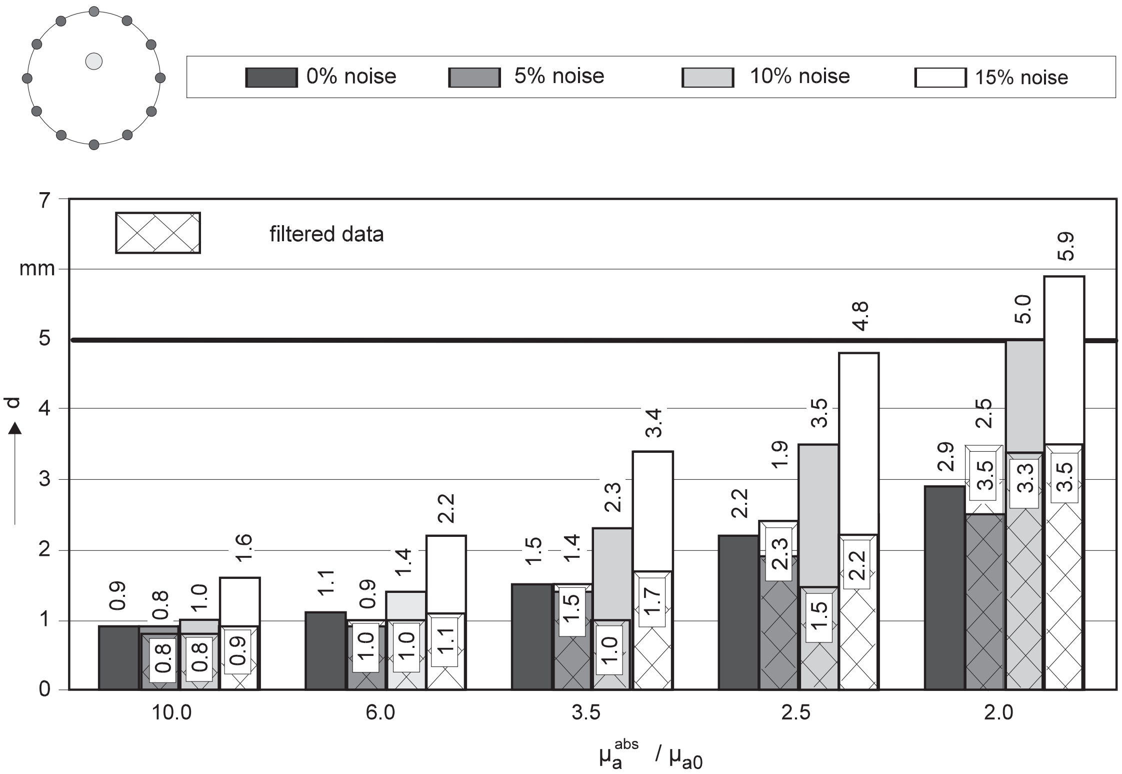


Abb. 2: Rekonstruktionsergebnisse bei verrauschten Daten. Dargestellt ist der Abstand d zwischen den Mittelpunkten des identifizierten und vorgegebenen Absorbers (mit 5 mm Radius) in Abhängigkeit vom Absorptionskoeffizienten und der Stärke des Rauschens.

Literatur

1. D. Boas, *Time-domain standard data series*, University of Pennsylvania, URL http://www.lrsm.upenn.edu.

2. R. Model, M. Orlt, M. Walzel, R. Hünlich, *Mathematische Behandlung der Streulichttomographie von dicken Gewebeschichten und Phantomen*, Lasermedizinforschung, Projekte im Schwerpunkt „Lasermedizin“, BMBF-Förderkonzept LASER 2000, VDI Technologiezentrum Physikalische Technologien, Düsseldorf, 1997, pp. 130–132.

3. ——, *Reconstruction algorithm for near-infrared imaging in turbid media by means of time-domain data*, Optical tomography. Fundamentals and applications in medicine (O. Minet, G. Müller, J. Beuthan, Hrsg.), SPIE Milestone Series, vol. MS 147, SPIE Optical Engineering Press, Bellingham, 1998, pp. 537–548.

4. ——, *Optical imaging: Three dimensional approximation and perturbation approaches for time-domain data*, Applied Optics, **37** (1998), pp. 7968–7976.

5. Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik, *Jahresforschungsbericht 1996*, pp. 30–31.

Zur Asymptotik von Paardiffusionsmodellen

Bearbeiter: R. Hünlich, A. Glitzky, W. Röpke

Kooperation: N. Strecker (Eidgenössische Technische Hochschule Zürich), W. Merz, K. Pulverer (Technische Universität München)

Förderung: DFG: „Analytische Untersuchungen von Elektro-Reaktions-Diffusionsgleichungen mit nichtglatten Daten“, BMBF

Die bei der Simulation von Halbleitertechnologien vorrangig benutzten Diffusionsmodelle reichen bei modernen Bauelementen nicht mehr aus, um alle Transportphänomene adäquat zu beschreiben. Von Bedeutung sind Untersuchungen zu neuartigen Materialien (siehe z. B. [10]) sowie die Diskussion verschiedener Varianten von Paardiffusionsmodellen (siehe [1, 6, 11]), die die Kinetik von Eigenpunktdefekten und von Fremdatom-Defekt-Paaren in verschiedenen Ladungszuständen genauer modellieren sollen. Gleichungen zu Paardiffusionsmodellen reduzieren sich unter der Annahme, daß alle Ionisierungsreaktionen sowie die Kinetik der Elektronen und Löcher sehr schnell sind, auf einen aus Sicht der Simulation erträglichen Umfang. Erste Aussagen zur Analysis und Numerik dieser Modellklasse findet man in [8, 9]. In [5, 7] haben wir weiterführende Ergebnisse erzielt, die im folgenden zusammengestellt werden sollen.

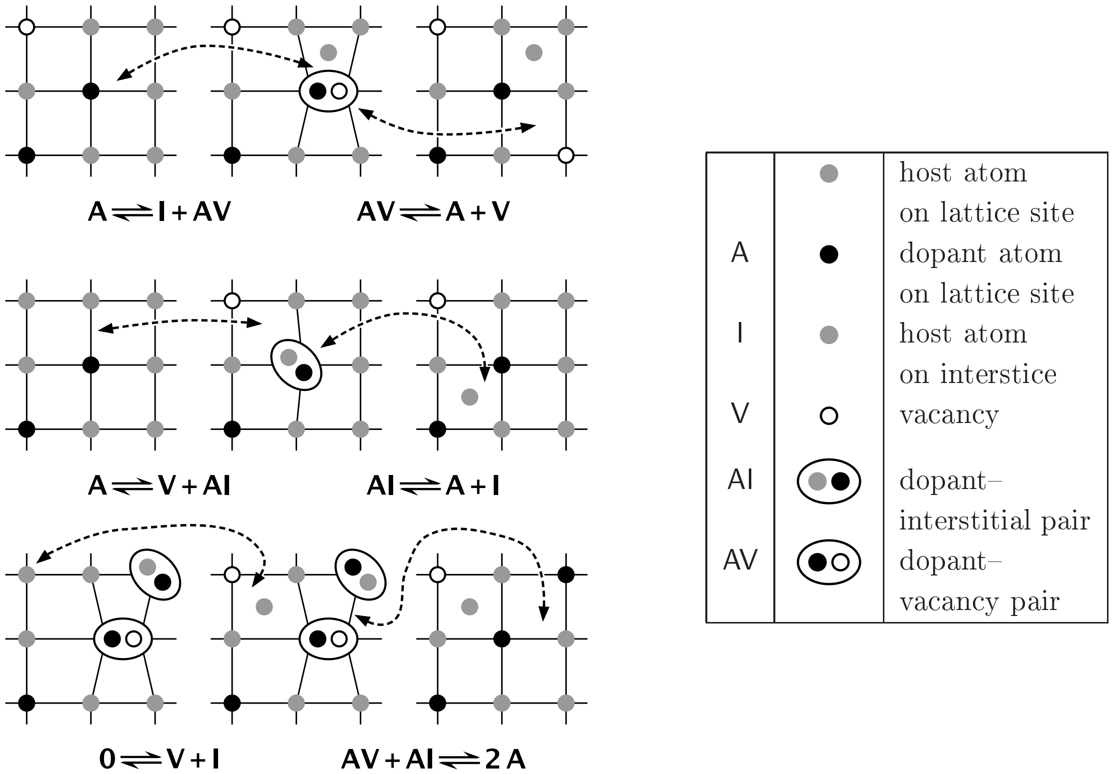


Abb. 1: Reaktionen im Paardiffusionsmodell

Die Modellgleichungen bestehen aus allgemein m (*im Fall, daß nur ein Dotand A vorliegt, fünf*) Kontinuitätsgleichungen für die Konzentrationen u_i der Spezies i (*nämlich* A, I, V, AI, AV;

siehe Abb. 1), die mit einer nichtlinearen Poissongleichung zur Bestimmung des chemischen Potentials der Elektronen ψ gekoppelt sind:

$$\left.\begin{array}{c} \dfrac{\partial u_i}{\partial t} + \nabla \cdot j_i + R_i = 0 \text{ auf } \mathbb{R}_+ \times \Omega, \\ \nu \cdot j_i = 0 \text{ auf } \mathbb{R}_+ \times \Gamma, \\ u_i(0) = U_i \text{ auf } \Omega, \quad i = 1, \ldots, m, \\ -\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \psi) + e(\psi) - \displaystyle\sum_{i=1}^{m} Q_i(\psi) u_i = 0 \text{ auf } \mathbb{R}_+ \times \Omega, \\ \nu \cdot (\varepsilon \nabla \psi) = 0 \text{ auf } \mathbb{R}_+ \times \Gamma. \end{array}\right\} \tag{1}$$

Die Stromdichten j_i sind durch

$$j_i = -D_i(\psi)\big(\nabla u_i + Q_i(\psi) u_i \nabla \psi\big) = -D_i(\psi)\, u_i \nabla \ln a_i$$

gegeben, mit R_i bezeichnen wir die Raten der einzelnen Paarbildungs- bzw. Generations-Rekombinations-Reaktionen:

$$R_i = (\alpha_i - \beta_i) \sum_{(\alpha,\beta)} R_{\alpha\beta},\ R_{\alpha\beta}(u,\psi) = k_{\alpha\beta}(\psi)\Big(\prod_{i=1}^{m} a_i^{\alpha_i} - \prod_{i=1}^{m} a_i^{\beta_i}\Big),$$

$$a_i = u_i / p_i(\psi),\ p_i(\psi) = p_i(0)\, e^{-P_i(\psi)},\ P_i(\psi) = \int_0^{\psi} Q_i(s)\, \mathrm{d}s.$$

Die Ladungszahlen Q_i und die kinetischen Koeffizienten $D_i, k_{\alpha\beta}$ hängen von ψ ab, $e(\psi)$ ist durch den Statistikansatz für die Elektronen gegeben, ferner sei $g(\psi) = e(\psi)\psi - \int_0^{\psi} e(s)\, \mathrm{d}s$.
Modelle, bei denen die Ladungszahlen Q_i (und Diffusionskoeffizienten D_i) nicht von ψ abhängen, haben wir früher behandelt (siehe [2, 3, 4]). Das Auftreten dieser zusätzlichen Abhängigkeiten macht die Aufgabe wesentlich komplizierter, hinzu kommt, daß man (im Unterschied zu [9]) für einige Spezies (*den Dotanden A*) $D_i = 0$ anzunehmen hat.
Ausgangspunkt unserer Untersuchungen sind energetische Abschätzungen (in zwei Raumdimensionen), die einerseits zeigen, daß die Modellgleichungen aus thermodynamischer Sicht korrekt formuliert sind, die andererseits die Grundlage für weitere a priori-Abschätzungen und damit verbundene Existenzaussagen bilden sollten, mit denen wir uns zukünftig befassen werden.
Es bezeichne $J \subset \{1, \ldots, m\}$ die Teilmenge der diffundierenden Spezies (*der Punktdefekte und Paare I, V, AI, AV*). Wir definieren ein Energiefunktional

$$F(u) = \int_\Omega \Big\{ \frac{\varepsilon}{2} |\nabla \psi|^2 + g(\psi) + \sum_{i=1}^{m} \Big\{ u_i(P_i(\psi) - Q_i(\psi)\psi) + u_i \Big[\ln \frac{u_i}{p_i(0)} - 1 \Big] + p_i(0) \Big\} \Big\}\, \mathrm{d}x,$$

wobei ψ Lösung der Poissongleichung ist, sowie ein Dissipationsfunktional

$$D(u) = \int_\Omega \Big\{ \sum_{i \in J} 4 D_i(\psi) p_i(\psi) |\nabla \sqrt{a_i}|^2 + \sum_{(\alpha,\beta)} 2 k_{\alpha\beta}(\psi) \Big| \prod_{i=1}^{m} \sqrt{a_i}^{\alpha_i} - \prod_{i=1}^{m} \sqrt{a_i}^{\beta_i} \Big|^2 \Big\}\, \mathrm{d}x.$$

Wir haben nachgewiesen, daß für jede schwache Lösung von (1) die Relation

$$e^{\lambda t_2} F(u(t_2)) - e^{\lambda t_1} F(u(t_1)) \le \int_{t_1}^{t_2} e^{\lambda t} \{ \lambda F(u(t)) - D(u(t)) \}\, \mathrm{d}t,\ t_2 \ge t_1 \ge 0,\ \lambda \in \mathbb{R}_+$$

gilt. Aus dieser Abschätzung folgt, daß die Energie längs Trajektorien der Aufgabe (1) beschränkt bleibt und monoton fällt. Weiterhin gibt es zu jedem $R > 0$ ein $c_R > 0$, so daß

$$F(u) - F(u^*) \leq c_R D(u) \quad \forall u \in M_R,$$

wobei

$$M_R = \Big\{ u \colon F(u) - F(u^*) \leq R, \int_\Omega (u - U)\,\mathrm{d}x \in \operatorname{span}\{\alpha - \beta\} \Big\}$$

und u^* der durch $\int_\Omega (u^* - U)\,\mathrm{d}x \in \operatorname{span}\{\alpha - \beta\}$ eindeutig bestimmte stationäre Zustand von (1) ist. Zusammen mit dem ersten Ergebnis folgt hieraus, daß die Energie entlang von schwachen Lösungen des Systems (1) für $t \to +\infty$ exponentiell gegen ihren Gleichgewichtswert strebt.
Abschließend sei erwähnt, daß wir analog zu dem Vorgehen in [2] auch für Zeitdiskretisierungen von (1) energetische Abschätzungen erhalten haben, die Aussagen über die Stabilität des Näherungsverfahrens nach sich ziehen.

Literatur

1. S. T. DUNHAM, *A quantitative model for the coupled diffusion of phosphorus and point defects in silicon*, J. Electrochem. Soc., **139** (1992), pp. 2628–2636.

2. A. GLITZKY, R. HÜNLICH, *Energetic estimates and asymptotics for electro-reaction-diffusion systems*, Z. Angew. Math. Mech., **77** (1997), pp. 823–832.

3. ——, *Global estimates and asymptotics for electro-reaction-diffusion systems in heterostructures*, Appl. Anal., **66** (1997), pp. 205–226.

4. ——, *Electro-reaction-diffusion systems including cluster reactions of higher order*, erscheint in: Math. Nachr.

5. ——, *Energy estimates for electro-reaction-diffusion systems with partly fast kinetics*, in Vorbereitung.

6. A. HÖFLER, *Development and application of a model hierarchy for silicon process simulation*, Series in Microelectronics, vol. **69**, Hartung-Gorre, Konstanz, 1997.

7. R. HÜNLICH, A. GLITZKY, *On energy estimates for electro-diffusion equations arising in semiconductor technology*, erscheint in: Proceedings PDE Prague ’98.

8. J. LANG, W. MERZ, *Numerical simulation of single species dopant diffusion in silicon under extrinsic conditions*, Preprint SC 97–47, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, 1997.

9. W. MERZ, *Analysis und numerische Berechnung der Diffusion von Fremdatomen in homogenen Strukturen*, Habilitationsschrift, Technische Universität München, 1998.

10. H. RÜCKER, B. HEINEMANN, W. RÖPKE, R. KURPS, D. KRÜGER, G. LIPPERT, H. J. OSTEN, *Suppressed diffusion of boron and carbon in carbon-rich silicon*, Appl. Physics Lett., **73** (1998), pp. 1682–1684.

11. N. STRECKER, *ISE TCAD manuals. Release 4.0. Part 8: DIOS-ISE*, Integrated Systems Engineering AG, Zurich, 1997.

Modellierung und Simulation von hochsperrenden Bauelementen für Schaltkreise der angesteuerten Leistungselektronik

Bearbeiter: R. Hünlich, W. Röpke, H. Gajewski, J. A. Griepentrog, G. Albinus

Kooperation: alpha microelectronics gmbh Frankfurt (Oder), B. Heinemann (Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder) GmbH), N. Strecker (Eidgenössische Technische Hochschule Zürich)

Förderung: BMBF

Schaltkreise mit hochsperrenden Bauelementen sind ein wesentlicher Zweig der Produktpalette der Firma *alpha microelectronics gmbh* Frankfurt (Oder). Sie betreibt vorrangig den Schaltkreisentwurf, verbunden mit einer zielgerichteten Technologieentwicklung [2]. Dabei sollen zunehmend Programme zur Simulation der Bauelemente (`Tosca98`® [1]) und deren Technologie (DIOS [3]) eingesetzt werden. Die Besonderheiten der Leistungselektronik erfordern eine Weiterentwicklung der Simulationswerkzeuge, um den Entwurf von hochsperrenden Bauelementen wirkungsvoll zu unterstützen. Dies schließt grundlegende Untersuchungen zur physikalischen und mathematischen Modellierung sowie zur Analysis und Numerik der entsprechenden Modellgleichungen ein.

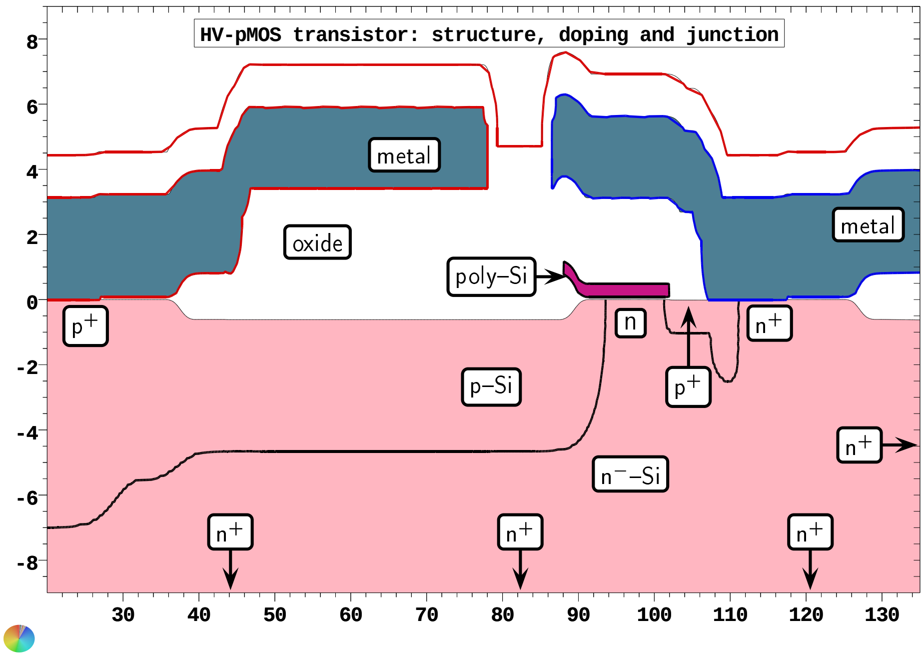


Abb. 1: Hochspannungs-pMOS-Transistor. Prinzipieller Aufbau und Dotierung (Ausschnitt, Längenangaben in μm, in vertikaler Richtung verzerrt). Das Bild ist eine Bearbeitung einer mit DIOS durchgeführten Technologiesimulation, wobei hier die Dotierungsverhältnisse nur schematisch dargestellt worden sind.

In der ersten Phase des Projekts ging es darum, beide Simulatoren in ihrer aktuellen Version für Aufgaben der Firma zu adaptieren und zu nutzen. Beim derzeitigen Kenntnisstand kann gesagt werden, daß der Modellgehalt sowohl in DIOS als auch in `Tosca98`® umfangreich genug ist, daß aber einige Modellparameter weiterhin anzupassen sind.

Mit DIOS wurden Prozeßabläufe für die Bauelemente HV-DMOS-Transistor, I^2L-npn-Transistor, und vor allem HV-pMOS-Transistor simuliert (siehe Abb. 1). Die zu erwartenden Schwierigkeiten lagen bei der Gittererzeugung (große Strukturen mit sehr hohen Dotandenkonzentrationen in kleinen Gebieten) und bei der Beschreibung der Dotandenwechselwirkung und der Oxydationseinflüsse. Die bisherigen Rechnungen haben ergeben, daß bei der Erzeugung des Gitters ein sinnvoller Kompromiß zwischen Genauigkeit und Aufwand erreicht worden ist, daß die Diffusionsparameter im bekannten Rahmen zu variieren sind, daß aber der Übergang Silizium/Siliziumdioxid bzgl. der Dotandenumverteilung einer verbesserten Behandlung bedarf. Trotz des zuletzt genannten Umstandes konnten verläßliche Daten (über Struktur, Dotierung und Gitter) an anschließende `Tosca98`®-Simulationen übergeben werden.

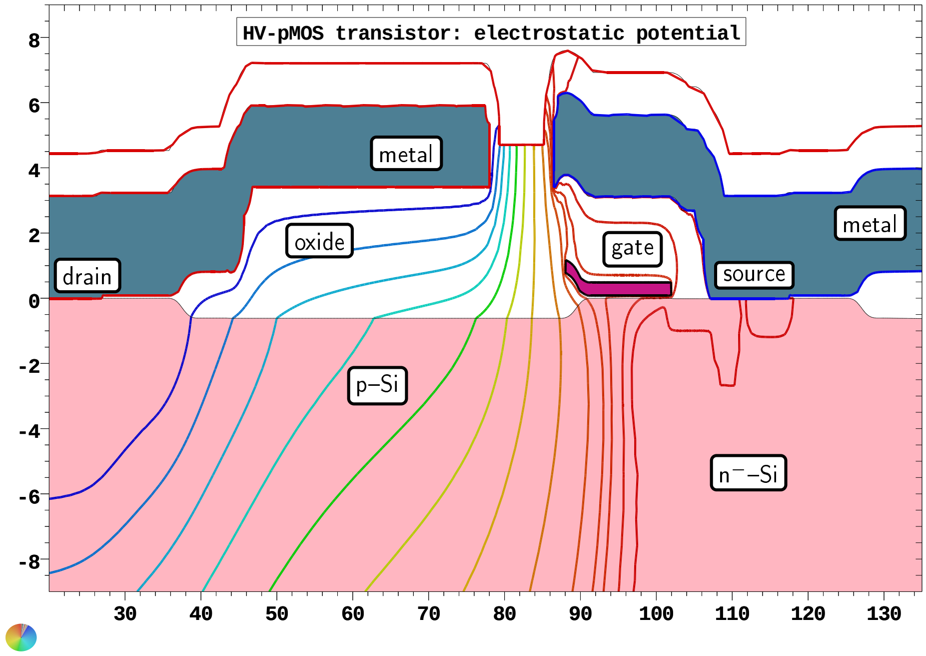


Abb. 2: Hochspannungs-pMOS-Transistor. Isolinien des elektrostatischen Potentials. Das Bild basiert auf einer mit `Tosca98`® durchgeführten Devicesimulation.

Mit `Tosca98`® wurden zahlreiche Rechnungen zum pMOS-Transistor durchgeführt (siehe Abb. 2). Die dabei erhaltenen Kennlinienfelder (siehe Abb. 3) sind das Arbeitsmittel für die Firma, um die Bauelemente zu optimieren und Parameter für die Netzwerkanalyse bereitzustellen. Bisher konnten relevante Aussagen für den Entwurf von HV-pMOS-Transistoren bzgl. der Draindotierung, des Kontaktabstandes, des Substratkontaktes und der kritischen Avalanchebereiche geliefert werden. Um diese Ergebnisse zu erhalten, waren einige Änderungen und Erweiterungen von `Tosca98`® notwendig (bessere Berechnung des elektrischen Feldes an der Grenzfläche Silizium/Siliziumdioxid, sensiblere Steuerung des Gummel-Newton-Verfahrens, Ersetzen der L^∞-Normen für die Fehler durch geeignetere Orlicz-Normen). Dadurch haben sich Durchlauf und Stabilität deutlich verbessert. Die bisherigen Untersuchungen lassen folgende Aussagen zu:

- Für die Erzeugung des `Tosca98`®-Gitters mit den DIOS-Routinen sind Erfahrungen erarbeitet worden, die eine optimale Simulation ermöglichen.
- Ebenso ist nun einiges Wissen vorhanden, um die Kennlinien im sehr kritischen Durch-

bruchbereich berechnen zu können.

- Bei der Verwendung der Standardmodelle für Beweglichkeit, Generation und Rekombination der Ladungsträger treten vor allem im Hochfeldbereich noch größere Abweichungen zu vorliegenden Meßkurven auf, so daß weitere Modellanpassungen erforderlich sind.

Mit dem nun vorliegenden Stand von `Tosca98`® sind zuverlässige Simulationen der Leistungsbauelemente möglich. Wegen des hohen Leistungsumsatzes in diesen Bauelementen ist es aber erforderlich, die Wärmeerzeugung und -verteilung in ihnen zu berücksichtigen. Gegenstand der zweiten Phase des Projekts ist die Erweiterung von `Tosca98`® durch Einbeziehung der Wärmeleitungsgleichung. Erste Implementierungen und Beispielrechnungen an einfachen Strukturen liegen jetzt vor, so daß nun auch Simulationen für den HV-pMOST in Angriff genommen werden können.

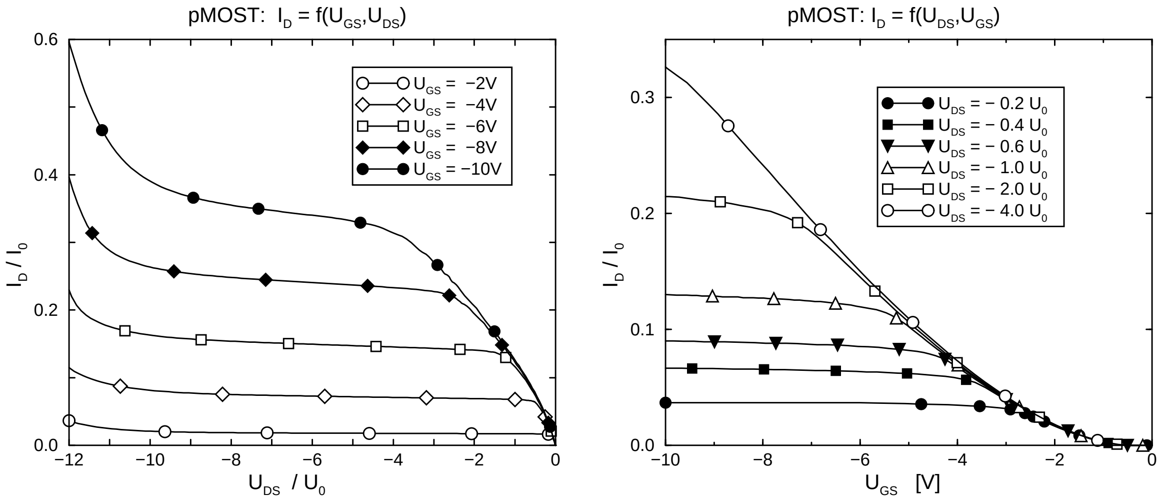


Abb. 3: Hochspannungs-pMOS-Transistor. Mit `Tosca98`® berechnete Kennlinien (skaliert). Links: I_D als Funktion von U_{DS} mit U_{GS} als Parameter. Rechts: I_D als Funktion von U_{GS} mit U_{DS} als Parameter (I_D – drain Strom, U_{DS} – drain-source Spannung, U_{GS} – gate-source Spannung).

Literatur

1. H. Gajewski, B. Heinemann, R. Nürnberg, H. Langmach, G. Telschow, K. Zacharias, *Der 2D-Bauelementesimulator ToSCA. Handbuch*, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Berlin, 1986, 1991.

2. J. Knopke, *High-voltage-ICs mit DIMOST und DIBIT*, Firmenschrift, alpha microelectronics gmbh Frankfurt (Oder), 1995.

3. N. Strecker, *The 2D process simulator DIOS. User manual. Version 3.6.*, ISE Integrated Systems Engineering AG, Zürich, 1995.

Phasenfeldsysteme

Bearbeiter: O. Klein, P. Krejčí, J. Sprekels

Kooperation: P. Colli (Universität Pavia), M. Frémond (LMSGC, Paris)

Förderung: ESF/FBP Research Fellowship, VIGONI

Diffusive Phasenübergänge, wie z. B. das Kristallwachstum, werden häufig durch *Phasenfeldsysteme* modelliert. In derartigen Systemen ist eine Evolutionsgleichung für die absolute Temperatur θ, die sich aus einer Energiebilanz ergibt, mit einer Evolutionsgleichung für den sogenannten *Ordnungsparameter* χ des Phasenübergangs gekoppelt.
Im Rahmen des Projektes wurden im Berichtszeitraum verschiedene Phasenfeldsysteme untersucht.

a) In Fortführung der Arbeiten der Vorjahre wurden in [6] zeitliche Semidiskretisierungen für Phasenfeldsysteme vom *Penrose-Fife-Typ*, vgl. [12],

$$\partial_t\left(c_0\theta+\lambda(\chi)\right)+\kappa\Delta\left(\frac{1}{\theta}\right)=g, \tag{1}$$

$$\eta\chi_t-\varepsilon\Delta\chi+\beta(\chi)-\sigma'(\chi)\ni-\frac{\lambda'(\chi)}{\theta}, \tag{2}$$

untersucht. Hierbei sind c_0, κ und ε positive Konstanten, g ist eine von Ort und Zeit abhängige Funktion, η ist eine vom Ort abhängige positive Funktion und β ist ein maximal monotoner Graph.
Es gelang dabei, in Verbesserung der Resultate aus [4, 5], Konvergenzaussagen auch für den Fall herzuleiten, daß die Nichtlinearitäten λ, σ nur noch stetig differenzierbar mit lokal Lipschitz-stetiger Ableitung sind, was den Anwendungsbereich der Theorie erheblich erweitert. Mit Hilfe von Ansätzen aus [11] gelang ferner der Nachweis, daß, für eine Zeitschrittweite h, der Diskretisierungsfehler $O(h)$ ist, während in [4, 5] nur $O(\sqrt{h})$ gezeigt wurde.

b) Zur Modellierung des Erstarrens von unterkühltem Wasser wurde von Frémond in [2] das folgende modifizierte *Stefan-Problem* eingeführt:

$$c_0\partial_t\theta-\kappa\Delta\theta=g \quad \text{im Wasser und im Eis,} \tag{3}$$

$$\left[\kappa\frac{\partial\theta}{\partial n}\right]=-LW_N \quad \text{auf der Grenzschicht Wasser/Eis,} \tag{4}$$

$$c(\theta)W_N=\frac{L(\theta_M-\theta)}{\theta_M} \quad \text{auf der Grenzschicht Wasser/Eis.} \tag{5}$$

Hierbei sind $[\cdot]$ der Sprung einer Größe entlang der Grenzschicht zwischen Wasser und Eis, W_N die Normalengeschwindigkeit der Grenzschicht, L eine positive Konstante und $c(\theta)$ eine Funktion der Temperatur.
Um dieses Problem näherungsweise zu lösen, wurde das folgende Phasenfeldsystem betrachtet:

$$\partial_t\left(c_0\theta+L\chi\right)-\kappa\Delta\theta=g, \tag{6}$$

$$\phi(\nabla\beta,\theta)\chi_t-\varepsilon\Delta\chi+\partial I_{[0,1]}(\chi)\ni\frac{L}{\theta_M}\left(\theta-\theta_M\right). \tag{7}$$

Hierbei ist $\phi(\nabla\beta,\theta)$ eine geeignete Näherung von $\frac{c(\theta)}{|\nabla\chi|}$. Es gelang in [1], die Lösbarkeit dieses Systems nachzuweisen.

c) Phasenübergänge werden häufig von Hysterese-Phänomenen begleitet. Zur besseren Modellierung dieser Erscheinungen wurde im Vorjahr (vgl. [7, 8, 9]) ein neuer Zugang entwickelt, der darin besteht, die Hysterese *direkt* in Form von *Hysterese-Operatoren* in die Phasenfeldgleichungen aufzunehmen. Man erhält dabei Systeme der Form

$$\mu(\theta)\, w_t + \mathcal{H}_1[w] + \mathcal{H}_2[w]\,\theta = 0\,, \tag{8}$$

$$(C_V\,\theta + \mathcal{F}_1[w])_t - \kappa\Delta\theta = g(\theta,x,t)\,, \tag{9}$$

wobei $\mathcal{H}_1$, $\mathcal{H}_2$, $\mathcal{F}_1$ geeignete Hysterese-Operatoren sind.
Motiviert wurde dieser Zugang dadurch, daß sich Modellierungen mit Hilfe von Variationsungleichungen, wie z. B. das klassische *relaxierte Stefan-Problem*, auf die Form (8), (9) transformieren lassen. Dabei sorgt die vorausgesetzte *Dissipativität* der Hysterese-Operatoren $\mathcal{H}_1$, $\mathcal{H}_2$ dafür, daß der Zweite Hauptsatz der Thermodynamik in Form der Entropieungleichung erfüllt ist.
Es gelang im Berichtszeitraum, die in [7, 8, 9] erzielten Resultate auf wesentlich allgemeinere Situationen auszudehnen. Die Ergebnisse sind in den Arbeiten [3] und [10] zusammengefaßt.

Literatur

1. P. COLLI, M. FRÉMOND, O. KLEIN, *Global existence of a solution to a model for supercooling*, in Vorbereitung.

2. M. FRÉMOND, *A macroscopic predictive theory of supercooling*, in: Trends in Applications of Mathematics to Mechanics (M. M. Marques, J. F. Rodrigues, Hrsg.), Longman, 1995.

3. G. GILARDI, P. KREJČÍ, J. SPREKELS, *A hysteresis approach to phase-field models with memory*, in Vorbereitung.

4. O. KLEIN, *Existence and Approximation Results for Phase-Field Systems of Penrose-Fife Type and Stefan Problems,* Dissertation, Humboldt-Universität zu Berlin, ISBN 3-8265-3056-X.

5. ——, *A phase-field system with space-dependent relaxation coefficient,* erscheint in: Free Boundary Problems, Theory and Applications, Proceedings of the Crete Congress 97 (I. Athanasopoulus, G. Makrakis, J. F. Rodriquez, Hrsg.), Pitman Research Notes in Mathematics, CRC press.

6. ——, *A class of time discrete schemes for a phase-field system of Penrose-Fife type*, WIAS-Preprint No. 424, 1998, eingereicht.

7. P. KREJČÍ, J. SPREKELS, *A hysteresis approach to phase-field models*, WIAS-Preprint No. 364, 1997, erscheint in: Nonlin. Anal. TMA.

8. ——, *Hysteresis operators in phase-field models of Penrose-Fife type*, Appl. Math., **43** (1998), pp. 207–222.

9. ——, *Hysteresis operators in phase-field models*, in: Topics in Nonlinear Analysis – The Herbert Amann Anniversary Volume (J. Escher, G. Simonett, Hrsg.), Birkhäuser Verlag, Basel, 1999, pp. 499–516.

10. ——, *Phase-field models with hysteresis*, WIAS-Preprint No. 458, 1998, eingereicht.

11. R. H. NOCHETTO, G. SAVARÉ, C. VERDI, *A posteriori error estimates for variable time-step discretizations of nonlinear evolution equations*, in Vorbereitung.

12. O. PENROSE, P. C. FIFE, *Thermodynamically consistent models of phase-field type for the kinetics of phase transitions,* Physica D, **43** (1990), pp. 44–62.

Hysteresephänomene in der Elastoplastizität

Bearbeiter: P. Krejčí, M. Siegfanz, J. Sprekels

Kooperation: M. Brokate (Christian-Albrechts-Universität zu Kiel), D. Rachinskii (Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau)

Dynamische Modelle der Elastoplastizität, die in der Praxis am häufigsten Verwendung finden, beziehen sich direkt oder indirekt auf die Variationsungleichung

$$\begin{cases} \langle \dot{u}(t) - \dot{x}(t), x(t) - \tilde{x} \rangle \geq 0 \quad \text{f. ü.} \quad \forall \tilde{x} \in Z, \\ x(t) \in Z, \quad x(0) = x^0 \in Z, \end{cases} \tag{1}$$

wobei $u \in W^{1,1}(0,T;\mathbb{T})$ („Input“) und $x \in W^{1,1}(0,T;\mathbb{T})$ („Output“) innere Variablen sind, z. B. Dehnung und plastische Spannung, $\mathbb{T}$ ein Vektorraum mit Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$, $t \in [0,T]$ die Zeit und $Z \subset \mathbb{T}$ eine konvexe abgeschlossene Teilmenge von $\mathbb{T}$ ist. Der Punkt bezeichne die Ableitung nach t.
Diese Aufgabe stellt den grundlegenden Baustein der mathematischen Plastizitätstheorie dar. Der Lösungsoperator

$$\mathfrak{s} : Z \times W^{1,1}(0,T;\mathbb{T}) \to W^{1,1}(0,T;\mathbb{T}) : (x^0, u) \mapsto x$$

heißt *Stop mit Charakteristik Z*; seine Eigenschaften werden seit den siebziger Jahren systematisch untersucht.

a) Die Arbeit [9] wurde als Zusammenfassung bisheriger Resultate für die Sommerschule „Seminar in Differential Equations“, Chvalatice/Tschechische Republik, Juni 1998 vorbereitet. Darin werden die analytischen Eigenschaften des Stop-Operators in den Funktionenräumen $W^{1,p}(0,T;\mathbb{T})$, $BV(0,T;\mathbb{T})$ und $C([0,T];\mathbb{T})$ hinsichtlich der Geometrie der konvexen Menge Z vorgestellt. Neue Ergebnisse wurden für den Spezialfall eines glatten Randes ∂Z erzielt. Es wurde bewiesen, daß der Stop-Operator lokal Lipschitz-stetig ist. Eine optimale Abschätzung für die Lipschitz-Konstante wurde hergeleitet.

b) Die Theorie der Stop-Operatoren wurde für die Untersuchung eines Gleichungssystems der eindimensionalen Thermovisko-Elastoplastizität verwendet

$$u_{tt} - \gamma u_{xx} - (\mathcal{P}[u_x, \theta])_x - \mu u_{xxt} + \alpha u_{xxxx} + \beta \theta_x = 0, \tag{2}$$

$$(C_V \theta + \mathcal{V}[u_x, \theta])_t - \theta_{xx} = \mathcal{P}[u_x, \theta] u_{xt} + \mu u_{xt}^2 - \beta \theta u_{xt}, \tag{3}$$

mit geeigneten Anfangs- und Randbedingungen. Die plastische Spannung $\mathcal{P}[u_x, \theta]$ wird als der temperaturabhängige Prandtl-Ishlinskii-Operator

$$\mathcal{P}[u_x, \theta] := \int_0^\infty \varphi(r, \theta)\, \mathfrak{s}_r[u_x]\, dr \tag{4}$$

in Form einer unendlichen Kombination von eindimensionalen Stop-Operatoren $\mathfrak{s}_r$ mit Charakteristiken $[-r, r]$, $r > 0$, und mit einer gegebenen temperaturabhängigen Dichtefunktion φ dargestellt. Der Hysterese-Operator

$$\mathcal{V}[u_x, \theta] := \frac{1}{2} \int_0^\infty (\varphi(r, \theta) - \theta \varphi_\theta(r, \theta))\, \mathfrak{s}_r^2[u_x]\, dr \tag{5}$$

entspricht dem thermoplastischen Anteil der inneren Energie. Mit Hilfe des Prandtl-Ishlinskii-Operators können vielfältige Hysteresephänomene, wie z. B. innere Schleifen, modelliert werden.
Die Existenz und Eindeutigkeit der globalen Lösung wurde schon früher in [3] bewiesen. In [7] wurde jetzt das asymptotische Verhalten für $t \to \infty$ untersucht.

c) Um Probleme wie (2), (3) numerisch zu lösen, wurde ein Approximationsschema für Prandtl-Ishlinskii-Operatoren entwickelt. Zur numerischen Lösung wurden Spezialfälle der Gleichungen (2), (3) mit Hilfe eines Differenzenverfahrens diskretisiert. Für den temperaturunabhängigen Fall wurde die numerische Approximation implementiert und getestet. Die Untersuchungen zur Konvergenz des numerischen Verfahrens und Fehlerabschätzungen sind noch in Arbeit.

Literatur

1. M. BROKATE, P. KREJČÍ, *Wellposedness of kinematic hardening models in elastoplasticity*, Math. Model. Num. Anal. (M^2AN), **32** (1998), pp. 177–209.

2. P. KREJČÍ , J. SPREKELS, *Global solutions to a coupled parabolic-hyperbolic system with hysteresis in 1-d magnetoelasticity*, Nonlin. Anal., **33** (1998), pp. 341–358.

3. ——, *Temperature-dependent hysteresis in one-dimensional thermovisco-elastoplasticity*, Appl. Math., **43** (1998), 173–205.

4. ——, *Hysteresis operators in phase-field models of Penrose-Fife type*, Appl. Math., **43** (1998), pp. 207–222.

5. M. BROKATE, P. KREJČÍ, D. RACHINSKII, *Some analytical properties of the multidimensional continuous Mróz model of plasticity*, Control Cybernet., **27** (1998), pp. 199–215.

6. M. BROKATE, P. KREJČÍ, *On the wellposedness of the Chaboche model*, in: Control and Estimation of Distributed Parameter Systems (W. Desch, F. Kappel, K. Kunisch, Hrsg.), Proceedings of the conference held in Vorau (Austria), July 14–20, 1996, Int. Series Num. Math., Vol. **126**, Birkhäuser, Basel, 1998, pp. 67–79.

7. P. KREJČÍ, J. SPREKELS, *Weak stabilization of solutions to PDEs with hysteresis in thermovisco-elastoplasticity*, in: Proceedings of Equadiff 9, Conference on Differential Equations and Their Applications, Brno, August 25–29, 1997 (R. P. Agarwal, F. Neuman, J. Vosmanský, Hrsg.), Masaryk University, Brno & Electronic Publishing House, Stony Brook, NY, 1998, pp. 81–96.

8. ——, *Hysteresis operators in phase-field models*, in: Topics in Nonlinear Analysis – The Herbert Amann Anniversary Volume (J. Escher, G. Simonett, Hrsg.), Birkhäuser Verlag, Basel, 1999, pp. 499–515.

9. P. KREJČÍ, *Evolution variational inequalities and multidimensional hysteresis operators*, WIAS-Preprint No. 432, 1998.

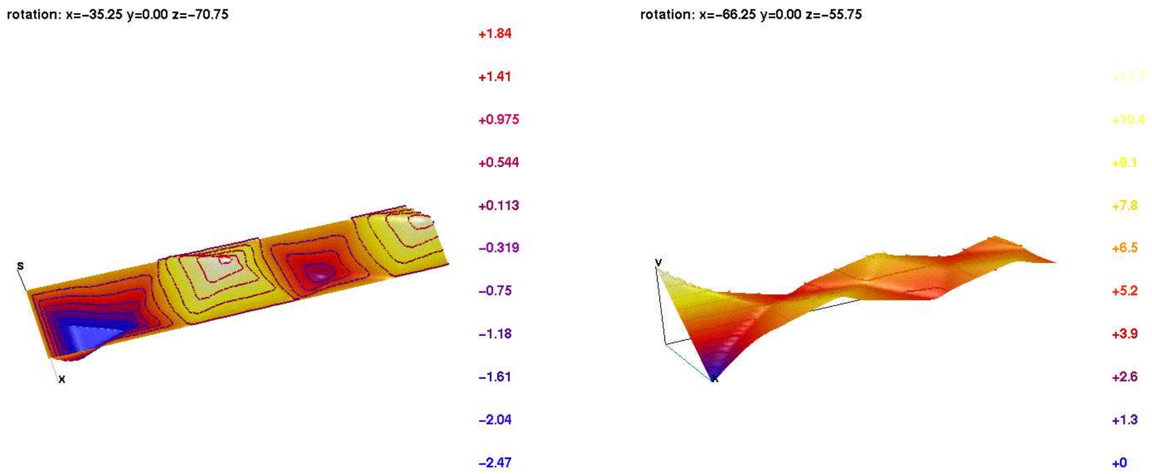


Abb. 1: Numerische Lösung der Bewegungsgleichung $u_{tt} - (\mathcal{P}[u_x])_x = 0$, mit Neumannschen Randbedingungen, $u_t(x,0) = 13(1-x)$, $u_x(x,0) \equiv 0$, $T = 4.0$, $\mathcal{P}$ wie in Abb. 2.
links: Numerisch berechnete Spannung σ_h als Funktion von Ort und Zeit.
rechts: Numerisch berechnete Geschwindigkeit v_h als Funktion von Ort und Zeit.

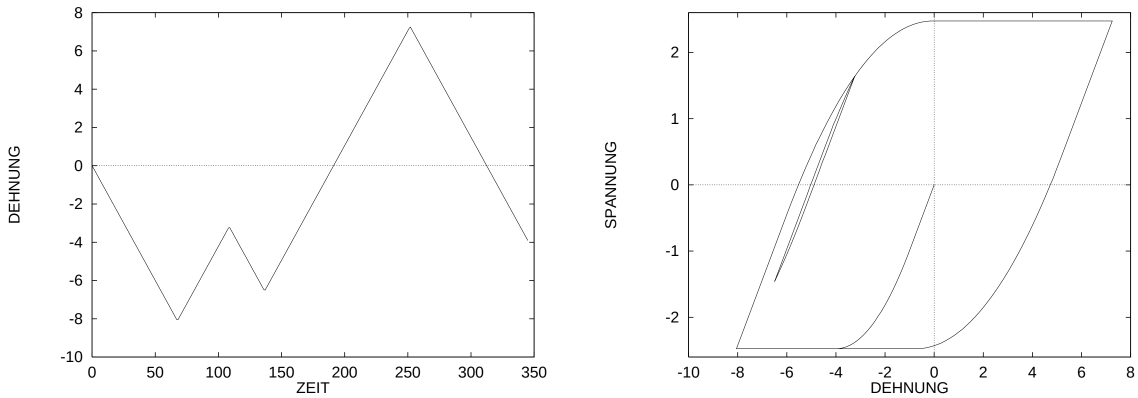


Abb. 2: Veranschaulichung der Spannungs-Dehnungs-Beziehung bei einem durch einen Prandtl-Ishlinskii-Operator gegebenen konstitutiven Gesetz $\sigma = \mathcal{P}[\varepsilon] = \frac{1}{3}\int \chi_{[1,4]}\mathfrak{s}_r[\varepsilon]dr$.

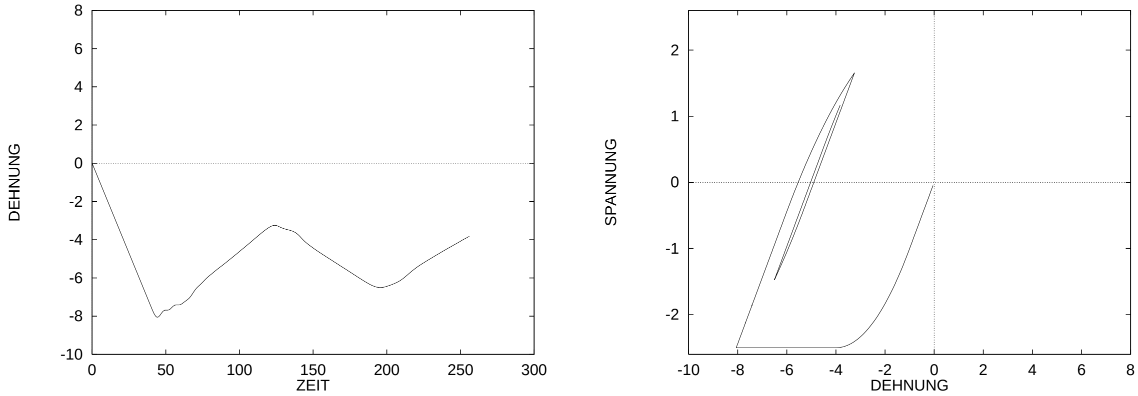


Abb. 3: Kopplung des Prandtl-Ishlinskii-Operators mit der Bewegungsgleichung (vgl. Abb. 1).

Adaptive Optimierung von Flugprofilen mit Gedächtnislegierungen

Bearbeiter: J. Sprekels

Kooperation: I. Müller, St. Seelecke (Institut für Thermodynamik und Reaktionstechnik, Technische Universität Berlin), C. Büskens (Institut für Numerische und Experimentelle Mathematik, Universität Münster)

Förderung: DFG-Schwerpunktprogramm „Echtzeit-Optimierung großer Systeme“

Umströmungsprofile von Flugzeugen sind im wesentlichen starre Flächen; zwar besitzen sie Ruder zur Kontrolle von Auftrieb, Widerstand und Moment, aber diese sind wiederum starre Flächen. Dagegen hat die Natur mit dem Flügel des Vogels ein adaptives „Bauteil“ entwickelt, mit dem der Vogel durch Veränderung der Profilform seine Flugbedingungen optimieren kann. Die zwischen der konventionellen Flugzeuglösung und dem feinfühligen Vogelflügel klaffende Lücke soll durch den Einsatz eines adaptiven Profils verringert werden.

Der Werkstoff eines solchen Profils ist ein Verbund eines elastischen Materials mit Gedächtnislegierungen. Drähte aus solchen Legierungen verändern ihre Länge reversibel um bis zu 6% bei Heizung und Kühlung, wobei die Heizung elektrisch und die Kühlung im Luftstrom erfolgen können. Der „Prototyp“ eines adaptiven Flügels ist eine biegsame Kunststoffplatte, auf deren Ober- und Unterseite je ein Netz aus Gedächtnisdrähten eingelassen ist.
Jedes Segment beider Netze kann einzeln beheizt werden, wobei das entsprechende Plattenstück ein Biegemoment erfährt. So kann der Platte insgesamt innerhalb bestimmter Grenzen eine beliebige gekrümmte Form gegeben werden. Ziel ist es, diese Form den durch den jeweiligen Anströmzustand gegebenen Flugbedingungen optimal anzupassen.
Die jeweils optimalen Formen werden im voraus berechnet und von einer Datenbank abgerufen; ein typisches Optimierungsziel ist es, während des Fluges bei konstantem Auftrieb den Widerstands-Beiwert zu minimieren. Es handelt sich hierbei um eine Aufgabe der Echtzeit-Optimierung.

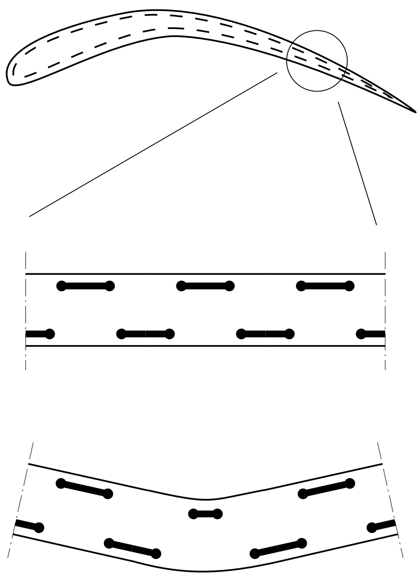


Abb. 1: Profileinstellung aufgrund der durch die Verkürzung eines beheizten Drahtsegmentes hervorgerufenen Biegung

Die zugehörigen Zustandsgleichungen bilden ein nichtlinear gekoppeltes System von Algebro-Differentialgleichungen, partiellen Differentialgleichungen und hysteretischen Nichtlinearitäten, durch die die zugrundeliegenden Effekte der Aerodynamik, des Wärmeaustauschs, der Materialtheorie sowie der Elastizitätstheorie modelliert werden.

In den vergangenen Jahren wurde ein stark vereinfachtes Modell entwickelt, in dem der Tragflügel in erster Näherung als eindimensionaler Balken angenommen wurde. Hierfür konnte das Problem der optimalen Steuerung behandelt werden, aber nicht unter Echtzeit-Bedingungen (vgl. [1]).

Im Berichtszeitraum konnten nunmehr entscheidende Fortschritte erzielt werden: Einerseits konnte mit Hilfe eines neuen Ansatzes die Rechenzeit zur Lösung des Kontrollproblems für die Gedächtnisdrähte auf etwa eine Sekunde reduziert und damit die Echtzeitfähigkeit des Ansatzes nachgewiesen werden ([2], [3]); andererseits gelang aber auch im Labor von Prof. Müller die Herstellung eines Funktionsmodells des adaptiven Flügels, das sich durch erhebliche Verformungen des Tragflügels bei Veränderung der Anströmbedingungen auszeichnet. Das Funktionsmodell soll auf der Hannover-Messe Industrie 1999 ausgestellt werden; eine Patentanmeldung ist in Vorbereitung.

Literatur

1. C. Büskens, S. Seelecke, *Optimal control of beam structures by shape memory wires*, erscheint in: Proceedings OPTI97, Computer Aided Optimum Design of Structures V.

2. ——, *Optimal control of adaptive structures using SMA wires*, in Vorbereitung.

3. ——, *Real time optimal control of adaptive structures using SMA wires*, in Vorbereitung.

4.2 Forschungsgruppe Dynamische Systeme und Steuerungstheorie

4.2.1 Zusammenfassung

In Übereinstimmung mit dem Forschungsprogramm des WIAS von 1997 bis 1999 steht im Mittelpunkt der Arbeit der Forschungsgruppe die Entwicklung analytischer und numerischer Methoden zur Analyse und Steuerung dynamischer Systeme sowie deren Anwendung auf konkrete Probleme der optischen Kommunikationssysteme, der chemischen Verfahrenstechnik und der Geophysik. Die Schwerpunkte der Forschung lagen dabei auf folgenden Gebieten:

- Modellierung, Analysis und Numerik der Dynamik von Halbleiterlasern,
- Intermittierende Dynamik,
- Dynamik und Stabilität in Mehrskalensystemen,
- Optimale Steuerung diskontinuierlicher Destillationsprozesse.

Die Arbeiten wurden in interdisziplinärer nationaler bzw. internationaler Kooperation durchgeführt. Dabei spielt das interdisziplinäre Laserseminar, das in Zusammenarbeit mit der Humboldt-Universität und dem Heinrich-Hertz-Institut veranstaltet wird, eine besondere Rolle. Die durchgeführten Forschungen wurden durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft und ein EU-Projekt gefördert.
Im folgenden werden ausgewählte Projekte detaillierter vorgestellt.

4.2.2 Projekte

Nichtlineare Dynamik von DFB-Halbleiterlasern

Bearbeiter: M. Radziunas, K. R. Schneider, J. Sieber, M. Wolfrum

Kooperation: U. Bandelow (FG 1), L. Recke (Institut für Mathematik, HU Berlin), B. Sartorius, D. Hoffmann (Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin), H.-J. Wünsche (Institut für Physik, HU Berlin), H. Wenzel (Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik, Berlin)

Mehrsektions-DFB-Halbleiterlaser besitzen nichtlineare Phänomene, wie z. B. hochfrequente Selbstpulsationen und Schalteffekte, die sie zu wichtigen Bauelementen in zukünftigen Nachrichtennetzen mit rein optischer Signalverarbeitung prädestinieren. Gegenstand dieses längerfristigen Projektes sind Fragen der mathematischen Modellierung des komplexen Verhaltens derartiger Laser sowie analytische und numerische Untersuchungen der entsprechenden Differentialgleichungssysteme.

Zur mathematischen Modellierung der Dynamik von Halbleiterlasern verwenden wir ein dissipatives hyperbolisches System partieller Differentialgleichungen (travelling-wave-Gleichungen), das mit einem System gewöhnlicher Differentialgleichungen (Ladungsträger-Gleichungen) gekoppelt ist:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = iH(n,z)\psi, \tag{1}$$

$$\frac{d}{dt}n_k = F_k(n_k, \|\psi\|_k^2) \qquad \text{für } k = 1, \ldots \text{ Anzahl der Sektionen.} \tag{2}$$

Zusätzlich werden noch Randbedingungen für die Reflexion an den Laserfacetten verwendet. ψ ist der Vektor der Feldamplituden für die vorwärts- und rückwärtslaufende Welle, n beschreibt die Ladungsträgerdichte. Im Berichtszeitraum wurden Forschungen zu folgenden Fragestellungen durchgeführt:

1. Weiterentwicklung der Software TLP,
2. Numerische Untersuchungen der Dynamik von Halbleiterlasern,
3. Modellerweiterung.

1. Software. Die Software TLP wurde wie folgt weiterentwickelt.

a. Zur Lösung der Differentialgleichungen wurde eine zusätzliche Methode implementiert, die ein endliches Differenzverfahren vom Prädiktor-Korrektor-Typ darstellt.

b. Es wurde ein reduziertes Modell (Vernachlässigung von Lochbrenneffekten) implementiert, das eine drastische Rechenzeitverkürzung gestattet.

c. Um den Einfluß der Polarisation auf die Laserdynamik studieren zu können, wurde das erweiterte Modell (siehe unten) implementiert.

d. Das Programmsystem wurde so modifiziert, daß die Einwirkung externer Signale auf das Laserverhalten (und somit das wichtige Synchronisationsverhalten) numerisch untersucht werden kann.

e. Es wurden Möglichkeiten zur graphischen Darstellung und Ausgaben der erhaltenen Datenfiles geschaffen.

2. Numerische Untersuchungen. Die numerischen Untersuchungen dienen zur Optimierung der Laserdynamik (Bauelementeoptimierung). Das Differentialgleichungssystem (1), (2) zur Beschreibung der Laserdynamik hängt von zahlreichen Parametern ab. Der Operator H kann durch den folgenden Matrix-Operator dargestellt werden:

$$iH = v_g \begin{pmatrix} i\frac{\partial}{\partial z} - \beta(z,t) & -\kappa \\ -\kappa & -i\frac{\partial}{\partial z} - \beta(z,t) \end{pmatrix}.$$

Dabei ist $\beta(z,t)$ die komplexwertige Ausbreitungsfunktion des Wellenleiters. Für β verwenden wir die Modellfunktion

$$\beta(z,t) = \beta_0 - i\frac{\alpha_0}{2} + (\alpha_H + i)\frac{g}{2} \cdot (n(t) - n_{tr}).$$

Für den zu berechnenden 3-Sektions-DFB-Halbleiterlaser wird angenommen, daß zwei Lasersektionen durch eine passive Phasensektion separiert sind, wobei an einer DFB-Sektion ein großer Pumpstrom angelegt wird (Gain-Sektion), während die andere einen vergleichsweise niedrigen, aber festgelegten Pumpstrom aufweist (Reflektorsektion). Das Ziel der numerischen Untersuchungen besteht darin, Gebiete im Parameterraum zu bestimmen, so daß den Punkten dieser Teilgebiete Systeme (1), (2) mit speziellen Eigenschaften entsprechen. Zu den zu optimierenden Eigenschaften gehören u. a. die Robustheit bestimmter Qualitäten gegenüber Störungen und die Existenz von Selbstpulsationen mit hohen Frequenzen. Es wurden numerische Untersuchungen hinsichtlich folgender Fragestellungen durchgeführt:

a. Robustheit von Selbstpulsationen

Das Ziel bestand in der Untersuchung des Einflusses der Lasergeometrie auf die Existenz von möglichst großen zusammenhängenden Parametergebieten, denen Systeme (1), (2) mit Selbstpulsationen hoher Frequenz entsprechen. Die folgenden Abbildungen zeigen den Einfluß der Länge der Phasensektion auf die Existenz derartiger Parametergebiete.

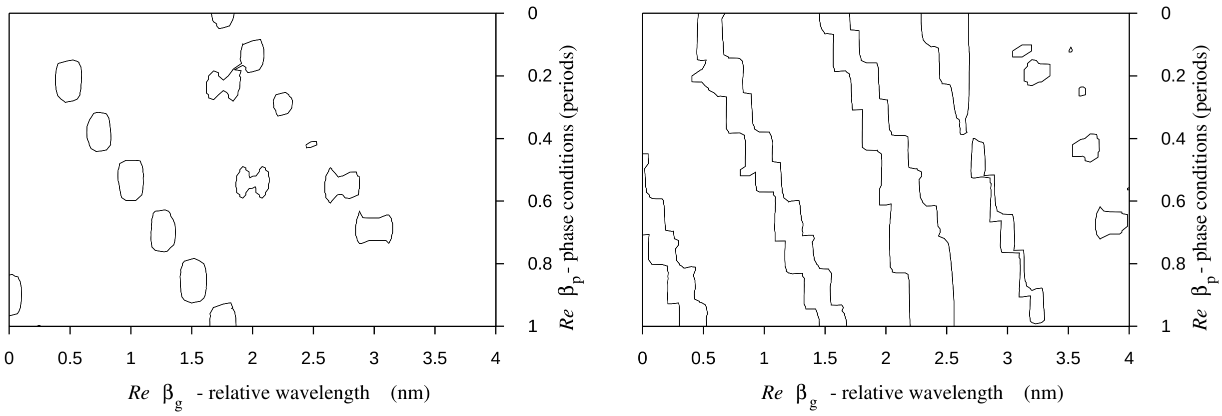


Abb. 1: Regionen im Parameterraum, in denen Selbstpulsationen auftreten. Der Einfluß von Reβ_p (β_0 in der Phasensektion) ist periodisch. Innerhalb dieser Periode wurde variiert. Der andere Parameter ist Reβ_g (β_0 in der Gain-Sektion). Länge der Phasensektion: links 200μm, rechts 300μm.

b. Hysterese bei Parameterstörungen
Die Untersuchungen zur Persistenz der Selbstpulsationen gegenüber Parameteränderungen weisen eine deutliche Abhängigkeit gegenüber der Richtung der Parameteränderung auf. Die folgenden Abbildungen zeigen die Existenz von Selbstpulsationen im Parametergebiet Re β_g/Re β_p.

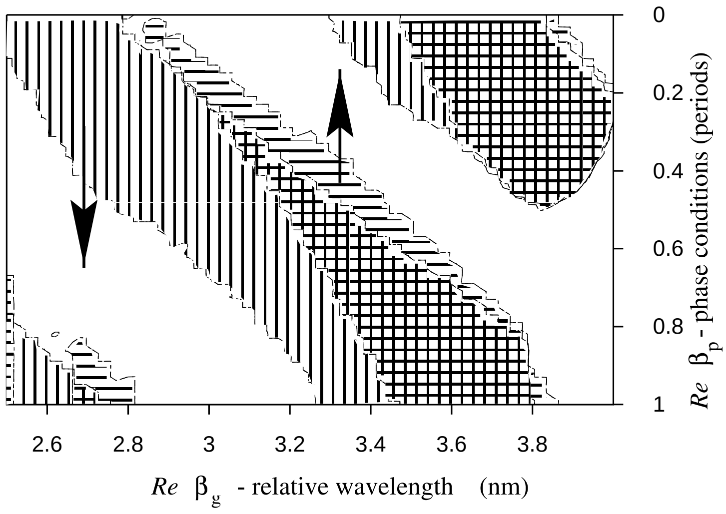
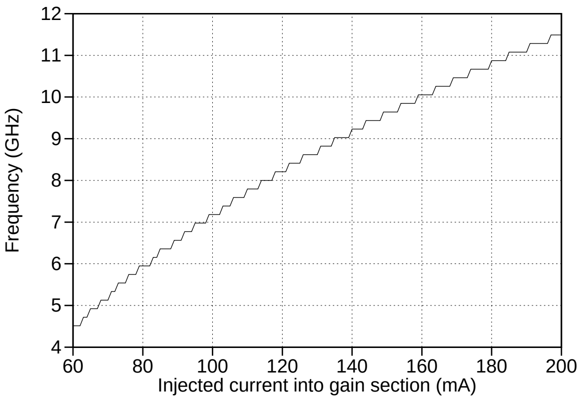


Abb. 2: Hysterese bezüglich des (periodischen) Parameters Reβ_p. Bei Erhöhung von Reβ_p treten im horizontal schraffierten Gebiet Selbstpulsationen auf, bei Verminderung von Reβ_p in der vertikal schraffierten Region. Das horizontal und vertikal schraffierte Gebiet zeigt den Durchschnitt beider Regionen.

Die Bedeutung des horizontal und vertikal schraffierten Gebietes von Abb. 2 besteht darin, daß die zugehörigen Selbstpulsationen auch bei Änderungen über den Rand des dargestellten Gebietes hinaus persistieren. Die Existenz von Hysterese ist an die Existenz von Bistabilität gebunden, sie impliziert die Existenz von Sattel-Knoten-Bifurkationen für periodische Lösungen.

c. Frequenzoptimierung
Die numerischen Untersuchungen zeigen eine Zunahme der Frequenz der Selbstpulsationen, falls der Pumpstrom der Gain-Sektion erhöht wird. Derselbe Effekt kann bei einer Rotverschiebung des optischen Feldes beobachtet werden (Abb. 3). Die numerischen Untersuchungen wurden im Experiment bestätigt.



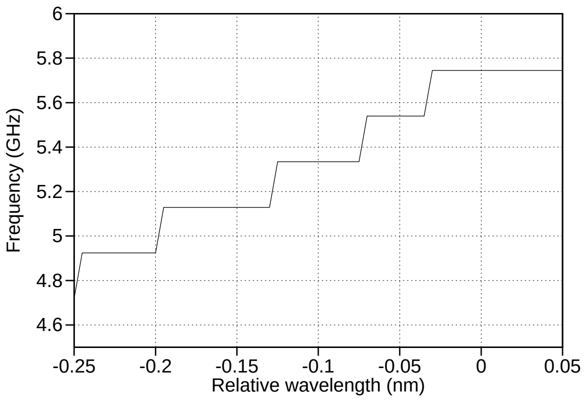


Abb. 3: Zunahme der Selbstpulsationsfrequenz bei Erhöhung des Injektionsstroms in der Gain-Sektion (links) bzw. bei Erhöhung von Reβ in der Gain-Sektion (rechts). Die Stufenbildung ist ein Artefakt, der bei der Berechnung der Frequenz mit Hilfe der diskreten Fouriertransformation auftritt.

3. Modellerweiterung. Für eine realistische Beschreibung des Lasers im mehrmodigen Betrieb muß die Dispersion des optischen Gewinns in einem entsprechend breiten Frequenzbereich berücksichtigt werden. Das System (1) enthält nur eine lineare Indexdispersion und frequenzunabhängige Gewinne. Um nichtlineare Dispersion beschreiben zu können, werden an (1) zusätzliche Polarisationsgleichungen gekoppelt [1]:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = iH\left(\psi - \frac{g_r(z)}{2}p\right), \tag{3}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = i(\Gamma\psi + (\delta + i\Gamma)p). \tag{4}$$

Der maximale Gewinn $g_r(z) \geq 0$, die Halbwertsbreite $\Gamma(z) > 0$ und die relative Resonanzfrequenz $\delta(z)$ werden aus Meßergebnissen von realen Lasern gewonnen und als stückweise konstant angenommen. Die Ankopplung der Polarisation in (3), (4) entspricht einer Approximation der Gewinnkurve in der Nähe der zentralen Frequenz ω_0 durch eine Lorentzkurve

$$\mathcal{X}(\omega) = \frac{g_r(z)\Gamma(z)}{2(\omega - \omega_0 - \delta(r) - i\Gamma(z)}\ .$$

Literatur

1. J. SIEBER, U. BANDELOW, H. WENZEL, M. WOLFRUM, H.-J. WÜNSCHE, *Travelling wave equations for semiconductor lasers with gain dispersion*, WIAS-Preprint, No. 459, 1998.

Intermittierende Dynamik

Bearbeiter: F. Guyard, R. Lauterbach

Kooperation: P. Chossat (Institut Non Linéaire de Nice, Nizza), E. Bänsch (Universität Bremen), F. Huth (stud. Hilfskraft), J. Fuhrmann (FG 3)

Förderung: DFG-Schwerpunktprogramm „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“

Die Arbeit ist Bestandteil eines längerfristigen Projektes mit dem Ziel, intermittierende Dynamik im Zusammenhang mit symmetrischen dynamischen Systemen und ihren Verzweigungen zu verstehen. Ein Teil des Projektes besteht in der Untersuchung von Einflüssen von Diskretisierungen auf die Symmetrien eines Systems und damit auf das Langzeitverhalten.

Im Berichtszeitraum wurden Verzweigungen als Folge einer erzwungenen Symmetriebrechung bei relativ periodischen Orbits sowie das Problem der Berechnung relativ periodischer Orbits mit dem Verfahren von Lyapunov-Schmidt betrachtet. Es wurde begonnen, spezielle Systeme mit Symmetrie (Brüsselator, ebenes Bénardproblem) numerisch zu untersuchen und die erhaltenen Resultate mit analytischen Vorhersagen zu vergleichen. Dabei stellte sich heraus, daß z. B. die Anzahl der Konvektionszellen im ebenen Bénardproblem von der Feinheit und der Struktur des verwendeten Gitters abhängt. Die erhaltenen Resultate passen teilweise in die theoretische Vorhersage unter Verwendung der Theorie erzwungener Symmetriebrechung. Die genauen Mechanismen bedürfen noch weiterer Untersuchungen.

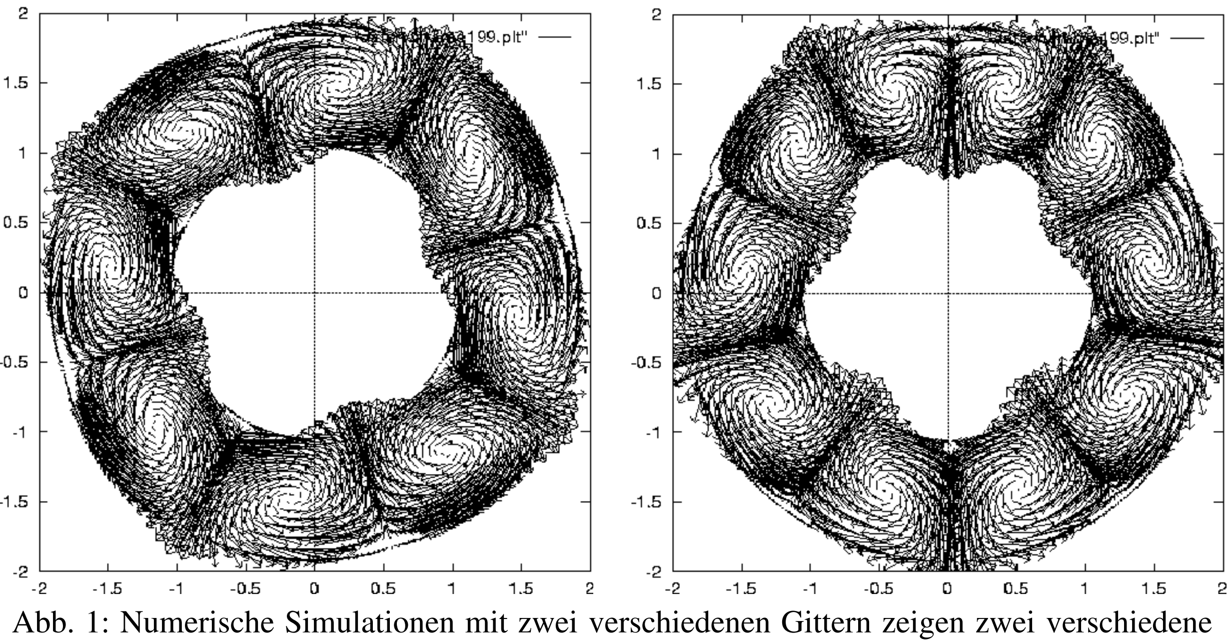


Abb. 1: Numerische Simulationen mit zwei verschiedenen Gittern zeigen zwei verschiedene Verzweigungslängen beim Einsetzen der Konvektion.

Modellreduktion mittels erweiterter Quasi-Steady-State-Approximation

Bearbeiter: K. R. Schneider

Kooperation: Th. Wilhelm (Universität Augsburg)

Wir betrachten Mehrskalenprozesse, die durch die folgende Klasse von singulär gestörten Differentialgleichungen beschrieben werden:

$$\frac{dx}{dt} = f(x,y,t,\varepsilon), \ \varepsilon\frac{dy}{dt} = g(x,y) + \varepsilon\tilde{g}(x,y,t,\varepsilon), \tag{1}$$

$x \in R^m, \ y \in R^n, \ 0 < \varepsilon \ll 1.$
Unter der Voraussetzung, daß das assoziierte System

$$\frac{dy}{d\tau} = g(x,y) \tag{2}$$

eine Familie $y = \psi_0(x)$ hyperbolischer Gleichgewichtslösungen besitzt, existiert eine invariante Mannigfaltigkeit $\mathcal{M}_\varepsilon$

$$\mathcal{M}_\varepsilon := \{(x,y) \in R^{m+n} : y = \psi(x,t,\varepsilon) := \psi_0(x) + \varepsilon\psi_1(x,t) + O(\varepsilon^2), \ x \in R^n\} \tag{3}$$

von (1) für hinreichend kleines ε, so daß das Verhalten der Lösungen von (1) in der Nähe von $\mathcal{M}_\varepsilon$ durch das dimensionsreduzierte System

$$\frac{dx}{dt} = f(x,\psi(x,t,\varepsilon),t,\varepsilon)$$

beschrieben werden kann. Dieses Resultat rechtfertigt die sogenannte Quasistationaritätsannahme (QSSA), die besagt, daß unter der Voraussetzung, daß $y = \psi_0(x)$ eine Familie stabiler hyperbolischer Gleichgewichtspunkte von (2) darstellt, das qualitative Verhalten von (1) für kleine ε nahe $\mathcal{M}_0$ unter Verwendung des reduzierten Systems

$$\frac{dx}{dt} = f(x,\psi_0(x),t,0)$$

bestimmt werden kann.
Das gemeinsame Forschungsprojekt hatte das Ziel, Bedingungen abzuleiten, unter denen die QSSA auch dann angewendet werden kann, wenn das assoziierte System keine hyperbolischen Gleichgewichtspunkte besitzt. Es wurden folgende Resultate erhalten:

1. Die QSSA kann auf singuläre singulär gestörte Systeme erweitert werden, deren zugehöriges assoziiertes System ein erstes Integral besitzt, das für eine Koordinatentransformation verwendet werden kann. Das zugrundeliegende Prinzip besteht dabei darin, unter Verwendung des ersten Integrals neue Koordinaten einzuführen, mit denen die „kritischen“ schnellen Variablen eliminiert werden, so daß auf das transformierte System die QSSA angewendet werden kann. Als Anwendungsbeispiel konnten biochemisch relevante Reaktionssysteme angegeben werden, deren zugehöriges assoziiertes System ein nichtlineares erstes Integral besitzt.

2. Eine weitere Verallgemeinerung der „einfachen“ QSSA besteht darin, bei der Dimensionsreduktion Terme höherer Ordnung in der Darstellung (3) der invarianten Mannigfaltigkeit $\mathcal{M}_\varepsilon$ zu verwenden.

Eine interessante Anwendung der dargelegten Verallgemeinerungen besteht darin, daß gezeigt werden kann, daß der trimolekulare Autokatalator

$$\begin{aligned} \mathrm{S} &\rightarrow \mathrm{X} \\ \mathrm{X}+2\mathrm{Y} &\stackrel{k}{\rightarrow} 3\mathrm{Y} \\ \mathrm{Y} &\rightarrow \mathrm{P}, \end{aligned} \tag{4}$$

der auch als Higgins-Selkov-, Schnakenberg- oder Gray-Scott-System bekannt ist und dieselbe trimolekulare Reaktion wie der Brusselator enthält, durch das bimolekulare Reaktionssystem

$$\begin{aligned} \mathrm{S} &\rightarrow \mathrm{X} \\ 2\mathrm{Y} &\underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} \mathrm{Z} \\ \mathrm{X}+\mathrm{Z} &\stackrel{k_2}{\rightarrow} \mathrm{Y}+\mathrm{Z} \\ \mathrm{Y} &\rightarrow \mathrm{P}, \end{aligned} \tag{5}$$

mit einer schnellen Teilreaktion $(k_{-1} \gg 1)$ approximiert werden kann.

Literatur

1. K. R. SCHNEIDER, TH. WILHELM, *Model reduction by extended quasi-steady-state approximation*, WIAS-Preprint No. 457, 1998.

Langzeitverhalten skalarer Reaktions-Diffusions-Gleichungen

Bearbeiter: M. Wolfrum

Kooperation: B. Fiedler (Freie Universität Berlin)

Nichtlineare parabolische Reaktions-Diffusions-Gleichungen spielen eine wichtige Rolle bei der Modellierung der verschiedensten physikalischen und chemischen Prozesse. Neben der raum-zeitlichen Dynamik chemischer Reaktionen beschreiben Gleichungen dieses Typs unter anderem auch Ionisationsvorgänge in der Plasmaphysik oder Populationsdynamik in der Biologie. Im Grenzwert kleiner Diffusionsraten $D \longrightarrow 0$ treten diese Gleichungen als viskoser Limes entsprechender hyperbolischer Erhaltungssätze auf und können zur Untersuchung von deren Entropielösungen herangezogen werden.
Untersucht wurden skalare Gleichungen der Form

$$u_t = Du_{xx} + f(u, u_x, x) \tag{1}$$

wobei $x \in [0,1]$, $t \geq 0$ ist und f gewisse Glattheits- und Dissipativitätseigenschaften erfüllt. Auf einem geeigneten Banchraum von x-Profilen, die zusätzlich Neumann-Randbedingungen erfüllen, definieren Gleichungen dieser Form einen globalen Halbfluss. Der zugehörige Attraktor gibt Auskunft über das Langzeitverhalten aller Lösungen und liefert damit grundlegende qualitative Informationen, wie sie mit numerischer Simulation schwerlich zu finden sind.
Aufgrund der Gradientenähnlichkeit des Systems besteht der Attraktor nur aus stationären Lösungen und heteroklinen Verbindungen zwischen diesen (siehe [4]).
Eine generische Trajektorie nähert sich zunächst einer beliebigen, i.A. nicht stabilen stationären Lösung an und folgt dann den heteroklinen Verbindungen in einer Kaskade von Übergangen zwischen metastabilen Zuständen, bis eine Umgebung einer stabilen stationären Lösung erreicht ist.
Während die Bestimmung der stationären Profile als Lösungen der gewöhnlichen Randwertaufgabe

$$Du_{xx} + f(u, u_x, x) = 0,\ u_x(0) = u_x(1) = 0 \tag{2}$$

normalerweise kein Problem darstellt, ist die Frage nach der Struktur der heteroklinen Verbindungen erheblich komplizierter.
Ausgangspunkt dieses Projektes waren Arbeiten von C. Rocha, G. Fusco und B. Fiedler [1], [2], die zeigen, wie die Existenz heterokliner Verbindungen mit bestimmten kombinatorischen Invarianten der stationären Lösungen zusammmenhängt. Wie in [3] erstmals gezeigt wurde, ist hierbei die Reihenfolge der stationären Lösungen am Rand des Gebietes von ausschlaggebender Bedeutung.
In [5] konnten weitergehende Resultate gezeigt werden, die eine genauere Beschreibung der Attraktoren ermöglichen und dabei insbesondere die Spektraleigenschaften der Linearisierung

$$L_v u := Du_{xx} + f_p(x, v(x), v_x(x))u_x + f_u(x, v(x), v_x(x))u,$$

die vom Sturm-Liouville-Typ ist, berücksichtigen. Damit konnten erstmals Bedingungen für die Existenz von heteroklinen Verbindungen in stark stabilen bzw. stark instabilen Mannigfaltigkeiten angegeben werden.

Das besondere an Resultaten dieser Art ist, daß anhand von Eigenschaften der stationären, gewöhnlichen Differentialgleichung (2) Informationen über das qualitative Verhalten der vollen partiellen Differentialgleichung (1) gewonnen werden können.

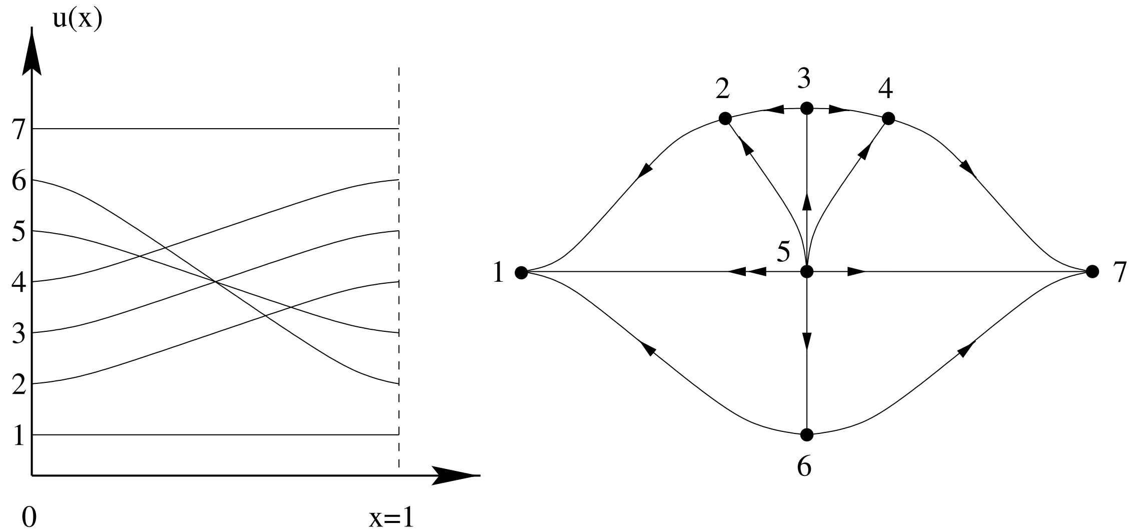


Abb. 1: Profile von stationären Lösungen und zugehöriger Fluss auf dem Attraktor

Literatur

1. P. BRUNOVSKÝ, B. FIEDLER, *Connecting orbits in scalar reaction-diffusion equations II: The complete solution*, J. of Diff. Equ. 81, (1989), 106-135.

2. B. FIEDLER, C. ROCHA, *Heteroclinic orbits of semilinear parabolic equations*, J. of Diff. Equ. 125, no.1, (1996), 239-281.

3. G. FUSCO, C. ROCHA, *A permutation related to the dynamics of a scalar parabolic PDE*, J. of Diff. Equ. 91 (1991), 111-137.

4. D. HENRY, *Geometric theory of semilinear parabolic equations*, Lect. Notes in Math. 840, New York (1981).

5. M. WOLFRUM, *Geometry of Heteroclinic Cascades in Scalar Parabolic Differential Equations*, Dissertation, Freie Universität Berlin (1998).

Homokline Bifurkationen

Bearbeiter: D. Turaev

Kooperation: L. Shilnikov, S. Gonchenko (Universität Nizhny Novgorod)

Förderung: DFG-Schwerpunktprogramm „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“

Homokline Bifurkationen in Hamiltonschen Systemen

Es wurde die Struktur von N-homoklinen Orbits zu einem (im Koordinatenursprung gelegenen) Sattelpunkt in Hamiltonschen Systemen der Gestalt

$$\begin{aligned}
\frac{dx}{dt} &= -A^T(\mu)x+\dots,\\
\frac{dy}{dt} &= A(\mu)y+\dots,\\
H(x,y) &= x^T Ay\dots,\\
\sigma(A(\mu)) &= \{\lambda_1(\mu),\dots,\lambda_n(\mu)\},\ 0<\text{Re }\lambda_i(\mu),\ i=1,2,\dots,n
\end{aligned}$$

betrachtet, wobei N beliebig groß sein kann. Es ist bekannt, daß die Existenz einer einfachen homoklinen Schleife zu einem Gleichgewichtspunkt vom Sattel-Fokus-Typ im allgemeinen die Existenz von unendlich vielen N-homoklinen Orbits impliziert, wobei N beliebig groß sein kann. Im Gegensatz dazu können im Falle eines Sattelpunktes (die führenden Eigenwerte von A, d. h. die Eigenwerte mit dem kleinsten Realteil, sind reell) keine N-homoklinen Orbits in allgemeiner Lage auftreten, d. h. ein 1-homokliner Orbit kann nicht als Grenzwert einer Folge von N-homoklinen Orbits auftreten. In Anwendungen konnten aber N-Pulse mit einem monotonen asymptotischen Verhalten nachgewiesen werden. Um diesen „Widerspruch“ aufzuklären und um eine umfassende Beschreibung möglicher Szenarien für das Auftreten von N-homoklinen Orbits zu geben, wurden die Kodimension 1-Bifurkationen von homoklinen Orbits zu einem hyperbolischen Fixpunkt studiert. Es wurden zwei Kodimension 1-Bifurkationen von homoklinen Orbits zu einem Sattelpunkt eines Hamiltonschen Systems entdeckt, die zum Auftreten von N-homoklinen Orbits führen. Die erste Bifurkation ist eine Orbit-Flip-Bifurkation, die zweite entspricht der Bifurkation eines führenden zweifachen Eigenwertpaares, die aber halbeinfach sind, in Gegenwart einer zusätzlichen Symmetrie. In beiden Fällen konnte eine vollständige Beschreibung der Struktur der N-homoklinen Orbits gegeben werden, die während der Bifurkation entsteht.

Im Falle der Orbit-Flip-Bifurkationen wurde die Möglichkeit des Auftretens von sogenannten superhomoklinen Orbits (diese sind homoklin zu einem homoklinen Orbit, siehe Abbildung 1) bewiesen. Wir zeigen, daß die Existenz eines superhomoklinen Orbits die Menge der N-homoklinen Orbits bereichert und geben eine Beschreibung dieser Menge in der Sprache der Knoten-Invarianten.

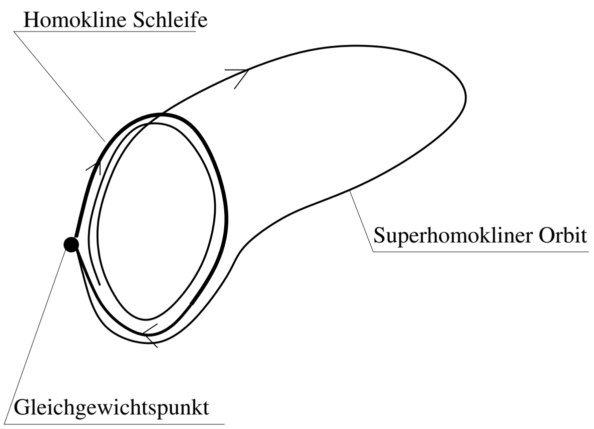


Abb. 1: Superhomokliner Orbit zu einer homoklinen Schleife

Literatur

1. D. TURAEV, *On codimension 1-bifurcations of homoclinic orbits in Hamiltonian systems*, in Vorbereitung.

Homokline Bifurkationen von vierdimensionalen symplektischen Abbildungen

Symplektische Abbildungen treten beim Studium der Poincaré-Abbildung von Hamiltonschen Systemen auf. Die Dynamik zweidimensionaler symplektischer Abbildungen (sie können bei Hamiltonschen Systemen mit zwei oder $1\frac{1}{2}$-Freiheitsgraden beobachtet werden) wird mehr oder weniger gut verstanden, nicht zuletzt auch wegen zahlreicher umfangreicher numerischer Simulationen. Die Phasenraumstruktur solcher Abbildungen kann als „chaotische See“ mit elliptischen Inseln bildhaft charakterisiert werden. Wir bezeichnen diese Struktur als „gemischte“ Struktur. Im Gegensatz dazu kann die Phasenraumstruktur höherdimensionaler symplektischer Abbildungen nicht einmal bildhaft beschrieben werden. Das Ziel des Forschungsprojektes bestand darin, einen Mechanismus für das Auftreten stabiler periodischer Lösungen in vierdimensionalen symplektischen Abbildungen mit chaotischer Dynamik aufzufinden, der als Indikator dafür angesehen werden kann, daß die Phasenraumstruktur auch im höherdimensionalen Fall als „gemischt“ angesehen werden kann. Die Untersuchungen bezogen sich auf die Bifurkation einer vierdimensionalen symplektischen Abbildung mit einer homoklinen Tangierung zu einer sattelartigen periodischen Lösung. Es wurde bewiesen, daß bei einer solchen Bifurkation keine periodischen Orbits entstehen, falls die Multiplikatoren der sattelartigen periodischen Lösung reell sind. Im Gegensatz dazu entstehen stabile periodische Lösungen im Falle komplexer Multiplikatoren.

Literatur

1. S. GONCHENKO, D. TURAEV, L. SHILNIKOV, *Elliptic periodic orbits near a homoclinic tangency in four-dimensional symplectic diffeomorphisms*, erscheint in: J. Regular and Chaotic Dynamics.

Optimale Steuerung diskontinuierlicher Destillationsprozesse

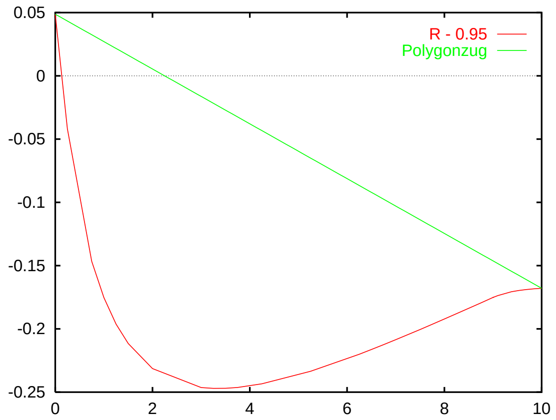
Bearbeiter: I. Bremer, R. Lamour

Kooperation: B. Hegner (BASF AG, Ludwigshafen)

Die Arbeiten aus dem Vorjahr[1] wurden entsprechend dem Kooperationsvertrag bzw. Arbeitsplan mit den Schwerpunkten

- Implementierung der internen Differentiation,
- Verbesserung des Integrationsverfahrens,
- Untersuchungen zu stochastischen Optimierungsverfahren

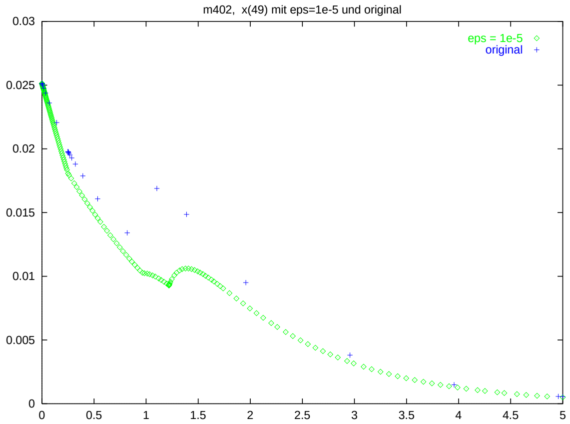
fortgesetzt. Zusätzlich wurde auf Anforderungen, die vom Praxispartner in Form konkreter Beispiele herangetragen wurden, reagiert.
Eine besonders wichtige Fragestellung war in diesem Zusammenhang die Berechnung von Parametern, für die alle Nebenbedingungen des jeweiligen Problems erfüllt sind. Nebenbedingungen gelten als erfüllt, wenn die zugeordneten Funktionen nicht-negative Werte annehmen. Im eingesetzten SQP-Verfahren wird dazu eine Straffunktion, die mit Hilfe der Nebenbedingungen definiert wird, minimiert. Bei Nebenbedingungen mit negativen lokalen Maxima in Abhängigkeit der Parameter führt dieses Vorgehen nicht immer zum Ziel. In der nebenstehenden Abbildung hat eine der geforderten Reinheiten ein negatives lokales Maximum in Abhängigkeit von der Schaltzeit. Bei diesem Beispiel wurde neben dem Einsatz einer stochastischen Methode die zusätzliche Einführung eines Homotopieparameters mit Erfolg getestet. Dabei wird zu der Funktion, die die Werte für die jeweilige Nebenbedingung liefert, eine modifizierte Form durch Verbindung der lokalen Maxima berechnet und beide Funktionen in Linearkombination, gewichtet über den Homotopiefaktor, für die Berechnung der Nebenbedingung verwendet. Im obigen Beispiel kann man durch den Homotopieparameter erreichen, daß die Suche gültiger Parameter am Anfang nicht nach rechts, sondern nach links startet.



Ein weiterer wichtiger Punkt war die Frage der korrekten Behandlung unzulässiger Parameterbereiche, die implizit durch die Gültigkeitsbereiche der benutzten Modelle gegeben sind. Der verwendete SQP-Algorithmus wurde entsprechend ergänzt.
Durch die adaptive Schrittweitensteuerung in der der Optimierung zugrundeliegenden Simulation der Destillationskolonnen erhält man zu benachbarten Parametern u. U. eine andere Diskretisierung. Dadurch wird im allgemeinen der SQP-Algorithmus nicht konvergieren. Dieses Problem konnte dadurch gelöst werden, daß einige Iterationen vor dem Erreichen der maximal erlaubten Anzahl der Iterationen des SQP-Algorithmus das Schrittweitenraster „eingefroren“ wird und nur noch eine Verfeinerung erlaubt ist.

[1]http://www.wias-berlin.de/Publications/Annual_Reports/fb97/node33.html

Das SQP-Verfahren setzt eine (mehr oder weniger) glatte Abhängigkeit der Funktionale von den zu variierenden Parametern voraus. Das Diskretisierungsverfahren im vorliegenden Simulator ist relativ ungenau, wie die durchgeführte Studie zu einer mathematisch fundierten adaptiven Schrittweitensteuerung zeigt (Abb. 1). Das führt immer wieder zu Problemen im Konvergenzverhalten des SQP-Verfahrens, da die geforderte Glattheit nicht genügend gewährleistet werden kann. Eine weitere Vertiefung der Optimierungsproblematik setzt deshalb die Umstellung des Diskretisierungsansatzes und damit eine wesentliche Änderung des Programmpakets beim Industriepartner voraus.



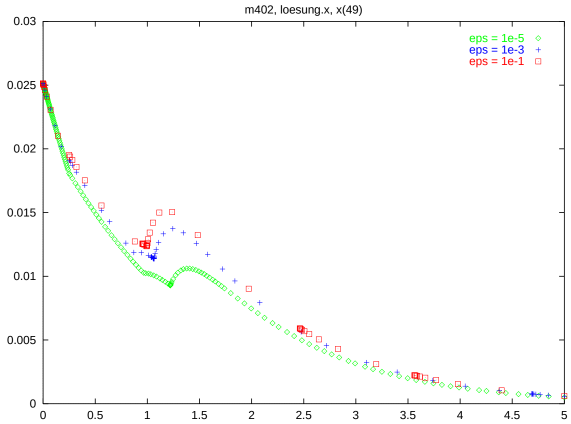


Abb. 1: Schrittweitensteuerung

Die Arbeiten an dem Projekt wurden mit der Übergabe der Software im Sommer 1998 formal abgeschlossen.

Literatur

1. P. Li, G. Wozny, *Dynamische Optimierung großer chemischer Prozesse mit Kollokationsverfahren am Beispiel der Batch-Destillation*, Automatisierungstechnik, **45** (1997), No. 3, pp. 136–149.

2. V. Kvasnička, J. Pospichal, *Simulated Annealing*, Match, **34** (1996), pp. 7–49.

3. H. E. Romeijin, R. L. Smith, *Simulated Annealing for constrained global optimization*, J. Glob. Optim., **5** (1994), pp. 101–126.

Stabilitätswechsel in Mehrskalensystemen

Bearbeiter: K. R. Schneider

Kooperation: V. F. Butuzov, N. N. Nefedov (Staatliche Universität Moskau)

Förderung: DFG: Kooperationsprojekt „Singulär gestörte Systeme und Stabilitätswechsel" deutscher und russischer Wissenschaftler im Rahmen des Memorandum of Understanding zwischen DFG und RFFI

Die Dynamik schneller bimolekularer Reaktionen kann unter Verwendung von singulär gestörten Differentialgleichungen beschrieben werden. Wir betrachten das Randwertproblem

$$\varepsilon^2 u'' = g(u,v,x,\varepsilon), \; v'' = f(u,v,x,\varepsilon), \; u'(0) = u'(1) = 0, \; v(0) = v^0, \; v(1) = v^1, \tag{1}$$

das als stationäres Problem des zugehörigen Reaktions-Diffusions-Systems aufgefaßt werden kann, und das Anfangs-Randwertproblem

$$\varepsilon^2 u'' = g(u,v,x,\varepsilon), \; v' = f(u,v,x,\varepsilon), \; u'(0) = u'(1) = 0, \; v(0) = v^0 \tag{2}$$

unter der Voraussetzung, daß das assoziierte System

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} = g(u,v,x,0)$$

zwei Familien von Gleichgewichtslösungen besitzt, die sich schneiden (Stabilitätswechsel). In diesem Fall kann die Standardtheorie für Differentialgleichungen vom Tichonovschen Typ zur Lösung der gestellten Probleme nicht angewendet werden. Um hinreichende Bedingungen für die Lösbarkeit der gestellten Probleme ableiten zu können, führen wir den Begriff der zusammengesetzten stabilen Lösung für das ausgeartete Problem $(\varepsilon = 0)$ ein. Die entsprechenden Funktionen werden unter Verwendung von Glättungsverfahren zur Konstruktion von geordneten Ober- und Unterlösungen verwendet. Mit deren Hilfe kann auf die Existenz einer Lösung bei beiden Aufgabenstellungen geschlossen und deren asymptotisches Verhalten bezüglich ε bestimmt werden. Die erhaltenen Resultate können zur Untersuchung des Verhaltens von Reaktionsraten verwendet werden.

Literatur

1. V. F. BUTUZOV, N. N. NEFEDOV, K. R. SCHNEIDER, *Singularly perturbed boundary value problems for systems of Tichonov's type in case of exchange of stabilities*, WIAS-Preprint No. 408, 1998, erscheint in: J. Differential Equations.

4.3 Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen

4.3.1 Zusammenfassung

Die Forschungsgruppe hat ihre für einen längeren Zeitraum im wissenschaftlichen Programm des Instituts konzipierten Forschungen zu den Numerischen Verfahren für Systeme von Algebro-Differentialgleichungen und zu den Numerischen Verfahren für partielle Differentialgleichungen, die in Verbindung mit der Behandlung anspruchsvoller Anwendungsaufgaben bearbeitet werden, fortgesetzt. Die Schwerpunkte lagen dabei auf den folgenden Gebieten:

- Chemische Prozeßsimulation,
- Mikrowellenschaltungen,
- Transport in porösen Medien,
- Berechnung von Wirbelströmen,
- Simulation von Halbleiterbauelementen,
- *pdelib* – Algorithmen und Software für die numerische Lösung von partiellen Differentialgleichungen.

Die Arbeiten im Rahmen des BMBF-Förderprogramms „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“ wurden mit den nachfolgend genannten Projekten weitergeführt:

- Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen

  Bearbeiter: F. Grund, J. Borchardt, K. Ehrhardt, D. Horn

- Entwicklung von adaptiven Lösungsstrategien und effizienten Auflösungsverfahren für die numerische Simulation unterirdischer Strömungs- und Transportprozesse in räumlich dreidimensionalen Gebieten

  Bearbeiter: J. Fuhrmann, M. Petzoldt

Mitarbeiter der Forschungsgruppe sind an gemeinsamen Projekten mit den Forschungsgruppen 1 und 7 beteiligt.
Ein wissenschaftlicher Höhepunkt war die Durchführung des internationalen Workshops “Scientific Computing in Electrical Engineering“ (SCEE98) durch unsere Forschungsgruppe.

4.3.2 Projekte

Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen

Bearbeiter: J. Borchardt, K. Ehrhardt, F. Grund, D. Horn

Kooperation: St. Artlich, F. Hubbuch (Bayer AG, Leverkusen), P. Čapek (Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik, Prag), M. Häfele, M. Mangold (Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme, Magdeburg), A. R. Rodríguez S. (Humboldt-Universität zu Berlin)

Förderung: BMBF

Die mathematische Modellierung der verfahrenstechnischen Prozesse, die in Produktionsanlagen der chemischen Industrie ablaufen, führt im allgemeinen auf Anfangswertprobleme für große Systeme von nichtlinearen Algebro-Differentialgleichungen (DAE). Um den Anforderungen unserer Kooperationspartner bei der dynamischen Simulation gesamter Anlagen unter Verwendung immer komplexerer Modelle gerecht werden zu können, ist der Einsatz effizienter numerischer Verfahren zur Lösung der DAE-Systeme auf Parallelrechnern erforderlich. Die von uns hierfür verwendeten Simulationsansätze nutzen die durch die Modellierung vorgegebene hierarchische Struktur der Anlagen für die Parallelisierung mit diakoptischen Methoden aus. Dabei wird die Anlage als ein Netzwerk von Prozeßeinheiten (Units) beschrieben, die durch Stoff- und Wärmeströme miteinander gekoppelt sind. Die entstehenden DAE-Systeme sind entsprechend dieser Units in m Teilsysteme strukturiert

$$F_i(t, y(t), \dot{y}(t), u(t)) = 0, \quad i = 1(1)m,$$
$$F_i : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^q \to \mathbb{R}^{n_i}, \quad \sum_{i=1}^{m} n_i = n, \quad t \in [t_0, t_{end}],$$

wobei mit $u(t)$ der Vektor der Parameterfunktionen und mit $y(t)$ der Vektor der unabhängigen Funktionen bezeichnet ist.

Basierend auf dieser Teilsystemstruktur werden die DAE-Systeme in Blöcke partitioniert. Eine solche Partitionierung kann vorgegeben oder durch Partitionierungsalgorithmen generiert werden. Durch geeignete Erweiterung der bei der Verwendung von BDF-Verfahren in jedem Diskretisierungszeitpunkt entstehenden nichtlinearen Gleichungssysteme können diese durch effektiv parallelisierbare blockstrukturierte Verfahren vom Newton-Typ (BSN) gelöst werden. Diese Verfahren basieren auf einem Block-Schurkomplement-Ansatz und ermöglichen den Einsatz sowohl von Multilevel-Iterations- als auch von adaptiven Relaxations-Techniken [1]. Die Verfahren sind im Prototyp unseres dynamischen Prozeßsimulators BOP (Block Oriented Process simulator) integriert. Der Simulator ist auf Parallelrechnern mit Shared Memory vom Typ Cray J90 und SGI Origin 2000 implementiert und hat sich bei Simulationsrechnungen für komplexe Anlagen der Bayer AG, Leverkusen, bewährt.

Ein neuer Typ von blockstrukturierten Newton-Verfahren [2] (im weiteren Verfahren vom Typ 2 genannt) basiert auf der Kennzeichnung der Koppelvariablen zwischen Blöcken als Eingangs- bzw. Ausgangsvariablen entsprechend der Identifizierung von Eingangs- und Ausgangsströmen der Units der chemischen Anlage. Sind für jedes nichtlineare Blocksystem neben den inneren

Variablen auch die Ausgangsvariablen durch die Gleichungen des Blocks bestimmbar, so kann die Dimension des Koppelgleichungssystems im Vergleich zu den bisher verwendeten Verfahren vom Typ 1 auf etwa die Hälfte reduziert werden. Die Verfahren vom Typ 2 lassen sich besser parallelisieren als die Verfahren vom Typ 1. Da sich bei ihnen die Block-Sensitivitätsmatrizen der Ausgangsvariablen nach den Eingangsvariablen einfach berechnen lassen, sind sie außerdem gut für die Anwendung von Relaxationstechniken geeignet.
In Tabelle 1 ist ein Vergleich von Rechenzeiten für die Simulation mit BOP zum kommerziellen Prozeßsimulator SPEEDUP gegeben. Das Beispiel ist ein Reaktormodell, das auf einem Mehrphasen-Zellenmodell für die Reaktivseparation basiert. Im Vergleich zur Simulation mit SPEEDUP läßt sich die Rechenzeit mit BOP bei Verwendung von sechs Prozessoren um den Faktor 5.4 reduzieren. Dabei zeigt sich, daß die Typ 2-Verfahren im Vergleich zu den Typ 1-Verfahren eine effizientere Parallelisierung ermöglichen.

Tab. 1: Dynamische Simulation von *Reaktor600* (n = 45 600 Gleichungen) auf Cray J90

Simulator	Anzahl Prozessoren	Anzahl Blöcke	CPU time (sec.)	Wall clock time (sec.)
SPEEDUP	1	1	7 008	7 516
BOP	1	1	5 089	5 120
BOP mit BSN-Typ 1	1	18	5 814	5 870
BOP mit BSN-Typ 2	1	18	4 932	4 967
BOP mit BSN-Typ 1	6	18	6 208	1 904
BOP mit BSN-Typ 2	6	18	5 140	1 371

Die Diskretisierung der DAE-Systeme führt auf lineare Systeme mit schwachbesetzten Matrizen, die mit direkten Methoden behandelt werden. Während bei den wiederholten Faktorisierungen mit effektiven Pseudo-Code-Techniken gearbeitet wird, konnte nun auch die erste Faktorisierung durch eine besondere Bestimmung der Pivotspalte effektiver gestaltet werden. Einzelheiten sind im Projekttitel „Lineare Gleichungssysteme“ dargestellt, siehe S. 73.
Aufbauend auf der Definition der Eingabesprache zur Beschreibung verfahrenstechnischer Prozesse wurde die Implementierung eines Compilers zur Erzeugung einer Schnittstelle zum Prozeßsimulator BOP weitergeführt. Die Erzeugung einer Listenstruktur aus der Analyse des Textes der Eingabesprache wurde implementiert und getestet. Hierbei wird die in der Modellierung verwendete Hierarchie berücksichtigt. Implementiert wurde ebenfalls die Auflösung dieser zweistufigen hierarchischen Struktur zu Listen, die den gesamten verfahrenstechnischen Prozeß beschreiben.
In Zusammenarbeit mit dem Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme (MPI) in Magdeburg wurde die automatische Erzeugung einer Schnittstelle aus Daten des Simulators SPEEDUP [5] erweitert. Es kann jetzt auch eine Schnittstelle zum an der Universität Stuttgart entwickelten Simulator DIVA erzeugt werden. Damit können Beispiele, die für den kommerziellen Simulator SPEEDUP entwickelt wurden, auch mit dem Simulator DIVA bearbeitet werden. Ebenso ist es möglich, für DIVA entwickelte Beispiele mit dem Simulator BOP zu rechnen. Die letztgenannte Arbeit wurde am MPI in Magdeburg durchgeführt und von uns unterstützt.

Weitere Arbeiten betreffen die Entwicklung von numerischen Verfahren für die von der Bayer AG, Leverkusen, entwickelte Simulationsumgebung *Simulation-manager*. Sie dient dem dynamischen Abgleich der Eingangs- und Ausgangskoppelströme von Teilprozessen eines verfahrenstechnischen Fließschemas für den Fall, daß die Teilprozesse in einem kleinen Zeitintervall unabhängig voneinander und verteilt in einem Rechnernetzwerk simuliert werden. Jeder Teilprozeß kann dabei separat modelliert und numerisch gelöst werden, wobei die in der chemischen Verfahrenstechnik eingesetzten kommerziellen Modellierungstools (z. B. SPEEDUP, gPROMS) verwendet werden können. Da diese Simulatoren im allgemeinen keine Eingangs- und Ausgangssensitivitäten liefern, werden ableitungsfreie Waveform-Iterationen untersucht. Die nachfolgende Darstellung geht vereinfachend davon aus, daß die p Teilprozesse durch DAE-Systeme

$$\begin{aligned} F_j(t, y_j(t), \dot{y}_j(t), u_j(t)) = 0, &\qquad j = 1, \ldots, p, \\ y_j(t) = (v_j(t), x_j(t))^T, &\qquad y_j(t_0) = y_j^0 \end{aligned}$$

beschrieben werden, wobei $u_j(t)$ den Vektor der Eingangsvariablen des Teilprozesses j bezeichnet, während der Vektor $v_j(t)$ die Ausgangsvariablen enthält.

$$u_j(t) \longrightarrow \boxed{\text{Teilprozeß } j} \longrightarrow v_j(t)$$

Die Vektoren $x_j(t)$ enthalten die internen Prozeßvariablen. Es wird vorausgesetzt, daß die eingesetzten numerischen Verfahren die Ausgangsvektoren $v_j(t) = G_j(u_j(t))$ für gegebene Eingangsfunktionen $u_j(t)$ mit ausreichender Genauigkeit berechnen. Das Fließschema des Gesamtprozesses ist dadurch gekennzeichnet, daß jede Komponente des Vektors aller Ausgangsvariablen $v(t) = (v_1, \ldots, v_p)^T$ genau einer Eingangsvariablen des Vektors $u(t) = (u_1, \ldots, u_p)^T$ zugeordnet ist. Es ist

$$f(u(t)) \equiv u(t) - PG(u(t)) = 0, \quad t \in [t_0, t_E],$$

wobei die Permutationsmatrix P diese Zuordnung definiert. G repräsentiert die Gesamtheit aller nur implizit gegebenen Eingangs- und Ausgangsabbildungen G_j, $j = 1, \ldots, p$, der p Teilmodelle des Gesamtmodells.

Unter Berücksichtigung der durch den Simulation Manager vorgegebenen Beschränkungen wird auf einem äquidistant unterteilten Teilintervall des Simulationsbereiches $[t_0, t_E]$ eine diskrete Lösung mit

$$\begin{aligned} v_j^{k+1} &= G_j(u_j^k), \quad j = 1, \ldots, p, \\ u^{k+1} &= Pv^{k+1}, \quad k = 0, 1, \ldots \end{aligned}$$

iterativ bestimmt (Waveform-Iterationsverfahren). Arbeiten zur Konvergenzbeschleunigung auf der Grundlage von quasi-Newton-Verfahren, insbesondere bei stark verkoppelten Systemen, wurden durchgeführt. Dazu erfolgte die Entwicklung verschiedener anwendungsnaher Testbeispiele und ihre Erprobung mit dem Simulation Manager (siehe Abb. 1).

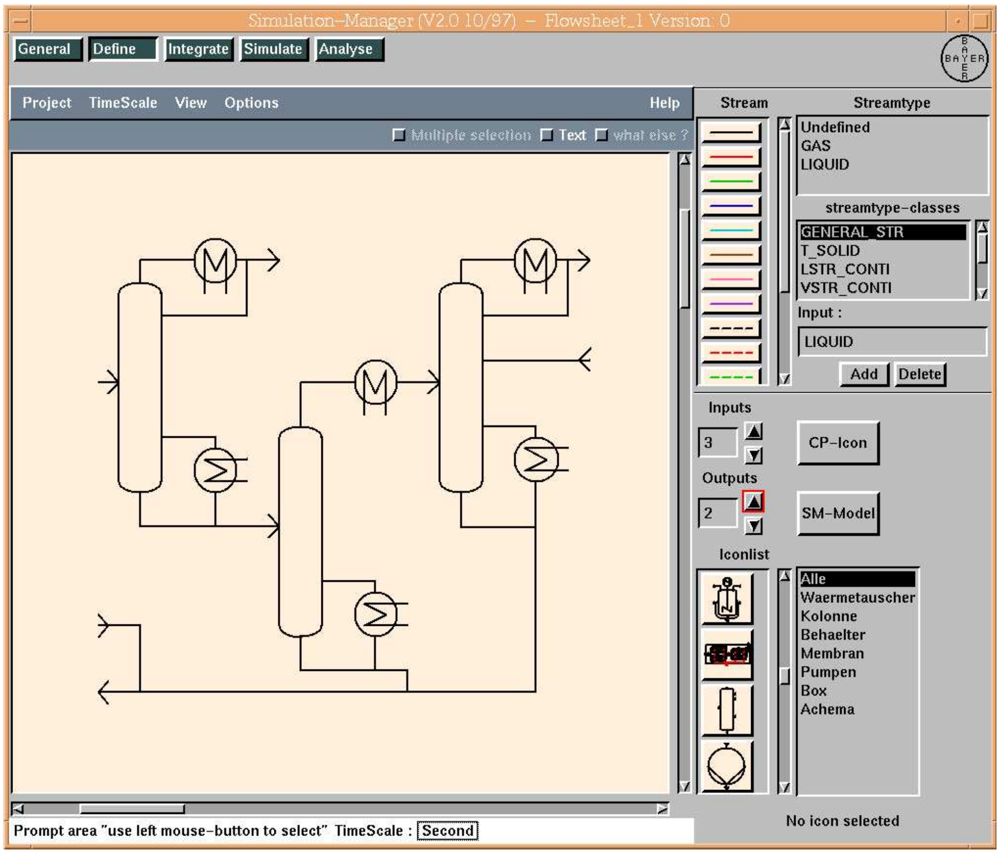


Abb. 1: Simulation Manager

Literatur

1. J. Borchardt, *Parallelized block-structured Newton-type methods in dynamic process simulation*, in: Applied Parallel Computing, PARA'98 (B. Kågström, J. Dongarra, E. Elmroth, L. Waśniewski, Hrsg.), Lecture Notes in Computer Science, No. **1541**, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1998, pp. 38–42.

2. J. Borchardt, K. Ehrhardt, F. Grund, D. Horn, *Parallel modular dynamic process simulation*, WIAS-Preprint No. 439, 1998.

3. J. Borchardt, F. Grund, D. Horn, *Parallelized methods for large nonlinear and linear systems in the dynamic simulation of industrial applications*, erscheint in: Surveys Math. Indust.

4. F. Grund, J. Borchardt, D. Horn, T. Michael, *Numerische Methoden in der Prozeßsimulation*, in: GAMM 97, Annual Meeting (R. Mennicken, F. Pfeifer, Hrsg.), Vol. **78**, Suppl. 3 of Z. Angew. Math. Mech., Wiley-VCH Berlin, 1998, pp. 929–930.

5. D. Horn, *Entwicklung einer Schnittstelle für einen DAE-Solver in der chemischen Verfahrenstechnik*, in: Software Engineering im Scientific Computing (W. Mackens, S. M. Rump, Hrsg.), Friedr. Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft mbH, Braunschweig/Wiesbaden, 1996, pp. 249–255.

pdelib - Algorithmen und Softwarekomponenten für die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen

Bearbeiter: J. Fuhrmann, H. Langmach, Th. Koprucki, I. Schmelzer

Im Rahmen dieses Projektes wurde *pdelib*, ein System von Softwarekomponenten für die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen, in enger Zusammenarbeit mit den Anwendern weiterentwickelt. Das Konzept *pdelib* wurde auf dem GAMM-Seminar zum Thema *Concepts of Numerical Software* vorgestellt [1].

Softwareentwicklung. Der objektorientierte und zugleich modulare bottom-up-Entwurf von *pdelib* ermöglicht eine hohe Wiederverwendbarkeit einzelner Teilkomponenten. Die Wiederverwendbarkeit von objektorientierter Software ist auch Ziel der Methodik der Design Patterns nach Gamma [2]. Eine Analyse (vgl. [1]) von *pdelib* mittels dieser Methodik hat zu weiteren Verbesserungen der Schnittstellen beigetragen. Zugleich lassen sich hieraus Strategien für eine konsequente Weiterentwicklung ableiten.
Neben der Pflege bestehender Komponenten sind folgende Erweiterungen zu nennen: die Schnittstelle zur Skriptsprache *lua*, die Anbindung der Gitterverwaltung des adaptiven Finite-Elemente-Programms ALBERT, die Anbindung von Eigenwertproblem-Solvern aus LAPACK.
Die Skriptsprache *lua* [3] ermöglicht im Anwendungsprogramm ein komfortables Set-up aller Parameter sowie die Realisierung von kommandogesteuerten Simulatoren. Die Schnittstelle zu *lua* wurde so entworfen, daß diese als Ausgangspunkt für eine CORBA-konforme Objektverwaltung dienen kann. Prinzipiell ließen sich auf dieser Grundlage im Rahmen industriefinanzierter Auftragsprojekte graphische Benutzeroberflächen realisieren.
Auf der Basis von *pdelib*-Komponenten wurden im Institut u. a. folgende Projekte bearbeitet:

- Adaptive Verfahren für Transportprozesse in porösen Medien (siehe S. 69),
- Systeme viskoser nichtlinearer Erhaltungsgleichungen (siehe S. 143),
- Gekoppelter Fluid- und Wärmetransport (siehe S. 141),
- Wärmebehandlung von Stahl (siehe S. 144),
- Widerstandsschweißen (siehe S. 137),
- Kristallzüchtung (siehe S. 135),
- Halbleitergleichungen (siehe S. 23),
- Bandstrukturberechnungen für Halbleiter-Heterostrukturen (*kplib*) (siehe S. 146),
- Approximation und Optimierung von Platten (siehe S. 139).

Zur besseren Unterstützung der Projekte wurden die wiederverwendbaren Problembeschreibungsklassen *sysconlaw* (siehe S. 143) und *hamilton* bereitgestellt.

Literatur

1. J. Fuhrmann, Th. Koprucki, H. Langmach, *pdelib: An open modular tool box for the numerical solution of partial differential equations. Design patterns,* erscheint in: Proceedings of the 14th GAMM Seminar on Concepts of Numerical Software, January 23-25, 1998, Notes on Numerical Fluid Mechanics, Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft mbH, Braunschweig/Wiesbaden.

2. E. GAMMA, R. HELM, R. JOHNSON, J. VLISSIDES, *Design patterns. Elements of reusable object-oriented software*, Addison Wesley Longman, Bonn, 1994, pp. 1–395.

3. R. IERUSALIMSCHY, L. H. DE FIGUEIREDO, W. CELES *Lua - an extensible extension language*, in: Software Practice & Experience, **26** 1996, No. 6, pp. 635–652.

   URL: http://www.tecgraf.puc-rio.br/lua/.

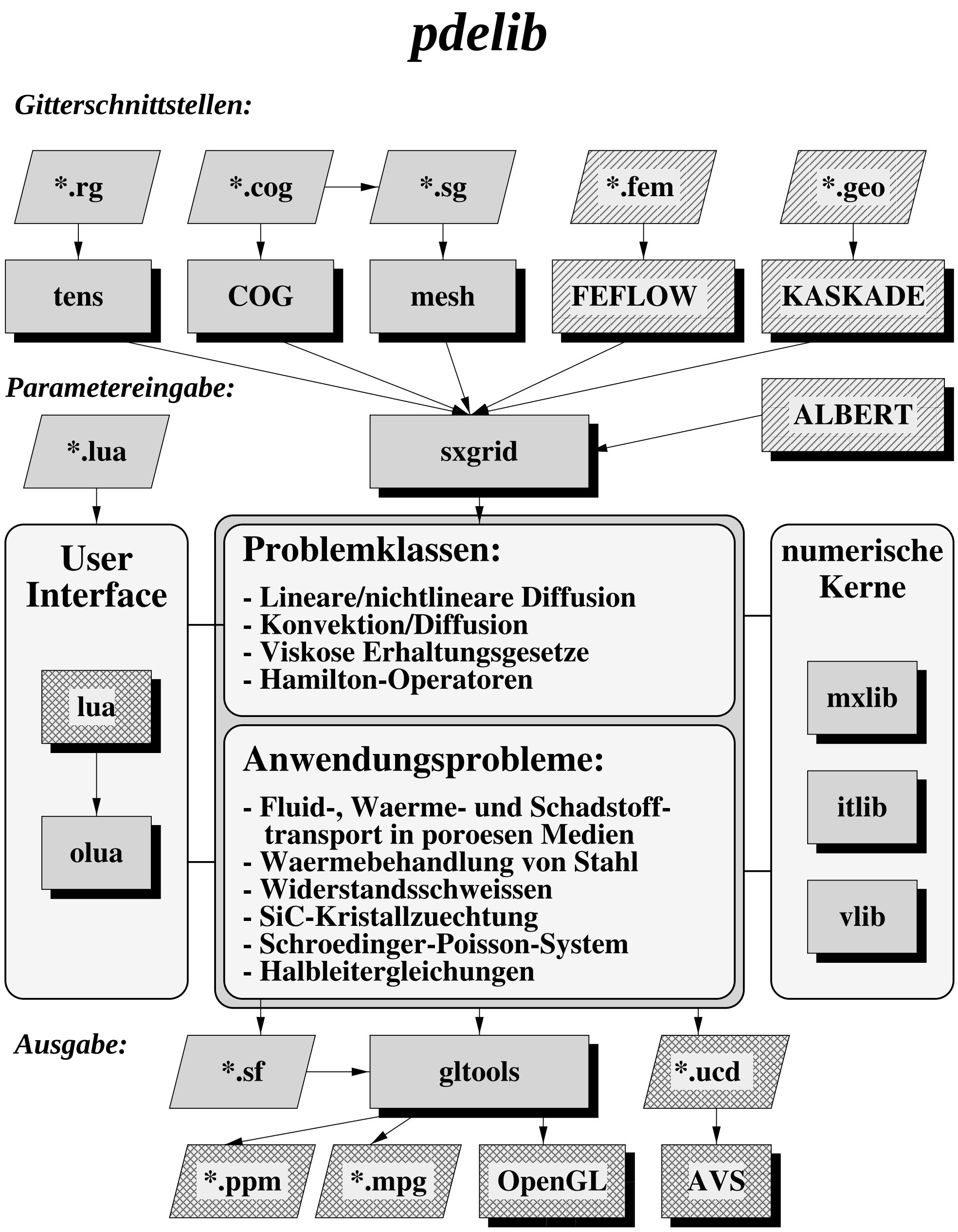


Abb. 1: Struktur von *pdelib*

Simulation von monolithisch integrierten Mikrowellenschaltungen und Multi-Chip-Moduln

Bearbeiter: G. Hebermehl, R. Schlundt

Kooperation: W. Heinrich, M. Kunze, T. Tischler, H. Zscheile (Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik), W. Bruns (Technische Universität Berlin)

Die Arbeiten zur Simulation von Mikrowellenschaltungen wurden fortgesetzt. Der wachsende Markt für die Mobilkommunikation, die Sensor- und Radartechnik stimuliert die Entwicklung verbesserter und akkurat arbeitender Tools zur Berechnung der Eigenschaften individueller monolithisch integrierter Chips (MMICs), von Multi-Chip-Moduln und Gehäusen.

Die zu untersuchenden Strukturen können als Verbindung unendlich langer Wellenleiter beschrieben werden, die longitudinal homogen sind. Die Koppelung (die sogenannte Diskontinuität) der Wellenleiter ist von beliebiger Struktur. Einlaufende Moden werden in der Diskontinuität verändert. Das Verhalten der Moden der Struktur wird durch eine Streumatrix beschrieben, die aus der orthogonalen Dekomposition

$$\int\limits_{\Omega} (\vec{E}_t^{(l)} \times \vec{H}_t^{(m)}) \cdot d\vec{\Omega} = \eta_m \delta_{l,m}, \quad k_{z_l} \neq k_{z_m}, \quad k_z \quad \text{Ausbreitungskonstante},$$

des elektrischen Feldes an zwei benachbarten Schnittebenen auf jedem Wellenleiter für eine Anzahl linear unabhängiger Erregungen extrahiert wird.

Um das elektromagnetische Feld und damit die Streumatrix berechnen zu können, wird ein dreidimensionales Randwertproblem für die Integralform der Maxwellschen Gleichungen formuliert. Zu den Maxwellschen Gleichungen werden die konstitutiven Relationen addiert. Durch die Einführung magnetischer Ladungen und damit magnetischer Stromdichten in die Maxwellschen Gleichungen wurde das Modell erweitert, so daß auch Perfect-Matched-Layer-Anisotropic-Absorber-Randbedingungen (spezielle Absorbing-Boundary-Bedingungen) berücksichtigt werden, um offene Strukturen besser behandeln zu können:

$$\begin{aligned}
\oint_{\partial\Omega} \vec{H} \cdot d\vec{s} &= \int_{\Omega} j\omega([\varepsilon] + \frac{[\kappa_e]}{j\omega})\vec{E} \cdot d\vec{\Omega}, & \oint_{\cup\Omega} ([\underline{\varepsilon}]\vec{E}) \cdot d\vec{\Omega} &= 0, \\
\oint_{\partial\Omega} \vec{E} \cdot d\vec{s} &= -\int_{\Omega} j\omega([\mu] + \frac{[\kappa_m]}{j\omega})\vec{H} \cdot d\vec{\Omega}, & \oint_{\cup\Omega} ([\underline{\mu}]\vec{H}) \cdot d\vec{\Omega} &= 0,
\end{aligned}$$

$$\vec{B} = [\mu]\vec{H}, \quad \vec{D} = [\varepsilon]\vec{E}, \quad \vec{J} = [\kappa_e]\vec{E}, \quad \vec{G} = [\kappa_m]\vec{H}.$$

Im Falle der Absorbing-Boundary-Bedingungen sind die Permeabilität $[\mu]$, die Permittivität $[\varepsilon]$ und die Konduktivitäten $[\kappa_e]$ sowie $[\kappa_m]$ Tensoren, sonst skalare Funktionen des Ortes. Wenn die Leitfähigkeit Null ist, haben wir ein reelles Problem zu lösen, anderenfalls sind alle Rechnungen im Komplexen durchzuführen.

An den Toren ist das transverse elektrische Feld gegeben durch die Superposition der transversalen Wellenleitermoden, die noch zu berechnen sind, bevor das Randwertproblem gelöst werden kann (Wellenleiter-Randbedingung). Alle anderen Teile des Randes werden als elektrische oder magnetische Wand interpretiert. Im Fall der Absorbing-Boundary-Bedingungen werden an diesen Teilen des Randes mehrere Schichten mit anisotropem Material definiert, in denen sich die auslaufenden Wellen abschwächen:

$$\vec{E}_t(z_p) = \sum_{l=1}^{m^{(p)}} w_l(z_p)\vec{E}_{t,l}(z_p), \quad \vec{E}_{tang} = 0 \quad \text{oder} \quad \vec{H}_{tang} = 0, \quad \frac{[\varepsilon]}{\varepsilon_0} = \frac{[\mu]}{\mu_0}.$$

Die Simulation der Schaltungen stellt extreme Anforderungen an die räumliche Auflösung, da neben Details im Submikrometerbereich Abmessungen im Millimeterbereich zu erfassen sind. Zur Einteilung des Gebietes werden nichtäquidistante Quadergitter verwendet. Die Diskretisierung der Gleichungen erfolgt mit Hilfe einer Finite-Volumen-Methode und führt auf hochdimensionale lineare Gleichungssysteme mit schwachbesetzten indefiniten reellen oder komplexen symmetrischen Koeffizientenmatrizen.

Auf Grund der longitudinalen Homogenität der Wellenleiter wird von einem exponentiellen Ansatz für die longitudinale Richtung ausgegangen:

$$\vec{E}(x,y,z \pm 2h) = \vec{E}(x,y,z)e^{\mp jk_z 2h}.$$

Die Substitution dieses Ansatzes in das lineare Gleichungssystem für die Berechnung der Wellenleiter-Randbedingung ergibt zusammen mit der Eliminierung der longitudinalen Komponenten des elektrischen Feldes unter Verwendung der elektrischen Divergenzgleichung ein schlecht konditioniertes Eigenwertproblem mit schwachbesetzten nichtsymmetrischen reellen oder komplexen (verlustbehafteter Fall) Matrizen zur Berechnung der ausbreitungsfähigen Moden k_z:

$$C\underline{\vec{e}} = \gamma\underline{\vec{e}}, \quad \gamma = -4\sin^2(k_z h).$$

Im Falle entarteter Eigenwerte wird eine Gram-Schmidt-Orthogonalisierung für die Eigenfunktionen bezüglich der Orthogonalitätsbedingung durchgeführt.
Mit Hilfe des Independent Set Orderings wird eine Ähnlichkeitstransformation des Eigenwertproblems vorgenommen und dadurch eine Aufspaltung der während der inversen Iteration im Arnoldi-Verfahren zu lösenden linearen Gleichungssysteme erreicht.

Durch die Verwendung von vier verschiedenen Arten auf die Aufgabe zugeschnittener Vorkonditionierer, insbesondere durch die Verbesserung des Independent Set Orderings, konnten die Rechenzeiten für die Lösung der linearen Gleichungssysteme ($3 * 10^6$ Unbekannte) in Zusammenhang mit Krylov-Verfahren weiter reduziert werden.

An der Lösung des Randwertproblems mit Absorbing-Boundary-Bedingungen wird noch gearbeitet.

Die Ergebnisse der Forschungsarbeiten wurden in den Publikationen [3–7] dargestellt.

Literatur

1. K. Beilenhoff, W. Heinrich, H. L. Hartnagel, *Improved finite-difference formulation in frequency domain for three-dimensional scattering problems*, IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, **40** (1992), No. 3, pp. 540–546.

2. A. Christ, H. L. Hartnagel, *Three-dimensional finite-difference method for the analysis of microwave-device embedding*, IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, MTT-**35** (1987), No. 8, pp. 688–696.

3. G. Hebermehl, R. Schlundt, H. Zscheile, W. Heinrich, *Improved numerical methods for the simulation of microwave circuits*, erscheint in: Surveys on Math. Indust.

4. ——, *Computation of eigen modes for transmission lines*, in: Report of the Workshop Scientific Computing in Electrical Engineering (P. Deuflhard, H. Gajewski, G. Hebermehl, W. Heinrich, A. Kost, U. Langer, T. Weiland, Hrsg.), WIAS-Report No. **16**, Berlin, 1998, pp. 34–35.

5. ——, *Numerical solution of the eigenmode problem for microwave transmission lines*, in: Proceedings of the Fourth International Conference on Mathematical and Numerical Aspects of Wave Propagation (John A. DeSanto, Hrsg.), Golden, Colorado, USA, SIAM, Philadelphia, 1998, pp. 606–608.

6. ——, *Improved numerical methods for the simulation of microwave circuits*, WIAS-Preprint No. 467, 1998.

7. R. Schlundt, G. Hebermehl, H. Zscheile, W. Heinrich, *On the computation of systems of linear algebraic equations for monolithic microwave integrated circuits*, in: Report of the Workshop Scientific Computing in Electrical Engineering (P. Deuflhard, H. Gajewski, G. Hebermehl, W. Heinrich, A. Kost, U. Langer, T. Weiland, Hrsg.), WIAS-Report No. **16**, Berlin, 1998, p. 40.

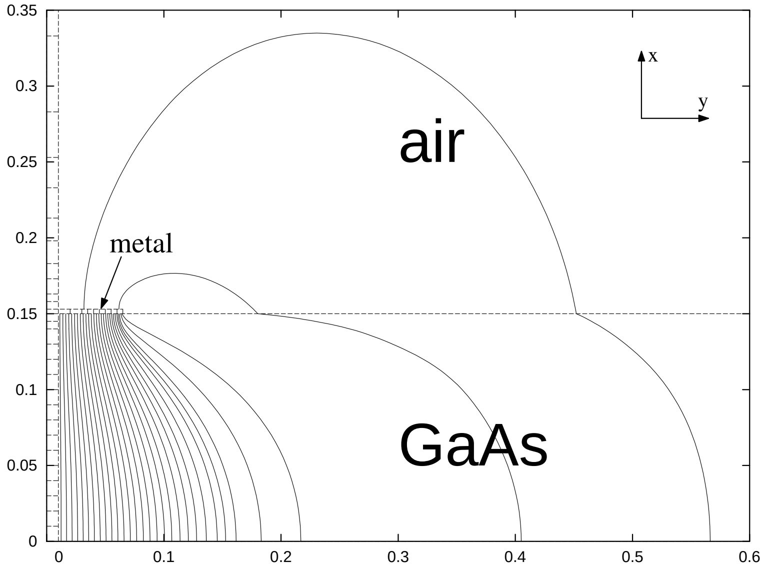


Abb. 1: Durchkontaktierung, Feldlinien einer Mikrostreifen-Mode

Adaptive Verfahren für Transportprozesse in porösen Medien

Bearbeiter: J. Fuhrmann, M. Petzoldt

Kooperation: H. J. Diersch (WASY GmbH, Berlin)

Förderung: BMBF

Viele Transportprozesse in porösen Medien lassen sich mit Hilfe von partiellen Differentialgleichungen der Art

$$\partial_t b(x,u) - \nabla \cdot (k(x,u)\nabla u + \mathbf{q}(x,u)) = f$$

beschreiben. Bei der numerischen Behandlung dieser Verfahren müssen Phänomene wie stark variierende ortsabhängige Koeffizienten, Konvektion und Nichtlinearität beachtet werden.
Ziel des Projektes ist die Weiterentwicklung von adaptiven Algorithmen und Fehlerschätzern für solche Probleme. Es soll eine praxisrelevante, robust behandelbare Unterklasse gefunden und innerhalb des Systems FEFLOW der WASY GmbH implementiert werden. Basis dafür sind aus der Literatur bekannte Fehlerschätzer sowie die Toolbox *pdelib* mit adaptiven Kernen aus KASKADE bzw. ALBERT.
Im Berichtszeitraum wurden ausführliche Untersuchungen zu linearen Diffusionsproblemen mit örtlich variablen Koeffizienten

$$\partial_t u - \nabla \cdot k(x)\nabla u = 0$$

auf der Grundlage theoretischer Überlegungen und numerischer Experimente vorgenommen. Das Hauptproblem besteht dabei im Verlust der H^2-Regularität, die bei den meisten Untersuchungen in der Literatur vorausgesetzt wird. Wir konzentrierten uns auf Fehlerschätzer, die für eine Erweiterung auf unstetige Diffusionskoeffizienten vielversprechend erschienen. Das waren im wesentlichen residuenbasierte Fehlerschätzer [1–3] Unter gewissen Bedingungen können klassische Fehlerschätzer auf Probleme mit unstetigen Diffusionskoeffizienten theoretisch fundiert erweitert werden.
Die von Verfürth vorgeschlagenen Fehlerschätzer erlaubten weiterhin eine Erweiterung auf Diffusions-Konvektions-Reaktions-Probleme. Der reaktive Term kann durch einen bei der Zeitdiskretisierung entstehenden Term ersetzt werden. Diese Technik ermöglicht somit Fehlerschätzer für transiente Probleme.
Die Fehlerschätzer wurden in Testproblemen mit bekannter exakter Lösung getestet. Sie erwiesen sich in diesem Zusammenhang als zuverlässig und robust. Das heißt, daß das Verhältnis vom geschätzten Fehler zum tatsächlichen Fehler 1 bis 4 beträgt, unabhängig vom Verhältnis der Diffusionskoeffizienten und der Größe des reaktiven Terms. Jedoch wurde auch sichtbar, daß bei transienten Problemen zusätzliche Fehler auftreten, die auch mit im Fehlerschätzer berücksichtigt werden müssen.

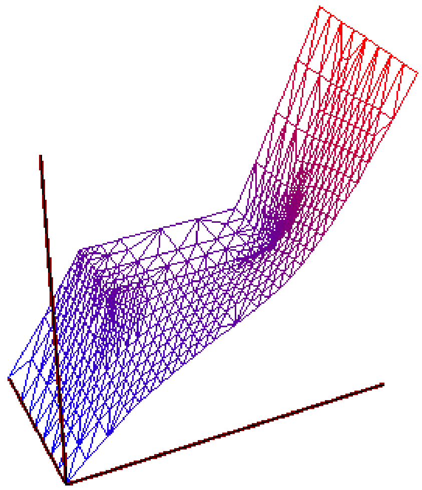


Abb. 1: Lokale Verfeinerung bei springenden Diffusionskoeffizienten

Literatur

1. F. BORNEMANN, B. ERDMANN, R. KORNHUBER, *A posteriori error estimates for elliptic problems in two and three space dimensions*, SIAM J. Numer. Anal., **33** (1996), pp. 1188–1204.

2. R. VERFÜRTH, *A posteriori error estimators for convection-diffusion equations*, Numer. Math., **80** (1998), pp. 641–663.

3. ——, *A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh refinement techniques*, in: Advances in Numerical Mathematics (H. G. Bock, W. Hackbusch, M. Luskin, R. Rannacher, Hrsg.), Wiley Teubner, Stuttgart Leipzig, 1996, pp. 1–126.

Gittergenerierung

Bearbeiter: I. Schmelzer, M. Uhle

Das Geometriebeschreibungs- und Gittergenerierungspaket COG

Die numerische Simulation verschiedenster physikalischer Probleme erfordert eine Diskretisierung des Rechengebietes mit Hilfe von Gittern. Um die im Haus in Zukunft zu erwartenden Anforderungen insbesondere an die Gitterqualität zu meistern, wurde in den letzten Jahren ein Konzept zur Gittergenerierung und Geometriebeschreibung entwickelt. Dieses Konzept war im Softwarepaket IBG erfolgreich implementiert worden. Allerdings ergaben sich Schwierigkeiten bei der exakten Darstellung von Ecken und Kanten, welche die direkte Anwendung von IBG für einige Projekte unmöglich machten. Aufgrund dessen wurde eine Neuimplementierung des Konzepts mit veränderten Datenstrukturen in C++ in Angriff genommen.
Im Berichtszeitraum wurde diese Neuimplementierung – das Software-Paket COG – fertiggestellt [1]. COG erlaubt die Erzeugung von Dreiecks- und Tetraeder-Gittern mit Delaunay-Eigenschaft auch für komplizierte Geometrien, mit Möglichkeiten zur lokalen und anisotropen Verfeinerung. Das neue Paket COG wurde mit den Anwendungsproblemen, die für IBG problematisch waren, getestet. Außerdem stellt COG eine wichtige konzeptionelle Erweiterung dar: Es erlaubt die Kombination verschiedener Teilgitter, wobei jedes Teilgitter durch Verwendung lokaler Koordinaten an die spezielle lokale Situation angepaßt ist. Insbesondere für die Eingabe einfacher Standardgeometrien hat sich im Vergleich zu IBG auch das Nutzer-Interface wesentlich verbessert.

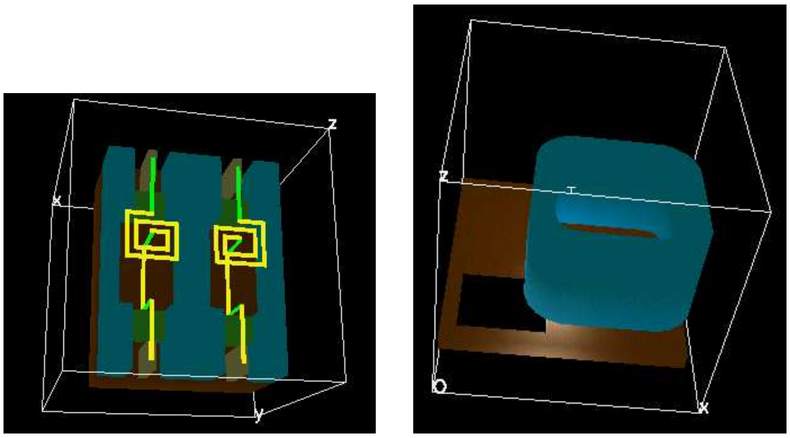


Abb. 1: Von COG erzeugte Gitter für die Testprobleme

Der Gittergenerator LBG

Als weiteres Hilfsmittel steht der Gittergenerator LBG [2] zur Triangulierung allgemeiner zweidimensionaler Geometrien und dreidimensionaler paralleler Schichtstrukturen zur Verfügung.
Basis der Geometriebeschreibung ist die Definition eines zweidimensionalen Gebietes mit Hilfe von drei- und viereckigen Teilgebieten. Werden zusätzliche Angaben zu Schnittebenen und Schichten gemacht, dann ist es möglich, dreidimensionale Geometrien mit paralleler Schichtstruktur zu diskretisieren.
Durch die Zuordnung von Teilungsfaktoren zu Kanten und Schichtebenen wird die Feinheit der

Gitterunterteilung bestimmt. Als finite Elemente stehen Dreiecke, Vierecke, Tetraeder, Prismen und Pyramidenstümpfe mit viereckiger Grundfläche zur Auswahl.
Die Daten der Geometriebeschreibung werden in einem Eingabefile erfaßt. Mit Hilfe verschiedener Steuerbefehle können diese Angaben visuell verifiziert werden.

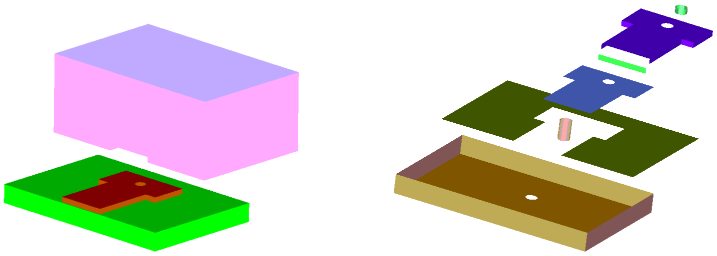


Abb. 2: Darstellung von Materialverteilungen einer dreidimensionalen Schichtstruktur mit LBG

Beide Gittergeneratoren sind über das SimplexGrid2.0-Format an die *pdelib* gekoppelt. Anwender der *pdelib* erhalten dadurch die Möglichkeit, zwischen verschiedenen Gittergenerierungs-Algorithmen wählen zu können.

Literatur

1. Geometriebeschreibungs- und Gittergenerierungspaket COG:
ftp://ftp.wias-berlin.de/pub/cog/index.html

2. Gittergenerator LBG: http://www.wias-berlin.de/pdelib/lbg.html-dir

Lineare Gleichungssysteme

Bearbeiter: F. Grund

Förderung: BMBF

Bei der numerischen Simulation wissenschaftlicher und technischer Vorgänge, die mathematisch durch Systeme partieller Differentialgleichungen bzw. durch Systeme von Algebro-Differentialgleichungen beschrieben werden, sind viele lineare Gleichungssysteme mit schwachbesetzten Koeffizientenmatrizen zu lösen. Die Struktur der linearen Systeme bleibt zusätzlich während der Simulation erhalten. Lineare Systeme, die bei der Diskretisierung von Algebro-Differentialgleichungen entstehen, haben im allgemeinen Matrizen, die keine Struktureigenschaften besitzen, weshalb mit dem Gaußschen Eliminationsverfahren gearbeitet wird und Sparse-Matrix-Techniken verwendet werden. Für die numerische Stabilität ist eine geeignete Pivotreihenfolge zu bestimmen. Im Gegensatz zu den Systemen mit vollbesetzten Matrizen, wo die numerische Komplexität der Verfahren immer $O(n^3)$ ist, kann bei Systemen mit schwachbesetzten Matrizen durch eine günstige Pivotreihenfolge, die auch das Fill-in minimiert, die Komplexität dramatisch verringert werden [2]. Hierzu ist in jedem Schritt mit einem heuristischen Verfahren die Pivotspalte zu bestimmen. Es gelang, ein Verfahren zu finden, das statt bisher mit einer quadratischen Komplexität nun mit einer linearen Komplexität arbeitet. Die Rechenzeit für die erste Faktorisierung konnte dadurch entscheidend beschleunigt werden. Auf einem DEC AlphaServer (Prozessor 21164A mit 400 MHz) wurden die in Tabelle 1 gezeigten CPU-Zeiten (in Sekunden) gefunden [1]. Mit $|A|$ wird die Anzahl der Nichtnullelemente bezeichnet.

Matrix	n	$\|A\|$	bisher	neu
bayer01	57 735	277 774	34.92	2.35
bayer02	13 935	63 679	2.20	0.55
bayer03	6 747	56 196	0.67	0.30
bayer04	20 545	159 082	5.18	1.82

Tab. 1: CPU-Zeiten für erste Faktorisierung

Literatur

1. J. Borchardt, K. Ehrhardt, F. Grund, D. Horn, *Parallel modular dynamic process simulation*, erscheint in: Scientific Computing in Chemical Engineering II (F. Keil, W. Mackens, H. Voss, J. Werther, Hrsg.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York.

2. F. Grund, *Direct linear solver for vector and parallel computers*, erscheint in: VECPAR'98, Springer-Verlag Berlin Heidelberg.

Präsentation und Visualisierung von numerischen Simulationen

Bearbeiter: G. Reinhardt, F.-K. Hübner, J. Fuhrmann

Kooperation: E. Suschke (Humboldt-Universität zu Berlin)

Die Unterstützung bei der Auswertung von Zwischen- und Endergebnissen von Berechnungen großer numerischer Probleme durch Visualisierung in Form von Graphiken, VHS- und MPEG-Videos wurde fortgeführt und vertieft. Die visuelle Darstellung der wissenschaftlichen Ergebnisse in den einzelnen Forschungsgruppen wird mittlerweile als Standard bei der Auswertung der Ergebnisse angesehen und teilweise auch mittels „visueller Verifikation" zur Qualitätsverbesserung der wissenschaftlichen Arbeit genutzt (siehe S. 130 und S. 125).
Bei der visuellen Verifikation numerischer Simulation werden hardware-unterstützte „OpenGL"-Routinen online in die Applikation der Mitarbeiter eingebunden und mittels der Toolkits „gltools" (J. Fuhrmann, FG 3, siehe S. 64) und GLUT (M. J. Kilgard)[2] mit dem X-Window-System verbunden.
Für Arbeiten im Rahmen einer nationalen Kooperation der FG 2 (R. Lauterbach) wurde zusätzlich zum üblich genutzten Visualisierungspaket AVS (Advanced Visual System Inc.) das Paket GRAPE[3] neu installiert.
Mit der Abteilung „Visualisierung und Animation" (Leiter: E. Suschke) des Rechenzentrums der Humboldt-Universität zu Berlin wurde die bewährte Kooperation durch informellen Austausch über graphische Hardware und durch deren gegenseitige Nutzung fortgesetzt.
Zur Verbesserung der Qualität der VHS-Video-Produktion für Präsentationen wurden gemeinsam mit der Gruppe Rechentechnik Überlegungen und Untersuchungen zur Verringerung der Informationsverluste bei der Beschreibung der Video-Bänder angestellt. Das Ergebnis dieser Aktivitäten führte zu der Installation einer neuen Anlage (Workstation SGI O2 mit Zap!iT-System von Alias|wavefront), die die Erstellung von (PAL/NTSC-)Videos (mit einer Laufzeit von ca. 15 Minuten) ermöglicht, die prinzipiell (über Adapter) ohne Kompression auf die verschiedenen analogen und digitalen Video-Systeme (VHS, S-VHS, Betacam-SP, D2, ...) übertragen werden können.

[2]http://reality.sgi.com/mjk_asd/OpenGLforX.html
[3]http://www.mathematik.uni-freiburg.de/GRAPE/grape.html

4.4 Forschungsgruppe Integralgleichungen und Pseudodifferentialgleichungen

4.4.1 Zusammenfassung

Die Arbeit der Forschungsgruppe konzentriert sich auf die analytische und numerische Behandlung von inversen Problemen und Optimierungsproblemen sowie auf die Entwicklung und effektive Nutzung von Integralgleichungs- und Randelementmethoden in komplexen Anwendungsfeldern der Natur- und Ingenieurwissenschaften. Sie wurde jedoch überschattet durch den unerwarteten Tod des Forschungsgruppenleiters Prof. Dr. Siegfried Prößdorf am 19.7.1998, der einen schmerzlichen und unersetzbaren personellen und wissenschaftlichen Verlust für die Gruppe bedeutet.
Im Berichtszeitraum wurde die Bearbeitung der zentralen Projekte der Gruppe

- Direkte und inverse Probleme der diffraktiven Optik – Optimierung binärer Gitter,
- Optimierungsprobleme mit zufälligen und nichtglatten Daten – Integrierte Kolonnensysteme unter Echtzeitbedingungen

erfolgreich weitergeführt. Diese Anwendungsprojekte wurden durch das BMBF-Mathematikprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“ bzw. das DFG-Schwerpunktprogramm „Echtzeitoptimierung großer Systeme“ gefördert. Weitere Schwerpunkte der Forschung lagen auf den Gebieten

- Inverse Probleme der Hydrodynamik und Seismik,
- Waveletalgorithmen – Anwendungen auf geodätische Randwertprobleme,
- Integralgleichungsmethoden in der Elastizitätstheorie.

Diese Arbeiten wurden im Rahmen interdisziplinärer Projekte, in internationaler Forschungskooperation und/oder mit Förderung durch die DFG und den DAAD durchgeführt.

4.4.2 Projekte

Direkte und inverse Probleme für diffraktive Strukturen in der Optik

Bearbeiter: J. Elschner, R. Hinder, G. Schmidt

Kooperation: H.-J. Rostalski (Raytek GmbH Berlin), B. Kleemann (Carl Zeiss Oberkochen), F. Wyrowski (Universität Jena), J. Bischoff (Carl Zeiss Jena)

Förderung: BMBF

Ziel des Projekts ist die analytische und numerische Behandlung direkter und inverser Beugungsprobleme an binären optischen Gittern auf Dünnschichtsystemen. Solche mikrooptischen Elemente realisieren optische Eigenschaften und Funktionen, die mit traditionellen optischen Elementen nicht erreichbar sind (Laserkollimation und Modenformung, Strahlteilung, Polarisationsschalter).

1. Behandlung der konischen Diffraktion

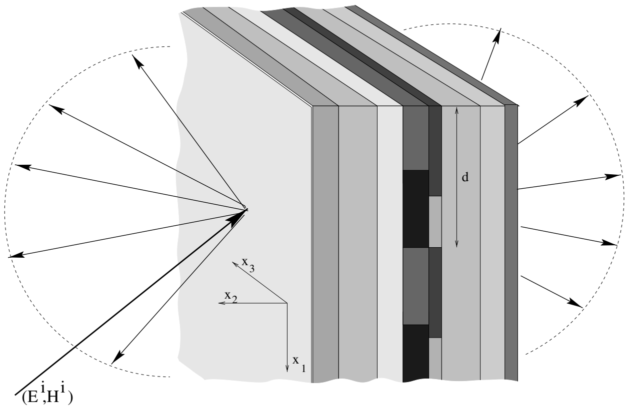


Abb. 1: Konische Diffraktion am periodischen Beugungsgitter

Das Beugungsgitter wird durch eine periodische, stückweise konstante Funktion ε charakterisiert, die sich aus den Dielektrizitätskonstanten der unterschiedlichen Materialien zusammensetzt. Eine einfallende ebene Welle wird durch das Gitter gebeugt, wobei endlich viele ausfallende Wellen reflektiert bzw. transmittiert werden. Die Modellierung erfolgt mittels der zeitharmonischen Maxwellschen Gleichungen mit den bekannten Stetigkeitsbedingungen an den Materialgrenzen und Ausstrahlungsbedingungen im Unendlichen.
In [4] wird die Äquivalenz des Transmissionsproblems für die Maxwellschen Gleichungen im $\mathbb{R}^3$ zu einem System von zwei Variationsgleichungen im $\mathbb{R}^2$ gezeigt. Die Analysis des Variationsproblems liefert eine vollständige Lösbarkeitstheorie für das Problem der konischen Diffraktion sowie Aussagen zur analytischen Abhängigkeit der Lösung von Frequenz und Einfallswinkeln. Außerdem werden die Singularitäten des elektromagnetischen Feldes an den Kanten genau bestimmt. Die starke Elliptizität der entsprechenden Bilinearform für alle physikalisch relevanten Gittermaterialien sichert die Konvergenz von Finite-Element-Verfahren zur Wirkungsgradberechnung von periodischen Gittern bei konischem Einfall ebener Wellen.

2. Weitere analytische Untersuchungen des optimalen Design-Problems

Die Kenntnis der Gradienten der Rayleigh-Koeffizienten bezüglich Änderungen des Gitterprofils ist die Grundlage effektiver Optimierungsverfahren zur Bestimmung einer optimalen Gittergeometrie ([1, 3]). In Zusammenarbeit mit S. Nazarov (St. Petersburg) wurde ein neuer Zugang entwickelt, der die Berechnung dieser Größen durch Kurvenintegrale ermöglicht. Dadurch konnten erstmalig effektive Formeln im Falle beliebiger Lösungssingularitäten und mehrerer zusammenstoßender Materialien abgeleitet werden. Dieser Zugang erlaubt auch die Behandlung des optimalen Design-Problems für die konische Diffraktion.

3. Erweiterung des Programmsystems DIPOG zur Lösung direkter und inverser Diffraktionsprobleme bei binären und Multilevel-Gittern

Die auf Gradientenverfahren beruhenden Algorithmen zum optimalen Entwurf von Beugungsgittern bei der klassischen Diffraktion wurden in Zusammenarbeit mit R. Henrion verfeinert, um zusätzliche Restriktionen besser innerhalb des Optimierungsproblems behandeln zu können. Nunmehr kann für Gitter mit vorgegebenen Materialien und bestimmten technologischen Vorgaben die optimale Gittergeometrie durch einen Optimierungszyklus bestimmt werden. Es wurde eine Vielzahl von Zielfunktionen implementiert, so daß die Gitter nach unterschiedlichen Kriterien an das Fernfeld optimiert werden können ([3, 5]). Abbildung 2 zeigt das Ergebnis der Berechnung eines einfachen Strahlteilers, der senkrecht einstrahlendes Licht in fünf gleich starke Strahlen mit vorgegebener Aufspreizung spalten soll.

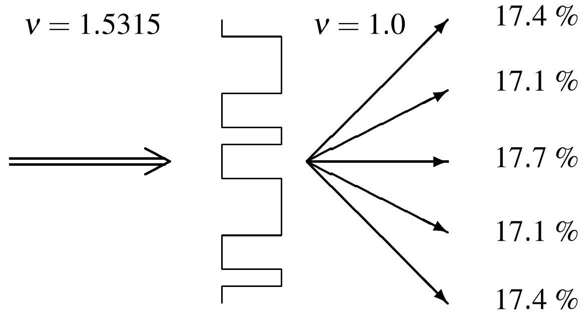


Abb. 2: Optimales Profil eines 1-zu-5 Strahlteilers. Wellenlänge $\lambda = 0.633\mu$m, Periode $d = 1.79\mu$m, Gitterhöhe $H = 0.77\mu$m, Verteilung der Gitterpunkte: $0., 0.12, 0.36, 0.76$

Es wurde ein Code zur Lösung des direkten Problems der konischen Diffraktion implementiert, der eine wichtige Ergänzung des Programmsystems DIPOG darstellt. Grundlage ist eine verallgemeinerte Finite-Element-Diskretisierung des Systems von Variationsgleichungen. Durch den modularen Aufbau von DIPOG konnte auf existierende Routinen zur effektiven Behandlung der nichtlokalen Randoperatoren, zur Minimierung des bei der FE-Lösung auftretenden Defekts zwischen exakter und numerischer Wellenzahl sowie zur effektiven Lösung der nichtsymmetrischen Gleichungssysteme zurückgegriffen werden. Erste Berechnungen für einfache binäre Gitter bei schrägem Einfall des Lichts wurden durchgeführt, wobei teilweise eine starke Abhängigkeit der Effizienz einzelner Moden vom Einfallswinkel auftritt. An der Implementierung von Verfahren zur Behandlung des optimalen Design-Problems bei der konischen Diffraktion wird gegenwärtig gearbeitet.

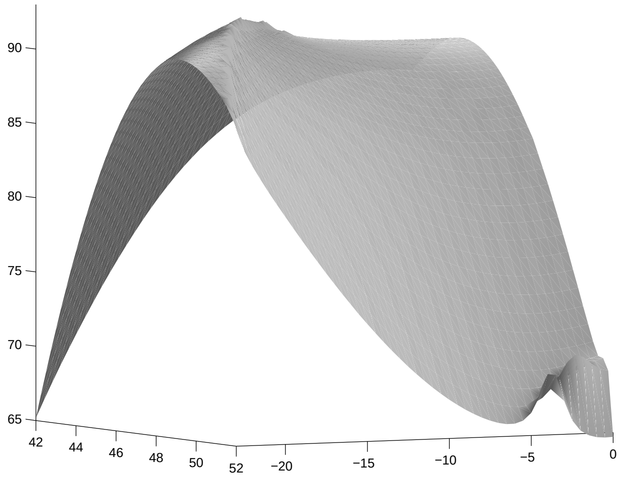


Abb. 3: Effizienz der -2. Ordnung eines Transmissionsgitters in Abhängigkeit von den Einfallswinkeln einer ebenen Welle mit dem Wellenvektor $(\sin\theta\cos\phi, -\cos\theta\cos\phi, \sin\phi)$, $\theta = 42°...52°, \phi = -23°...0°$

Literatur

1. G. BAO, D. DOBSON, *Modeling and optimal design of diffractive optical structures*, erscheint in: Surveys Math. Indust.

2. J. ELSCHNER, G. SCHMIDT, *Diffraction in periodic structures and optimal design of binary gratings. Part I: Direct problems and gradient formulas*, Math. Methods Appl. Sci., **21** (1998), pp. 1297–1342.

3. ——, *Numerical solution of optimal design problems for binary gratings*, J. Comput. Phys., **146** (1998), pp. 603–626.

4. J. ELSCHNER, R. HINDER, F. PENZEL, G. SCHMIDT, *Existence, uniqueness and regularity for solutions of the conical diffraction problem*, WIAS-Preprint Nr. 400, 1998, erscheint in: Math. Models Methods Appl. Sci.

5. H.-J. ROSTALSKI, J. GUHR, B. KLEEMANN, J. ELSCHNER, G. SCHMIDT, M. FERSTL, E. PAWLOWSKI, R. STEINGRÜBER, G. BOSTANJOGLO, R. MOTZKUS, *Use of a multi-layer dielectric diffraction grating as the resonator mirror of a neodymium-doped yttrium aluminium garnet laser*, J. Modern Opt., **45** (1998), pp. 1523–1535.

Optimierungsprobleme mit zufälligen und nichtglatten Daten

Bearbeiter: R. Henrion, A. Möller

Kooperation: W. Römisch (Humboldt-Universität (HU) zu Berlin), G. Wozny (Technische Universität (TU) Berlin), T. Szántai (Technische Universität Budapest)

Förderung: DFG-Schwerpunktprogramm „Echtzeitoptimierung großer Systeme“

1. Schwerpunkt der Arbeit ist die Fortführung des gemeinsam mit Prof. G. Wozny (TU Berlin) und Prof. W. Römisch (HU Berlin) geleiteten DFG-Projekts *Optimierung integrierter Kolonnensysteme unter stochastischen Echtzeitbedingungen*. Gegenstand des Projekts ist die Ermittlung einer energieminimalen Fahrweise von Destillationskolonnen im kontinuierlichen Betrieb, die robust gegenüber wechselnden stochastischen Einflüssen auf den Prozeß ist. Die Abbildung zeigt das Schema einer Pilotanlage an der TU Berlin (energetisch gekoppelte Hoch- und Niederdruckkolonne). Der Zufluß F^{in} (in der Praxis aus vorgelagerten industriellen Prozessen) stellt den wesentlichen stochastischen Parameter mit den beiden Komponenten *Fließgeschwindigkeit* und *Zusammensetzung* dar, in dessen Unkenntnis die für einen bestimmten Planungshorizont optimale Steuerung der Anlage vorauszuberechnen ist.

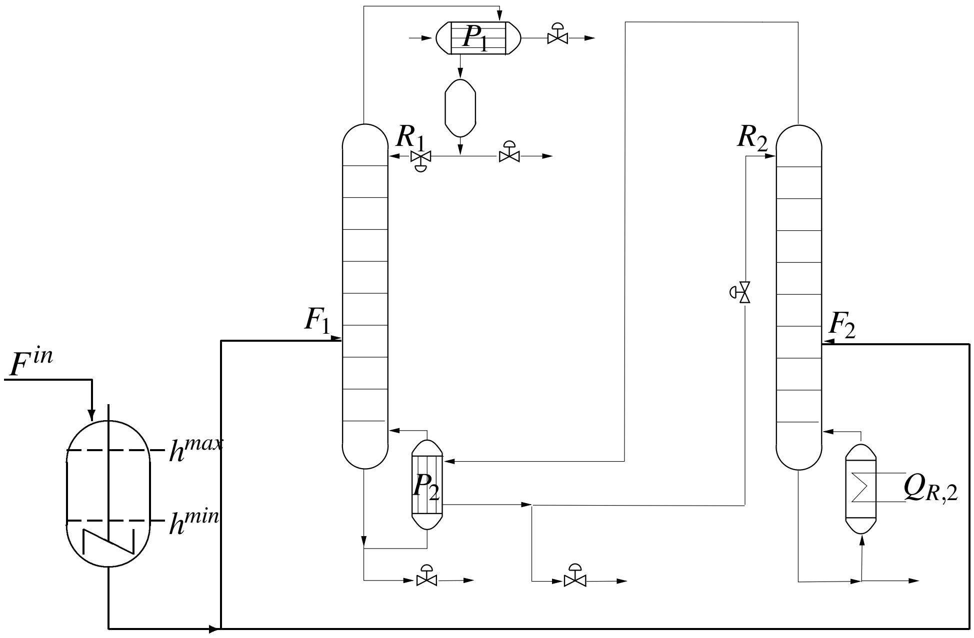


Abb. 1: Fließbild der Versuchsanlage im Parallelbetrieb

Als Konsequenz werden folgende Restriktionen des entstehenden Optimierungsmodells stochastisch: die *Produktspezifikationen* (Mindestreinheiten, in denen die Bestandteile des zu trennenden Gemisches am Kolonnenkopf bzw. im Sumpf vorliegen), die Feed-Tank-Restriktionen (Verhinderung des Voll- oder Leerlaufens des Tanks, siehe Abb.) sowie Zyklusrestriktionen (Vermeidung einer Optimierung zulasten nachfolgender Planungszeiträume). Um zu behandelbaren Nebenbedingungen zu gelangen, wird im Sinne der angestrebten Robustheit der Fahrweise verlangt, daß die Restriktionen entsprechend der Zufallsverteilung des stochastischen Parameters mit einer vorgegebenen Mindestwahrscheinlichkeit einzuhalten sind (Wahrscheinlichkeitsrestriktionen).

2. Im Mittelpunkt der Arbeit im Berichtszeitraum stand die Formulierung eines geeigneten konkreten Optimierungsmodells [1] sowie die numerische Behandlung von Wahrscheinlichkeitsrestriktionen. Letztere Frage wurde intensiv während des einmonatigen Gastaufenthaltes von Prof. T. Szántai in Berlin untersucht. Insbesondere wurden auf der Basis effektiver Methoden zur Berechnung von Werten von Verteilungsfunktionen (z. B. [7]) Varianten zur Einbeziehung zweiter Ableitungen der Restriktionsfunktionen analysiert. Hierdurch soll es gelingen, die Bearbeitung von Wahrscheinlichkeitsrestriktionen aus dem bisher üblichen Rahmen von Verfahren erster Ordnung in den Kontext von SQP-Verfahren zu überführen. Eine konkrete Kopplung mit dem Programmsystem SNOPT [2] wird Gegenstand der weiteren Arbeit sein.

Die Benutzung von (stichproben-basierten) Schätzungen des zugrundeliegenden Wahrscheinlichkeitsmaßes bei der praktischen Umsetzung des oben skizzierten Problems wirft die Frage nach der Stabilität von Lösungen und Optimalwerten in Optimierungsproblemen mit Wahrscheinlichkeitsrestriktionen bei kleinen Störungen des Maßes auf. Hierzu wurden in [3] verifizierbare Bedingungen an das Originalproblem bei Betrachtung allgemeinster Daten hergeleitet (insbesondere sind auch Nichtglattheiten sowohl bei den Restriktionsfunktionen als auch bezüglich des Wahrscheinlichkeitsmaßes berücksichtigt). Für die praktisch relevante Klasse konvexer Probleme mit Wahrscheinlichkeitsrestriktionen, die durch r-konkave Maße induziert werden, konnten entsprechend konkretere Bedingungen sowohl für qualitative [4] als auch für quantitative Stabilität [5] gefunden werden. Die erhaltenen Resultate werfen eine Reihe weiterer Fragen von theoretischem Interesse auf, z. B. unter welchen Bedingungen an die Dichten r-konkave Maße strenge Konvexitätseigenschaften besitzen, oder welche geometrische Struktur Wahrscheinlichkeitsrestriktionen aufweist. Nichtglattheiten von Eingangsdaten sind neben den betrachteten stochastischen Optimierungsproblemen (etwa in Gestalt der Verteilungsfunktion zu empirischen Maßen oder Maßen mit kompaktem Träger) auch in anderen Gebieten wie der semi-infiniten Optimierung typisch. Untersuchungen hierzu wurden im Zusammenhang mit der Charakterisierung der metrischen Regularität von Ungleichungssystemen in [6] vorgenommen.

Literatur

1. H. Arellano Garcia, R. Henrion, P. Li, A. Möller, W. Römisch, M. Wendt, G. Wozny, *A model for the online optimization of integrated distillation columns under stochastic constraints*, Preprint Nr. 98-32 des DFG-Schwerpunktprogramms „Echtzeit-Optimierung großer Systeme“.

2. P. E. Gill, W. Murray, M. A. Saunders, *Large scale SQP methods and their application in trajectory optimization*, in: Computational Optimal Control (R. Bulirsch, D. Kraft, Hrsg.), Birkhäuser, Basel, 1994, pp. 29–42.

3. R. Henrion, W. Römisch, *Metric regularity and quantitative stability in stochastic programs with probabilistic constraints*, Math. Programming, **84** (1999), pp. 55–88.

4. R. Henrion, *Qualitative stability of convex programs with probabilistic constraints*, WIAS-Preprint Nr. 460, eingereicht bei: Proceedings 9^{th} *Belgian-French-German Conference on optimization*, Namur, Belgien, 1998.

5. R. HENRION, W. RÖMISCH, *Stability of solutions to chance constrained stochastic programs*, WIAS-Preprint Nr. 397, eingereicht bei: Proceedings *Parametric Optimization and Related Topics V*, Tokio, Japan, 1997.

6. D. KLATTE, R. HENRION, *Regularity and stability in nonlinear semi-infinite optimization*, in: Semi-Infinite Programming (R. Reemtsen, J. Rückmann, Hrsg.), Kluwer, Dordrecht, 1998, pp. 69–102.

7. T. SZÁNTAI, A. HABIB, *On the* $k-out-of-r-from-n:F$ *System with unequal element probabilities*, in: New Trends in Mathematical Programming (F. Gianessi et al., Hrsg.), Kluwer, Dordrecht, 1998, pp. 289–303.

Inverse Probleme der Hydrodynamik und Seismik

Bearbeiter: G. Bruckner, S. Prößdorf†

Kooperation: H.-J. Diersch (WASY GmbH), S. V. Pereverzev (Ukrainische Akademie der Wissenschaften, Kiew), M. Yamamoto (Universität Tokio)

1. Effektive numerische Verfahren zur Lösung von Integralgleichungen erster Art

Die Integralgleichung mit logarithmischem Kern,

$$-\frac{1}{\pi}\int_{\partial\Omega} \ln|x-y|\phi(y)ds(y) = f(x), \quad x \in \partial\Omega,$$

die auch Symmsche Integralgleichung genannt wird, ist die äquivalente potentialtheoretische Formulierung des Dirichlet-Problems für die Laplace-Gleichung in dem ebenen Gebiet Ω. Damit besitzt sie ein breites Anwendungsspektrum auf stationäre, homogene Probleme der Hydrodynamik, Elektrodynamik und Elastizitätstheorie.

In konkreten Anwendungen unterliegen die Daten f Meßfehlern, und auch die Randkurve $\partial\Omega$ ist mitunter nur näherungsweise gegeben. Diesen Umstand hat man wegen der Schlechtgestelltheit der Symmschen Integralgleichung bei ihrer numerischen Lösung zu berücksichtigen.

In [4] werden für die Symmsche Integralgleichung vollständig diskretisierte Regularisierungsverfahren begründet, die ökonomisch in Bezug auf den Rechenaufwand und von optimaler Konvergenzordnung sind. Die Stabilisierung erfolgt dabei durch geeignete Wahl des Diskretisierungsparameters. Verfahren dieser Art sind auch auf andere Integralgleichungen erster Art anwendbar.

2. Zur Gewinnung von Aussagen über die Bodendurchlässigkeit aus unvollständig gegebenen Meßdaten

Ausgangspunkt der Untersuchungen ist die Arbeit [1], die aus dem Projekt „Bestimmung der Bodendurchlässigkeit aus Wasserständen" des Jahres 1996 entstanden ist. In [1] wurde die direkte Inversionsmethode von Vainikko für die stationäre zweidimensionale Diffusionsgleichung kombiniert mit einer die a-priori-Information einbeziehenden Methode der Datenglättung. Erforderlich war eine solche Kombination, da die gegebenen Meßdaten im allgemeinen nicht auf allen Knoten der Diskretisierung gegeben sind, wie es die Methode von Vainikko verlangt hätte. In [1] kommentierte Beispielrechnungen ergaben erstens, daß man durchaus auch mit weniger Meßdaten brauchbare Ergebnisse erhalten kann, und zweitens, daß es für lokale Aussagen genügt, wenn lokal ausreichend viele Meßdaten gegeben sind.

Für den Anwender sind Aussagen über die Bodendurchlässigkeit aus Messungen des Wasserstandes (Potentialmessungen) von großem Interesse, da solche Messungen meist ohnehin vorhanden oder mit relativ geringem Aufwand zu beschaffen sind.

Optimal wäre die Beantwortung der folgenden Frage: Gegeben seien ein Block von geologischen Informationen und ein Satz von Meßdaten. Welche zusätzlichen Messungen müssen mindestens durchgeführt werden, um (global oder lokal) die Bodendurchlässigkeit bestimmen zu können? Da der Anwender an Aufwandsminimierung interessiert sein muß, liegt hier die Betonung auf dem Wort „mindestens".

Als Teilaspekte dieser komplexen Aufgabenstellung sind auch negative Feststellungen von Interesse, etwa von der Art: Gibt es in einem Teilgebiet keine Messungen, so kann für dieses Teilgebiet nichts ausgesagt werden.

Der rigorose Beweis dieser anschaulich recht plausiblen Feststellung führt mathematisch auf die Frage der Sensibilität des direkten Problems. Das (finite-Elemente-)diskretisierte direkte Problem lautet

$$L\mathbf{u} = \mathbf{d},$$

wo $\mathbf{u}$ der Vektor der Potentialwerte in den Knotenpunkten, $\mathbf{d}$ die aus Quellen und Senken im Gebiet sowie Zu- und Abflüssen durch den Rand gebildeten rechten Seiten und L eine schwach besetzte Matrix sind. In L gehen die auf jedem finiten Element als konstant vorausgesetzten Durchlässigkeiten ein.

Fixiert man eines der finiten Elemente F_0 und betrachtet die Ableitung nach der F_0 zugeordneten Durchlässigkeit, so ergibt sich

$$\mathbf{u}' = L^{-1}L'L^{-1}\mathbf{d}.$$

Aufgrund der „lokalen“ Bauart der Matrix L' erhält man für den beliebigen Knoten X

$$u'_X = \sum_P \Lambda_{XP} a_P,$$

wobei die Summation über die Knoten P von F_0 läuft, a_P von Null verschieden ist und nur von F_0 abhängt und Λ_{XP} die Einträge in die Matrix L^{-1} sind.

Bewegt sich X von F_0 weg, so kann aus einem Abklingverhalten von Λ_{XP}, $P \in F_0$ fixiert, folglich auf ein Abklingen von u'_X geschlossen werden.

Ein solches Abklingverhalten bei Inversen von Fast-Diagonal-Matrizen wurde in Arbeiten zur Wavelet-Analyse von anderen Autoren theoretisch fundiert (vgl. [5]). Auf die Matrix L läßt sich diese Theorie jedoch nicht unmittelbar anwenden. Das erfordert eine noch ausstehende geeignete Modifizierung, die es möglich macht, das Abklingen auch quantitativ genau zu untersuchen.

Das Abklingverhalten wird durch Rechenbeispiele veranschaulicht.

3. Zur Bestimmung von Punktquellen in der Wellengleichung: Einzigkeit, Stabilität und numerische Verfahren

Hier untersuchen wir das inverse Problem der Rekonstruktion von Punktquellen

$$\{N, \alpha_1, \cdots, \alpha_N, x_1, \cdots, x_N\}$$

in der Wellengleichung

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x,t) &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t) + \lambda(t) \sum_{k=1}^{N} \alpha_k \delta(x - x_k), \quad 0 < x < 1, 0 < t < T, \\
u(x,0) &= 0, \;\; u'(x,0) = 0, \quad 0 < x < 1, \\
u(0,t) &= u(1,t) = 0, \quad 0 < t < T,
\end{aligned}$$

aus der Beobachtung von $u(\eta,t)$ in einem fixierten Punkt $\eta \in (0,1)$. Dabei sind $\lambda \in C^1[0,T]$, $\lambda(0) \neq 0$, $\alpha_k \in \mathbb{R}$ und $x_k \in (0,1)$.

Im Falle, daß die Funktion λ exakt gegeben ist, werden in [2] Einzigkeit für irrationales η und eine Stabilitätsabschätzung in der $H^1(0,T)$-Norm der Beobachtung bewiesen. Die

Stabilitätsabschätzung kann dabei nur unter zusätzlichen Bedingungen an die Unbekannten $\{x_1, \cdots, x_N\}$ gezeigt werden. Außerdem leiten wir numerische Verfahren ab, die stabil sind gegenüber $L^2(0,T)$-Beobachtungsfehlern.

Der Fall, daß die Funktion λ nicht exakt, sondern nur näherungsweise gegeben ist, wird in Hinsicht auf stabile numerische Verfahren in [3] betrachtet. Dazu zerlegen wir das Problem in einen gutgestellten und einen schlechtgestellten Anteil und formulieren den schlechtgestellten Anteil als Integralgleichung erster Art mit gestörtem Kern. Das der Behandlung einer solchen Integralgleichung zugrundeliegende Konzept ist auf eine ganze Klasse von Operatorgleichungen anwendbar.

Literatur

1. G. BRUCKNER, S. HANDROCK-MEYER, H. LANGMACH, *An inverse problem from 2d ground-water modelling*, Inverse Problems, **14** (1998), pp. 835–851.

2. G. BRUCKNER, M. YAMAMOTO, *Determination of point wave sources by pointwise observations: Stability and reconstruction*, WIAS-Preprint Nr. 441, 1998.

3. ——, *On an operator equation with noise in the operator and the right-hand side with application to an inverse vibration problem*, WIAS-Preprint Nr. 407, 1998.

4. S. V. PEREVERZEV, S. PRÖSSDORF†, *On the characterization of self-regularization properties of a fully discrete projection method for Symm's integral equation*, WIAS-Preprint Nr. 394, 1998.

5. P. TCHAMITCHIAN, *Wavelets, functions and operators*, in: Wavelets: Theory and applications, (G. Erlebacher, M. Y. Hussaini, L. Jameson, Hrsg.), ICASE/LaRC Series in Computational Science and Engineering, Oxford University Press, 1996, pp. 83–181.

Waveletalgorithmen für die Randelementmethode

Bearbeiter: S. Prößdorf†, A. Rathsfeld, J. Schult

Kooperation: W. Keller (Geodätisches Institut der Universität Stuttgart)

Förderung: DFG-Projekt „Adaptive Multiskalenmethoden“

In theoretischen Untersuchungen sowie in numerischen Tests hat es sich erwiesen, daß Waveletalgorithmen für die numerische Lösung von Integralgleichungen zu einer erheblichen Reduzierung von Speicherplatz und Rechenzeit führen.

Zur Frage, welcher Algorithmus und welche Waveletfunktionen für welche Gleichungen am besten geeignet sind, wird es sicher in der nächsten Zeit noch viele Entwicklungen und Ergebnisse geben. Ein natürlicher Weg zur Konstruktion von geeigneten Waveletfunktionen führt dabei zu den Multiwavelets, d. h. zu Funktionenräumen, die durch die Shifts von mehreren Formfunktionen erzeugt werden. Beispiele solcher Funktionen sind u. a. im Zusammenhang mit Randintegralgleichungen in [1, 2] betrachtet worden. In der erfolgreich abgeschlossenen Dissertation [3] und der Arbeit [4] werden Stabilitäts-, Konvergenz- und Kompressionsresultate für allgemeine Galerkin-Petrov-Diskretisierungen mit allgemeinen Multiwaveletfunktionen bewiesen. Insbesondere ist die Nichtentartung einer matrixwertigen Symbolfunktion das entscheidende Stabilitätskriterium. Dieses sogenannte numerische Symbol ergibt sich aus einer Reihenentwicklung, die sich im allgemeinen nicht zusammenfassen läßt und deshalb numerisch ausgewertet werden muß. Für einige Spezialfälle von Kollokationsmethoden mit nichtglattesten Splines wurde das Symbol ausgewertet und ein explizites Stabilitätskriterium aufgestellt. Diese Resultate gelten zwar zuerst für Integralgleichungen über glatten Randkurven, die vorgestellte Technik läßt aber auch Schlußfolgerungen für den komplizierteren Fall von höherdimensionalen Randmannigfaltigkeiten zu.

In [5] wurde eine spezielle Multiwaveletbasis für stetige und stückweise lineare Ansatzräume eingeführt und die Stabilität (Riesz-Eigenschaft) in einer bestimmten Sobolevskala gezeigt. Dieses System ist eine Weiterentwicklung der hierarchischen Dreipunktbasis [8, 9]. Im Gegensatz zu den recht allgemeinen Konstruktionen in [6, 7] zeichnet sie sich durch minimale Träger aus. Diese Minimalität ist für die Kompression und den schnellen Quadraturalgorithmus entscheidend. Obwohl die neuen Basisfunktionen an den Schnittstellen von verschiedenen Parametrisierungen unter Verlust der Momentenbedingung modifiziert sind, lassen sich trotzdem die gewohnten optimalen Kompressionsresultate ableiten. Für das entsprechende Waveletverfahren wurde in [5] ein neuer Quadraturalgorithmus entwickelt, der die Produktintegration mit dem Einsatz von Gauß-Quadraturformeln kombiniert und erstmalig eine fast optimale Komplexitätsabschätzung unter minimalen Glattheitsvoraussetzungen gestattet. Entscheidend für die Quadratur ist auch die lokale Approximation der Geometrie der Randfläche, die an den Kompressionsalgorithmus angepaßt ist. Für den Waveletalgorithmus, der Kompression, Quadratur und Approximation der Geometrie einschließt, wurden Konvergenzabschätzungen bewiesen, die sich von den optimalen Abschätzungen nur durch zusätzlich logarithmische Faktoren unterscheiden. Zum Test dieser Methode wurden Programme erstellt, die die Effektivität des Verfahrens für ein einfaches Beispiel unter Beweis stellen. Diese Programme werden gegenwärtig erweitert, um die Anwendbarkeit des Waveletzugangs für die Berechnung des Erdschwerefeldes aus Satellitenmessungen zu untersuchen. Außerdem sollen die erstellten Programme als Grundlage für zukünftig zu untersuchende adaptive Waveletverfahren dienen.

Literatur

1. B. ALPERT, *A class of bases in L^2 for the sparse representation of integral operators*, SIAM J. Math. Anal., **24** (1993), pp. 246–262.

2. T.V. PETERSDORFF, C. SCHWAB, R. SCHNEIDER, *Multiwavelets for second kind integral equations*, SIAM J. Numer. Anal., **34** (1997), pp. 2212–2227.

3. J. SCHULT, *Multiwavelet-Approximationsmethoden für periodische Pseudodifferentialgleichungen*, Dissertation, Technische Universität Chemnitz, 1998.

4. S. PRÖSSDORF†, J. SCHULT, *Multiwavelet approximation methods for pseudodifferential equations on curves. Stability and convergence analysis*, Adv. Comput. Math., **9** (1998), pp. 145–171.

5. S. EHRICH, A. RATHSFELD, *Piecewise linear wavelet collocation on triangular grids, Approximation of the boundary manifold and quadrature*, WIAS-Preprint Nr. 434, 1998.

6. W. DAHMEN, R. SCHNEIDER, *Wavelets on manifolds I: Constructions and domain decomposition*, Technische Universität Chemnitz, Preprint SFB 393/97–30, 1997.

7. C. CANUTO, A. TABACCO, K. URBAN, *The wavelet element method, Part I and II*, Istituto de Analisi Numerica del CNR, Pavia, Preprint Nr. 1052, 1997.

8. R. STEVENSON, *Stable three-point wavelet bases on general meshes*, University Nijmegen, Report Nr. 9627, 1996.

9. R. LORENTZ, P. OSWALD, *Constructing economical Riesz bases for Sobolev spaces*, GMD-Bericht **993**, GMD, St. Augustin, 1996.

Integralgleichungsmethoden in der Elastizitätstheorie

Bearbeiter: J. Elschner, J. Niebsch, G. Schmidt

Kooperation: V. Maz'ya, T. Ivanov (Universität Linköping)

Förderung: DAAD

1. Semi-analytische Kubatur von Potentialen und numerische Verfahren zur Lösung nichtlinearer partieller Integro-Differentialgleichungen

Integralgleichungsverfahren sind bei vielen Problemen der mathematischen Physik eine interessante Alternative zu anderen Lösungsverfahren wie Finite-Elemente- oder Finite-Differenzen-Verfahren, insbesondere wenn die Problemgleichungen Integraloperatoren mit singulären Kernfunktionen enthalten. Solche Gleichungen treten besonders bei verschiedenen Problemen der Elastizitätstheorie auf. Durch Anwendung einer von V. Maz'ya vorgeschlagenen Approximationsmethode mittels glatter, schnell abfallender Funktionen, die die effektive Berechnung von mehrdimensionalen Potentialen und anderen Integral- und Pseudodifferentialoperatoren gestattet, ergeben sich qualitativ neue Möglichkeiten zum Einsatz solcher Verfahren.

Die Arbeiten 1998 konzentrierten sich auf die Begründung von Approximations- und Kubaturformeln für Integraloperatoren über beschränkten Gebieten sowie auf die theoretische Untersuchung des Konvergenzverhaltens von Zeitschrittverfahren zur Lösung von Evolutionsproblemen, die bei numerischen Tests zur Lösung von Anfangswertproblemen verschiedener Klassen von Gleichungen mit nichtlokalen Operatoren sehr genaue Resultate liefern (vergl. [5]). Die theoretische Untersuchung des Konvergenzverhaltens dieser Verfahren ist durch das Auftreten von sogenannten Sättigungsfehlern bei der Approximation kompliziert. Die numerische Analyse solcher Verfahren wurde 1998 für einen wichtigen Spezialfall durchgeführt. Die gefundenen Fehlerabschätzungen wurden mit numerischen Tests am Beispiel der Burgers-Gleichung unterlegt. Es wurden erste Schritte zur Anwendung der verwendeten Techniken auf allgemeinere Evolutionsgleichungen mit nichtlokalen Operatoren gemacht.

Im Fall beschränkter Gebiete oder unstetiger Anfangswerte ist bei diesen Verfahren die effektive Berechnung von Integraloperatoren mit unstetigen Dichten notwendig. In [3, 4, 8, 9] wurden Approximationsverfahren auf variablen Gittern mit Ansatzfunktionen, die den Operatoren angepaßt sind, sowie daraus abgeleitete Kubaturformeln untersucht, wobei gleiche Approximationseigenschaften wie im Fall glatter Funktionen und gleichmäßig verteilter Knotenpunkte erzielt wurden. Damit wurden wichtige Vorarbeiten zur Implementierung effektiver Algorithmen zur Berechnung von Potentialen der Elastizitätstheorie abgeschlossen.

2. Randintegralgleichungen der Elastizitätstheorie in Gebieten mit nichtglattem Rand

Die erste Randwertaufgabe sowie verschiedene Transmissionsprobleme der linearen Elastizitätstheorie führen auf die Integralgleichung

$$\lambda u(x) - Ku(x) = f(x), \quad x \in \partial\Omega, \quad |\lambda| \geq 1 \tag{1}$$

auf dem Rand $\partial\Omega$ eines beschränkten Gebietes Ω. Hier bezeichnet K das elastische Doppelschichtpotential, dessen Kern im 3D-Fall die Form

$$\frac{(x-y)\cdot\nu(y)}{|x-y|^3}\left\{(1-\kappa)I + 3x\frac{(x-y)(x-y)^t}{|x-y|^2}\right\}, \quad \kappa = \frac{\lambda+\mu}{\lambda+3\mu}$$

annimmt und der fixierte Singularitäten in den Kanten- und Eckpunkten von $\partial\Omega$ aufweist. I ist dabei die Einheitsmatrix, ν die Normale an $\partial\Omega$, und λ, μ sind die Lamé-Koeffizienten.

Im Fall der ersten Randwertaufgabe in einem ebenen Gebiet mit Ecken wurde in [1] eine vollständige Lösbarkeitstheorie in gewichteten L_p- und Sobolevräumen für die Integralgleichung (1) (mit $\lambda = 1$) erhalten. Im Berichtszeitraum wurden neue Resultate zur Existenz, Eindeutigkeit und Regularität für die allgemeine Gleichung (1) sowohl in polygonalen Gebieten als auch in Polyedergebieten erzielt [2]. Mit Hilfe von Mellin-Techniken wurden explizite Formeln für den Fredholmradius von K im zweidimensionalen Fall bewiesen. Die Übertragung dieses Zugangs auf den 3D-Fall beruht auf tiefliegenden Spektraleigenschaften von Operatorbüscheln in sphärischen Gebieten mit Ecken, die bei der Mellin-Transformation des Lamé-Systems entstehen (vgl. [6, 7]). Für ein beliebiges Polyedergebiet konnte gezeigt werden, daß der Fredholmradius von K in L_p- und Sobolevräumen mit Gewicht stets größer als Eins ist. Dies führt im 3D-Fall zu neuen Existenz- und Eindeutigkeitsaussagen für die Gleichung (1) in diesen Räumen.

Literatur

1. J. ELSCHNER, O. HANSEN, *A collocation method for the solution of the first boundary value problem of elasticity in a polygonal domain in* $\mathbb{R}^2$, WIAS-Preprint No. 354, 1996, erscheint in: J. Integral Equations Appl.

2. J. ELSCHNER, V. G. MAZ'YA, *On the elastic double layer potential over non-smooth domains*, in Vorbereitung.

3. T. IVANOV, V. G. MAZ'YA, G. SCHMIDT, *Boundary layer approximations and cubature of potentials in domains*, erscheint in: Adv. Comput. Math.

4. ——, *Boundary layer approximate approximations for the cubature of potentials*, erscheint in: Mathematical Aspects of Boundary Element Methods, Pitman Research Notes in Mathematics Series, Longman.

5. V. KARLIN, V. G. MAZ'YA, *Time-marching algorithms for non-local evolution equations based upon "approximate approximations"*, SIAM J. Sci. Comput., **18** (1997), pp. 736–752.

6. V. A. KOZLOV, V. G. MAZ'YA, *Singularities in solutions to mathematical physics problems in non-smooth domains*, Progr. Nonlinear Differential Equations Appl., **22** (1996), pp. 174–206.

7. V. A. KOZLOV, V. G. MAZ'YA, C. SCHWAB, *On singularities of solutions of the displacement problem of linear elasticity near the vertex of a cone*, Arch. Rational Mech. Anal., **119** (1992), pp. 197–227.

8. V. G. MAZ'YA, G. SCHMIDT, *On quasi-interpolation with non-uniformly distributed centers on domains and manifolds*, WIAS-Preprint No. 422, 1998.

9. ——, *Construction of basis functions for high order approximate approximations*, erscheint in: Mathematical Aspects of Boundary Element Methods, Pitman Research Notes in Mathematics Series, Longman.

4.5 Forschungsgruppe Stochastische Systeme mit Wechselwirkung

4.5.1 Zusammenfassung

Entsprechend der allgemeinen Aufgabenstellung der Forschungsgruppe, komplexe Systeme mit vielen wechselwirkenden Komponenten vom Standpunkt der Wahrscheinlichkeitstheorie zu untersuchen, wurden die langfristig angelegten Projekte der Vorjahre weiterverfolgt.

Besonders erfreulich war auch in diesem Jahr die Entwicklung des fremdfinanzierten Mitarbeiterpotentials der Forschungsgruppe. Zu den von der DFG finanzierten Mitarbeitern (ein wissenschaftlicher Mitarbeiter und zwei Doktoranden (davon einer über ein Graduiertenkolleg)) kam jeweils ein Postdoktorand aus dem Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“ sowie dem HCM-Programm „Stochastic Analysis“ der EU (seit 9/98). Ferner konnte die Forschungsgruppe einen Postdoktoranden zur Mitarbeit in einem anwendungsorientierten Projekt zur numerischen Behandlung von Verbrennungsprozessen gewinnen.

Die Forschungsgruppe ist intensiv an dem DFG-Schwerpunktprogramm „Interagierende stochastische Systeme von hoher Komplexität“ beteiligt. Drei der im folgenden dargestellten Projekte werden in diesem Rahmen von der DFG gefördert. Darüber hinaus war das WIAS im vergangenen Jahr Gastgeber zweier Kolloquien dieses Programms.

Wissenschaftlich wurden in diesem Jahr eine Reihe interessanter Ergebnisse erzielt, die im folgenden näher dargestellt werden.

4.5.2 Projekte

Tieftemperaturphasen in Modellen mit langreichweitiger Wechselwirkung

Bearbeiter: A. Bovier, Ch. Külske

Kooperation: M. Zahradník (Karls-Universität Prag)

Förderung: DFG-Schwerpunktprogramm „Interagierende stochastische Systeme von hoher Komplexität“

Eine Einführung in die allgemeine Thematik dieses Projektes wurde im Jahresbericht 1997 gegeben. In diesem Jahr wurden wesentliche Fortschritte in Hinblick auf die Behandlung von Spinsystemen mit kontinuierlichen Spins in der Gegenwart von eingefrorener Unordnung erzielt.

Es wurde ein Modell für kontinuierliche Spins mit Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn im zufälligen Magnetfeld in Raumdimensionen $d \geq 3$ betrachtet ([1]). Das ungestörte Modell ist durch ein symmetrisches Doppel-Minimum-Potential gegeben, und die Magnetfelder werden als „klein“, und platzweise unabhängig angenommen. Es wurde gezeigt, daß das Modell unter geeigneten „Niedrig-Temperatur“-Bedingungen an das Potential zwei ferromagnetische Phasen besitzt. Der Beweis benutzt eine geeignete stochastische Abbildung der kontinuierlichen Spins auf ihr Vorzeichenfeld, die als Beispiel einer nützlichen „Renormierungsgruppen“-Abbildung ohne Pathologien angesehen werden kann. Eine Konturdarstellung des resultierenden Ising-Systems schließlich konnte dann mit den Renormierungsgruppenmethoden von Bricmont und Kupiainen behandelt werden, die für das Ising-Modell im Zufallsfeld mit nächster-Nachbar-Wechselwirkung entwickelt wurden.

In einer weiteren Arbeit [2] konnte die Technik des continuous-to-discrete coarse grainings auf ungeordnete Schichtmodelle ausgedehnt werden, bei denen kontinuierliche Spins in einem zufällig gestörten periodischen Potential betrachtet wurden. Es wurde gezeigt, daß in einem „Tieftemperatur“-Regime bei „schwacher“ Unordnung in Dimensionen $D \geq 3+1$ stabile Oberflächen existieren. Bei spezieller Wahl des Potentials haben die Gibbs-Maße im unendlichen Volumen hier die Form (zufälliger) Linearkombinationen von massiven Gaußschen Feldern mit Zentrierungen, die gemäß der Gibbs-Maße eines gewissen (zufälligen) diskreten SOS-Modells verteilt sind. Zur Analyse des diskreten Problems konnte eine geeignete Konturmodelldarstellung gefunden werden, auf die die Renormierungsgruppenanalyse aus [3] angewendet werden konnte.

Literatur

1. C. KÜLSKE, *The continuous spin random field model: Ferromagnetic ordering in $d \geq 3$*, WIAS-Preprint No. 412, 1998, erscheint in: Rev. Math. Phys.

2. ——, *Stability for a continuous SOS-interface model in a randomly perturbed periodic potential*, WIAS-Preprint No. 466, 1998.

3. A. BOVIER, C. KÜLSKE, *A rigorous renormalization group method for interfaces in random media*, Rev. Math. Phys., **6** (1994), pp. 413–496.

Spin-Gläser und Neurale Netze

Bearbeiter: A. Bovier, B. Gentz, B. Niederhauser (Graduiertenkolleg)

Kooperation: V. Gayrard (CPT-Marseille), D. Mason (University of Delaware), A. C. D. van Enter (RU Groningen), M. Löwe (EURANDOM, Eindhoven)

Eine ausführliche Darstellung der Fragestellungen, denen wir uns in diesem Projekt widmen, wurde im Jahresbericht 1994 gegeben. Ein umfangreicher Übersichtsartikel ist soeben erschienen [1], eine elementarere Zusammenfassung ist in [2] zu finden.

Das Hauptziel der Arbeiten der vergangenen Jahre lag in der Konstruktion extremaler Gibbs-Maße für Hopfield-artige Modelle und der Untersuchung ihrer Eigenschaften. Dabei wurde üblicherweise in der Konstruktion des thermodynamischen Limes ein symmetriebrechender Term („äußeres Magnetfeld“) eingeführt. Die wesentliche technische Schwierigkeit bestand dann darin, nachzuweisen, daß dieser Term stochastische Einflüsse übertraf. Eine offene Frage blieb bisher die, das Konvergenzverhalten der Gibbszustände ohne symmetriebrechenden Term in Situationen mit unendlich vielen extremalen Maßen zu beschreiben. Diese Fragen sind aber zentral, will man die eigentlichen Besonderheiten echter Spin-Glas-Zustände verstehen lernen. Dieser Punkt ist in jüngster Zeit insbesondere von Newman und Stein [3] hervorgehoben worden. Auch in einer neuen Arbeit von Talagrand [4] wird dies deutlich.

In diesem Jahr gelang es uns in zwei vergleichsweise noch einfachen Beispielen, diese Frage zu beantworten. In [5] wurde der Fall eines Hopfield-Modells mit zwei Gaußschen Mustern betrachtet. Die Menge der extremalen Maße ist hier überabzählbar und wird durch die Punkte auf einem Kreis indiziert. Mit Hilfe eines expliziten symmetriebrechenden Terms kann jedes dieser Maße als Grenzwert konstruiert werden. Ohne einen solchen wird, wie gezeigt werden konnte, durch die Unordnung eine stochastische Symmetriebrechung produziert, die dazu führt, daß in jedem (großen) endlichen Volumen gerade ein Paar von extremalen Maßen im wesentlichen das Gibbs-Maß dominiert, welches aber sowohl vom Zufall als auch vom Volumen abhängt. Damit wurde ein Beispiel für das sogenannte „chaotic pairs picture“ von Newman und Stein konstruiert. Ein weiteres Beispiel liefert das gewöhnliche Hopfield-Modell selbst, wobei aus technischen Gründen relativ starke Einschränkungen an das Wachstumsverhalten der Musterzahl als Funktion der Systemgröße gemacht werden mußten. In dieser Situation können die Gibbs-Maße Q_N im Volumen N asymptotisch zerlegt werden in der Form

$$Q_N \approx \sum_{\mu=1}^{M(N)} (\delta_{m^* e^\mu} + \delta_{-m^* e^\mu}) w_\mu(N).$$

Dabei sind die Gewichte von der Form

$$w_\mu(N) \approx \exp(\sqrt{M(N)} B_\mu(N)),$$

wo $B_\mu(N)$ explizit bekannte, austauschbare und schwach korrelierte Zufallsvariablen mit Varianz 1 sind. Die Aufgabe ist somit, die extremale Ordnungsstatistik der Zufallsvariablen B_μ zu analysieren. In einer Arbeit mit D. Mason [6] wurde dieses Problem unter Zuhilfenahme von starken Gaußschen Kopplungstechniken gelöst. Es wurde gezeigt, daß die Variablen sich im Hinblick auf ihre Extrema asymptotisch wie unabhängige Gaußsche Zufallsvariablen verhalten.

Hieraus folgt dann wiederum, daß für gegebenes N mit Wahrscheinlichkeit nahe bei Eins ein zufälliger Index $\mu(N)$ die Summe dominiert, d. h. $w_{\mu(N)}(N) \approx 1$.

Eine weitere für Unordnungseffekte sensitive Größe sind die Fluktuationen der Ordnungsparameter. Dabei erweist sich die Untersuchung des Verhaltens an der kritischen Temperatur als besonders interessant. Schon im Fall endlich vieler Pattern [7] stellt sich heraus, daß hier ein sehr ungewöhnlicher Grenzwertsatz gilt: die Verteilung der Fluktuationen des Overlapparameters konvergiert nämlich – auch nicht nach Zentrierung – nicht mehr fast sicher gegen eine deterministische Grenzverteilung, sondern nur noch in Verteilung gegen eine – explizit angebbare – zufällige Verteilungsfunktion. Offensichtlich spürt das System am kritischen Punkt bereits die „Nähe“ zur Spin-Glas-Phase. Von großem Interesse ist nun natürlich, zu verfolgen was passiert, wenn die Patternzahl wächst. Ein erstes Resultat, basierend auf den auch in [6] verwendeten Kopplungssätzen, wurde dazu in [8] bewiesen.

Literatur

1. A. Bovier, V. Gayrard, *Hopfield models as generalized random mean-field models*, in: Mathematical Aspects of spin glasses and neural networks (A. Bovier, P. Picco, Hrsg.), Progress in Probability, **Vol. 41**, pp. 3–91, Birkhäuser, Boston-Basel-Berlin, 1998.

2. ——, *Statistical mechanics of neural networks: The Hopfield model and the Kac-Hopfield model*, Markov Proc. Rel. Fields, **3** (1997), pp. 392-422.

3. C. M. Newman, D. L. Stein, *Thermodynamic chaos and the structure for short-range spin glasses*, in: Mathematical Aspects of spin glasses and neural networks (A. Bovier, P. Picco, Hrsg.), Progress in Probability, **Vol. 41**, pp. 187-243, Birkhäuser, Boston-Basel-Berlin, 1998.

4. M. Talagrand, *Rigorous low temperature results for the mean field p-spins interaction model*, Preprint, 1998.

5. A. Bovier, A. C. D. van Enter, B. Niederhauser, *Stochastic symmetry-breaking in a Gaussian Hopfield model*, WIAS-Preprint No. 416, 1998, erscheint in: J. Statist. Phys., **95** (1999).

6. A. Bovier, D. M. Mason, *Extreme value behaviour in the Hopfield model*, in Vorbereitung.

7. B. Gentz, M. Löwe, *The fluctuation of the overlap in the Hopfield model with finitely many patterns*, eingereicht bei: Probab. Theory Related Fields (1998).

8. ——, *Fluctuations in the Hopfield model at the critical temperature*, WIAS-Preprint No. 461, 1998, eingereicht bei: Markov Proc. Rel. Fields (1998).

Stochastische Dynamik ungeordneter Mean-Field-Modelle

Bearbeiter: A. Bovier

Kooperation: V. Gayrard (CPT-Marseille), M. Klein (Universität Potsdam), M. Eckhoff (Universität Potsdam)

Zu den interessantesten Fragen in der Theorie ungeordneter Systeme zählt die nach dem Langzeitverhalten der zugehörigen Dynamiken. So ist etwa im Hopfieldmodell die Funktion als autoassoziativer Speicher eine Eigenschaft der Dynamik; die von uns bisher betriebene Untersuchung der Gleichgewichtsthermodynamik ist insofern nur ein erster Schritt in Richtung auf ein vollständiges Verständnis solcher Systeme. In diesem Jahr konnten nun erstmals wesentliche Resultate zur Dynamik solcher Systeme erzielt werden [1]. Diese stellen allerdings nur einen ersten Schritt im Rahmen eines weitgefaßten Projektes zu dieser Problematik dar.

Untersucht wurden eine Klasse von zeitdiskreten reversiblen Markov-Prozessen auf Gittern $\Gamma_N \subset \mathbb{R}^d$ mit Gitterabstand $1/N$; die Übergangsraten zwischen Gitternachbarn sind so gewählt, daß der Prozess reversibel bezüglich eines invarianten Maßes $Q_N(x) = \exp(-NF_N(x))$ ist. In den Anwendungen wird Q_N das vom Gibbs-Maß auf den makroskopischen Variablen induzierte Maß sein. Wichtig ist, daß F_N neben einem deterministischen Anteil einen kleinen fluktuierenden Anteil haben kann, etwa $F_N(x) \sim F(x) + N^{-1/2}f(x)$ mit $F(x)$ deterministisch und $f(x)$ zufällig. Ein wesentliches Ziel ist es, den Einfluß der kleinen zufälligen Korrektur f auf die Dynamik zu kontrollieren. Für den Fall $d < \infty$ sowie einigen Annahmen an F_N und insbesondere an die Struktur der lokalen Minima dieser Funktionen konnten sehr scharfe Abschätzungen an die (exponentiell großen) metastabilen Zeitskalen (= mittlere Übergangszeiten zwischen lokalen Minima) erhalten werden. Darüber hinaus wurde der asymptotisch exponentielle Charakter der Verteilung spezieller Übergangszeiten mit scharfen oberen und unteren Schranken bewiesen. Damit wird für diese Dynamiken eine präzise Übersetzung thermodynamischer Resultate zu Aussagen über das Langzeitverhalten möglich. Als explizites Beispiel wurde ein Curie-Weiss-Modell mit zufälligem Magnetfeld behandelt.

Technisch benutzen die Beweise an einigen Stellen Resultate zu den großen Abweichungen im Pfadraum unserer Prozesse. Diese wurden separat [2] und in wesentlich größerer Allgemeinheit für eine große Klasse von Markovprozessen bewiesen. Insbesondere wurden diese auch für nicht reversible und nicht stationäre Prozesse gezeigt. Letzteres ist insbesondere von Interesse, da damit die Untersuchung von Hysteresephänomenen in ungeordneten Systemen möglich wird, die in der Zukunft ebenfalls untersucht werden sollen.

Literatur

1. A. Bovier, M. Eckhoff, V. Gayrard, M. Klein, *Metastability in stochastic dynamics of disordered mean-field models*, WIAS-Preprint No. 416, 1998, eingereicht bei: Probab. Theory Related Fields (1998).

2. A. Bovier, V. Gayrard, *Sample path large deviations for Markov processes with slowly varying transition probabilities*, in Vorbereitung.

Katalytische Verzweigungsstrukturen

Bearbeiter: K. Fleischmann

Kooperation: D. A. Dawson (The Fields Institute, Toronto), J.-F. Delmas (ENCPC-CERMICS, Marne La Vallée), A. M. Etheridge (Oxford University, Oxford), A. Klenke (Universität Erlangen-Nürnberg), M. A. Kouritzin (University of Alberta, Edmonton), C. Mueller (University of Rochester, Rochester), V. A. Vatutin (Steklov Mathematical Institute, Moskau)

Förderung: DFG-Programm „Interagierende stochastische Systeme von hoher Komplexität“

Eine detaillierte Beschreibung der Motivation für dieses Forschungsgebiet ist im Jahresforschungsbericht 1995, S. 133, zu finden. In diesem Berichtsjahr wurde die Untersuchung des *stetigen Super-Brownschen Reaktanten X^{ρ} mit einem Super-Brownschen Katalysator ρ* fortgesetzt . Dies beschreibt zwei „Populationen“ von Substanzen, Katalysator und Reaktant genannt, deren infinitesimale Bestandteile sich chaotisch bewegen (unabhängige Brownsche Bewegungen) und sich kritisch binär verzweigen (wachsen oder sterben). Der Katalysator entwickelt sich dabei autonom, während der Reaktant durch den Katalysator beeinflußt wird: Die momentane lokale Verzweigungsrate des Reaktanten ist proportional zu der momentanen lokalen Katalysator-„Intensität“.

In Vertiefung von L^2-Methoden aus [3] wurden erste Ergebnisse zu den in Simulationen sichtbaren *„Hitzeflecken“* (siehe die Abbildung im Jahresforschungsbericht 1997, S. 87) erzielt ([2]). Sie entstehen an den Grenz-„Flächen“ zwischen Katalysator und Reaktant. Unser Zugang hierzu besteht darin, die *Kollisionslokalzeit* zwischen Katalysator und Reaktant rigoros zu begründen. Sie existiert nichttrivial in Dimensionen $d \leq 3$. Diese Kollisionslokalzeit wird außerdem für die Beschreibung des Kovarianzmaßes im Martingalproblem von X^{ρ} benötigt. Im Zweidimensionalen existieren räumliche Rand-Kollisions-Dichten, und über eine Selbstähnlichkeitseigenschaft erscheinen sie als Faktor im Langzeit-Zufalls-Ergoden-Grenzwert (Diffusivität des zweidimensionalen Modells).

Zum anderen wurden hinreichende Kriterien für das *Aussterben von katalytischen Verzweigungsprozessen in endlicher Zeit* etabliert [1], [4]. Dies betrifft super-Brownsche Bewegungen in katalytischen Medien, die stabil, „parabolisch“ oder unabhängig in jedem Punkt sind. Dazu wurde eine *Methode der guten und schlechten historischen Reaktantenpfade* entwickelt. Gute Pfade kollidieren signifikant mit dem Katalysator, und das Aussterben folgt über eine individuelle Zeittransformation in Abhängigkeit von der Kollisionslokalzeit und einem Vergleich mit der Fellerschen Verzweigungsdiffusion. Schlechte Pfade haben eine kleine erwartete Masse, die sich durch die Treffwahrscheinlichkeit des Katalysators und der zugehörigen Lokalzeit kontrollieren läßt.

Schließlich wurden zum vertieften Verständnis der Familienstruktur *Abweichungen von typischen Typenproportionen in kritischen Galton-Watson-Prozessen untersucht* [5]. Es gelang unter einer verfeinerten Normierung, auch im Falle unendlicher zweiter Momente nichttriviale Grenzpopulationen nachzuweisen.

Literatur

1. D. A. DAWSON, K. FLEISCHMANN, C. MUELLER, *Finite time extinction of super-Brownian motions with catalysts*, WIAS-Preprint No. 431, 1998.

2. J.-F. DELMAS, K. FLEISCHMANN, *On the hot spots of a catalytic super-Brownian motion*, WIAS-Preprint No. 450, 1998.

3. K. FLEISCHMANN, A. KLENKE, *Smooth density field of catalytic super-Brownian motion*, WIAS-Preprint No. 331, 1997, erscheint in: Ann. Appl. Probab., 1998.

4. K. FLEISCHMANN, C. MUELLER, *Finite time extinction of catalytic branching processes*, Preprint Univ. Rochester (1998).

5. K. FLEISCHMANN, V. A. VATUTIN, *Deviations from typical type proportions in critical multitype Galton-Watson processes*, WIAS-Preprint No. 455, 1998.

Kontinuum-Stepping-Stone-Modelle

Bearbeiter: K. Fleischmann

Kooperation: P. Donelly (Oxford University, Oxford), S. N. Evans (University of California at Berkeley, Berkeley), T. G. Kurtz (University of Wisconsin-Madison, Madison), X. Zhou (University of California at Berkeley, Berkeley)

Kontinuum-Stepping-Stone-Modelle kommen aus der Populationsgenetik, im Diffusionslimes sind dies wechselwirkende Fisher-Wright-Diffusionen und beim Übergang zu unendlich vielen Typen schließlich wechselwirkende Fleming-Viot-Prozesse. Beim Studium ihres Clusterverhaltens benutzt man zwangsläufig Skalierungen, die den Rahmen dieser Modelle „sprengen", da der Indexraum abzählbar ist. In [2] wurde deshalb eine Kontinuumsversion solcher Prozesse konstruiert, und zwar über eine Dualität zu verschmelzenden Lévy-Prozessen. Das Studium derartiger Prozesse wurde weiter durch [3] vorangetrieben. Dort wurde als eine der offenen Fragen herausgestellt, hinreichende Bedingungen an den Migrationsprozeß zu postulieren, die den Nachweis der Existenz *stetiger* Pfade gestatten.

Dies ist jetzt unter ziemlich allgemeinen Bedingungen gelungen [1]. Dabei wurde das Kontinuum-Stepping-Stone-Modell als Limes gewisser wechselwirkender Teilchensysteme gewonnen. Der Fall eines Brownschen Migrationsprozesses auf dem Einheitskreis ist mit Hilfe einer *Dualitätsbeziehung zwischen verschmelzenden und annihilierenden Brownschen Bewegungen* detailliert studiert. Mit Hilfe dieser Dualität wurde auch gezeigt, daß ein zu einer unendlichen Familie von verschmelzenden Brownschen Bewegungen in natürlicher Weise assoziierter zufälliger kompakter metrischer Raum die *Hausdorff- und Packing-Dimension fast sicher* $\frac{1}{2}$ hat. Darüber hinaus ist dieser Raum kapazitätsinvariant zur Mitte-$\frac{1}{2}$-Cantor-Menge (und damit auch zur Brownschen Null-Schnitt-Menge).

Literatur

1. P. DONELLY, S. N. EVANS, K. FLEISCHMANN, T.G. KURTZ, X. ZHOU, *Continuum-sites stepping-stone models, coalescing exchangeable partitions, and random trees*, WIAS-Preprint No. 451, 1998.

2. S. N. EVANS, K. FLEISCHMANN, *Cluster formation in a stepping stone model with continuous, hierarchically structured sites*, Ann. Probab., **24** (1998), No. 4, pp. 1926–1952.

3. S. N. EVANS, *Coalescing Markov labelled partitions and a continuous sites genetic model with infinitely many types*, Ann. Inst. H. Poincaré Probab. Statist., **33** (1998), pp. 339–358.

Turbulente Verbrennung und numerische Lösung der PDF-Transportgleichung

Bearbeiter: M. Kraft, W. Wagner

Kooperation: F. Mauss (Lund Technical University), A. Sarofim (Massachusetts Institute of Technology), H. Fey (Universität Kaiserslautern)

In vielen industriellen Anwendungen spielen turbulente reaktive Strömungen eine wichtige Rolle. Insbesondere Verbrennungsprozesse sind von großer praktischer Bedeutung. Ein Ziel des Studiums solcher Prozesse ist es, den Verbrennungsprozeß so zu führen, daß Luftschadstoffe wie Ruß und Stickoxide in geringeren Mengen entstehen.

Die mathematische Beschreibung solcher Verbrennungsprozesse wird häufig mit Hilfe der Verbundwahrscheinlichkeitsdichtetransportgleichung (PDF) vorgenommen. Da bei vielen Verbrennungsprozessen die Anzahl der chemischen Spezies sehr hoch ist, vereinfacht man diese Transportgleichung und erhält Stochastische Reaktormodelle (SRM) (siehe [1]), die auch für detaillierte chemische Modelle numerisch lösbar sind. Die PDF-Transportgleichung, die die stochastischen Reaktormodelle beschreibt, ist gegeben durch:

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{F}(\underline{\psi};t)}{\partial t} \quad &+ \quad \sum_{k=1}^{K+1} \frac{\partial}{\partial \psi_k}(A_k \mathcal{F}(\underline{\psi};t)) - \frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^{K+1} \frac{\partial^2}{\partial \psi_k \partial \psi_l}(B_{kl}\mathcal{F}(\underline{\psi};t)) \\
&- \quad \int W(\underline{\psi}|\underline{\psi_a};t)\mathcal{F}(\underline{\psi_a};t) - W(\underline{\psi_a}|\underline{\psi};t)\mathcal{F}(\underline{\psi};t)\,d\underline{\psi_a} \\
&= \quad \frac{1}{\tau_{PaSR}}\Big(\mathcal{F}_{in}(\underline{\psi}) - \mathcal{F}(\underline{\psi};t)\Big).
\end{aligned} \tag{1}
$$

Diese Gleichung, ihre numerische Behandlung und ihre Anwendung sind Gegenstand der Forschung.

Die Forschungsarbeit läßt sich inhaltlich in folgende Bereiche unterteilen:

1. Mathematische Analyse der stochastischen Reaktormodelle. In [2] werden für spezielle Fälle analytische Lösungen für Gleichung (1) vorgestellt.

2. Modellierung von Reaktoren im Labormaßstab zum Validieren stochastischer Reaktormodelle. In [3] wurde ein SRM erfolgreich eingesetzt, um die Schadstoffbildung in einer turbulenten Brennkammer zu berechnen.

3. Modellierung der Rußbildung in turbulenten Flammen. In [4] wurde ein detailliertes Rußmodell für turbulente Flammen entwickelt.

4. Validierung von reduzierten chemischen Modellen zur Beschreibung von Flugzeugtreibstoff. In Kooperation mit der Firma Reaction Engineering International wurde ein reduzierter n-Heptan Mechanismus getestet [5].

Literatur

1. M. KRAFT, *Stochastic Modeling of Turbulent Reacting Flow in Chemical Engineering*, VDI Verlag, Fortschrittsberichte des VDI, Reihe 6, **391** (1998).

2. M. KRAFT, H. FEY, *Some analytic solutions for stochastic reactor models based on the joint composition PDF*, WIAS-Preprint No. 456, 1998.

3. C. PROCACCINI, M. KRAFT, H. FEY, H. BOCKHORN, J. P. LONGWELL, A. F. SAROFIM, K. A. SMITH, *PIC formation during the combustion of simple hydrocarbons in inhomogeneous incineration systems*, 27th Int. Symposium on Combustion, Pittsburgh, PA, Combustion Institute (1998).

4. F. MAUSS, M. BALTHASAR, M. KRAFT, C. PROCACCINI, A. F. SAROFIM, J. P. LONGWELL, K. A. SMITH, *Influence of microscale mixing on soot and NOx formation*, 27th Int. Symposium on Combustion, Pittsburgh, PA, Combustion Institute, WIP Poster, Soot, Number W5A10 (1998).

5. M. KRAFT, *Validation of a reduced n-heptane mechanism for nonpremixed turbulent combustion*, Internal Report for Reaction Engineering International (1998).

Elektronentransport in ungeordneten Materialien

Bearbeiter: A. Liemant

Kooperation: L. Brehmer (Institut für Physik, Universität Potsdam)

Die Untersuchungen konzentrierten sich auf die Frage nach dem Drift-Diffusionsstrom durch eine Grenzschicht $\partial\Gamma$ zwischen zwei unterschiedlichen ungeordneten Materialien I und II. Wie bisher wird angenommen, daß sich die Ladungsträger auf einem ungeordneten Gitter von räumlich und energetisch lokalisierten Zuständen (x,E) gemäß eines Hoppingmechanismus fortbewegen mit einer Hoppingrate

$$w(x,E;y,Q) = r(|x'-y'|)\, s(x,E;y,Q)$$

und unter Berücksichtigung des Pauliprinzips, das Mehrfachbesetzungen ausschließt. $x'(x)$ bezeichnet die mikroskopische (makroskopische) dreidimensionale Ortskoordinate mit $x = \varepsilon x'$ $(\varepsilon \ll 1)$. Es wird ein endliches zweites Moment

$$S_2' := \int_{R^3} |x'|^2 r(|x'|)\, dx' < +\infty$$

und eine detaillierte Gleichgewichtsbedingung

$$\exp\Big[-\frac{E+e\psi(x)}{kT}\Big]\, s(x,E;y,Q) = \exp\Big[-\frac{Q+e\psi(y)}{kT}\Big]\, s(y,Q;x,E)$$

vorausgesetzt. Die beiden Materialien können sich unterscheiden in der Konzentration $(N_I' \neq N_{II}')$ der lokalisierten Zustände und der Energiezustandsdichte $(g_I(E) \neq g_{II}(E)$. Unter Vereinfachung der Transportdynamik (Hoppingratengleichung) wurde die makroskopische Stromdichte $j_t^{\partial\Gamma}(x)$ bestimmt. Es gilt

$$j_t^{\partial\Gamma}(x) = \frac{\sigma^{\partial\Gamma}(x,\zeta_t(x))}{2}\Bigg(\lim_{\substack{z\to x\\ z\varepsilon I}} \frac{\partial[\zeta_t(z)+e\psi_t(z)]}{\partial z} + \lim_{\substack{z\to x\\ z\varepsilon II}} \frac{\partial[\zeta_t(z)+e\psi_t(z)]}{\partial z}\Bigg), \qquad x\varepsilon\partial\Gamma,$$

mit einer Leitfähigkeit

$$\sigma^{\partial\Gamma}(x,\zeta) = \frac{S_2' N_I' N_{II}' e^2}{6kT} \int\!\!\int \frac{\exp[(\zeta-E)/kT] s(x,E;x,Q)\, g_I(E)\, g_{II}(Q)}{(1+\exp[(\zeta-E)/kT])(1+\exp[(\zeta-Q)/kT])}\, dE\, dQ.$$

(ψ Potentialfunktion, e Elementarladung, k Boltzmannkonstante, T absolute Temperatur, ζ chemisches Potential)

Literatur

1. A. Liemant, *The drift-diffusion current for charge transport between two different disordered materials*, in Vorbereitung.

Stochastische Teilchensysteme und Approximation der Boltzmann-Gleichung

Bearbeiter: W. Wagner

Kooperation: M. Pulvirenti (Università di Roma „La Sapienza“, Rom), S. Rjasanow (Universität des Saarlandes, Saarbrücken)

Förderung: Volkswagen-Stiftung (RiP-Programm Oberwolfach)

In wichtigen Anwendungsbereichen wie Raumfahrt oder Vakuumtechnologie erfolgt die mathematische Beschreibung der zugrundeliegenden physikalischen Prozesse mittels hochdimensionaler und in der Regel nichtlinearer Integrodifferentialgleichungen. Ein typisches Beispiel einer solchen Gleichung, die Boltzmann-Gleichung aus der kinetischen Gastheorie, besitzt die Form

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t,x,v) + (v,\nabla_x) f(t,x,v) = \int_{\mathcal{R}^3} dw \int_{\mathcal{S}^2} de\, B(v,w,e) \Big[f(t,x,v^*)\, f(t,x,w^*) - f(t,x,v)\, f(t,x,w) \Big], \tag{1}$$

mit

$$v^* = v + e(e,w-v), \quad w^* = w + e(e,v-w). \tag{2}$$

Hier beschreibt die Funktion $f(t,x,v)$ die Konzentration von Teilchen mit der Geschwindigkeit v am Ort x zur Zeit t. Die Gleichung (1) besitzt eine quadratische Nichtlinearität, die sich aus der paarweisen elementaren Wechselwirkung ergibt. Diese besteht darin, daß bei der „Kollision“ zweier Teilchen sich ihre Geschwindigkeiten entsprechend (2) ändern, wobei $\mathcal{S}^2$ die Einheitssphäre ist und B der Kollisionskern genannt wird.

Auf Grund der hohen Dimension (f ist eine Funktion von sieben Veränderlichen) spielen stochastische Teilchensysteme nicht nur bei der theoretischen Fundierung, sondern insbesondere bei der numerischen Behandlung der Gleichung (1) eine entscheidende Rolle. Stochastische Partikelverfahren beruhen auf der Simulation eines geeigneten großen $(n \sim 10^6 - 10^7)$ Teilchensystems

$$\Big(x_i(t), v_i(t)\Big), \quad i = 1, \dots, n, \quad t \geq 0,$$

mit dessen Hilfe das Verhalten des realen Gases approximiert wird. Hier bezeichnen $x_i(t) \in D \subset \mathcal{R}^3$ und $v_i(t) \in \mathcal{R}^3$ jeweils die Position und die Geschwindigkeit des i-ten Teilchens zur Zeit t. Bei der numerischen Behandlung kinetischer Gleichungen mittels stochastischer Partikelverfahren treten Fluktuationen auf, d. h. die zu berechnenden Werte werden durch zufällige Schwankungen überlagert. Deshalb besteht in vielen Anwendungsbereichen, wie z. B. bei der Berechnung makroskopischer Größen hinter einem umströmten Körper oder bei Einströmvorgängen in ein Vakuum, ein wichtiges Problem in der Konstruktion von Verfahren mit reduzierten Fluktuationen. In den Arbeiten [3], [2] wurde ein neuartiger, auf einem verallgemeinerten Wechselwirkungsmechanismus basierender Zugang zu diesem Problem der Varianzreduktion entwickelt. In [1] wurden erste wichtige Ergebnisse zu dem für praktische Anwendungen äußerst relevanten Problem der Approximation stationärer Lösungen der Boltzmann-Gleichung (1) erzielt.

Eine wichtige Komponente der stochastischen Partikelverfahren für die Boltzmann-Gleichung ist der sogenannte Zeitzählmechanismus, durch welchen die auf einem gegebenen Zeitintervall notwendige Anzahl von Kollisionen bestimmt wird. In der Arbeit [4] wurden für das DSMC-Verfahren verschiedene neue Zeitzählmechanismen entwickelt und numerisch getestet. Ein besonders interessantes Ergebnis wurde in der Arbeit [5] erzielt. Mit Hilfe von auf der lokalen Temperatur in den Simulationszellen basierenden Abschätzungen wurde ein Zeitzählmechanismus entwickelt, der den bisher vorhandenen cutoff-Fehler bei hohen Geschwindigkeiten vermeidet. Darüber hinaus können die Zeitschritte zwischen den einzelnen Kollisionen wesentlich größer gewählt werden. Zusammen mit neu entwickelten effizienten Algorithmen zur Generierung der Index-Verteilung führt dies zu einer erheblichen Reduzierung der Rechenzeit. Insgesamt bewirken die neuen Resultate eine stabilere Arbeit des Verfahrens in Situationen, in denen sogenannte „seltene" Ereignisse (z. B. ein einzelnes Teilchen mit sehr hoher Geschwindigkeit) eine Rolle spielen. Insofern ordnen sich auch diese Ergebnisse in das oben beschriebene Problem der Varianzreduktion ein.

Literatur

1. S. CAPRINO, M. PULVIRENTI, W. WAGNER, *Stationary particle systems approximating stationary solutions to the Boltzmann equation*, SIAM J. Math. Anal., **29** (1998), No. 4, pp. 913–934.

2. S. RJASANOW, T. SCHREIBER, W. WAGNER, *Reduction of the number of particles in the stochastic weighted particle method for the Boltzmann equation*, J. Comput. Phys., **145** (1998), No. 1, pp. 382–405.

3. S. RJASANOW, W. WAGNER, *A generalized collision mechanism for stochastic particle schemes approximating Boltzmann type equations*, Comput. Math. Appl., **35** (1998), No. 1/2, pp. 165–178.

4. ——, *On time counting procedures in the DSMC method for rarefied gases*, Math. Comput. Simulation, **48** (1998), No. 2, pp. 153–178.

5. ——, *A temperature time counter scheme for the Boltzmann equation*, WIAS-Preprint No. 399, 1998.

Stochastische Partikelsysteme als numerische Verfahren für Probleme der Aerosoldynamik

Bearbeiter: W. Wagner, A. Eibeck, K. Sabelfeld (FG 6)

Kooperation: H. Babovsky (Technische Universität Ilmenau), A. Kolodko (Institut für Numerische Mathematik, Novosibirsk)

Förderung: DFG-Schwerpunktprogramm „Interagierende stochastische Systeme von hoher Komplexität“

Das physikalische Phänomen der Koagulation, d. h. der Prozeß der Bildung von Teilchen unterschiedlicher Größe aus Monomeren durch entsprechende Wechselwirkung, spielt in vielen Anwendungsbereichen, wie etwa der Aerosoltechnologie und der Umweltforschung, eine wichtige Rolle. Zur mathematischen Beschreibung dieses Vorgangs wird die Smoluchowski-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} c_l(t,r) + (V, \nabla_r) c_l(t,r) = \tag{1}$$
$$\frac{1}{2} \sum_{i+j=l} K_{i,j}\, c_i(t,r)\, c_j(t,r) - c_l(t,r) \sum_{i=1}^{\infty} K_{l,i}\, c_i(t,r) + F_l(t,r)$$

benutzt. Die Lösung $c_l(t,r)$ entspricht der Konzentration von Teilchen der Größe $l = 1,2,\ldots$ am Ort r zur Zeit t. Weiterhin bezeichnet V die Geschwindigkeit des Trägermediums, K den Koagulationskern und $F_l(t,r)$ einen Quellterm für Teilchen der Größe l.

Das Forschungsprojekt befaßt sich mit der Untersuchung des Zusammenhangs zwischen stochastischen wechselwirkenden Teilchensystemen und Lösungen von Gleichungen des Typs (1). Zum einen führen dabei Ergebnisse über das asymptotische Verhalten der stochastischen Systeme (bei wachsender Teilchenzahl) zu Aussagen über Eigenschaften der Lösung. Zum anderen können geeignete stochastische Systeme zur Entwicklung von Partikelverfahren zur numerischen Behandlung der makroskopischen Gleichung benutzt werden. In beiden genannten Richtungen wurden im Berichtszeitraum neue Ergebnisse erzielt.

In wichtigen Anwendungsbereichen, wie etwa dem Schadstofftransport in der Atmosphäre, finden Transport und Koagulation der Teilchen in einer turbulenten Strömung statt. Dabei wird das Trägermedium durch ein zufälliges Geschwindigkeitsfeld charakterisiert. Mathematisch hat man es hier mit einer nichtlinearen Integrodifferentialgleichung mit zufälligen Koeffizienten zu tun. In der Arbeit [2] wurden erste Untersuchungen zur Behandlung des räumlich inhomogenen Falls durchgeführt. An Hand numerischer Experimente wurde der Einfluß des zufälligen Mediums auf wichtige Charakteristika des Koagulationsprozesses, wie mittlere Teilchenanzahl oder Größenverteilung der Teilchen, untersucht.

Ein zur Koagulation von Teilchen entgegengesetzter Vorgang ist die Fragmentation, d. h. das Zerfallen von aus vielen Monomeren bestehenden Teilchen in kleinere Bestandteile. Die kontinuierliche Koagulations-Fragmentations-Gleichung

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} c(t,x) &= \frac{1}{2}\int_0^x K(x-y,y)\, c(t,x-y)\, c(t,y)\, dy - \int_0^\infty K(x,y)\, c(t,x)\, c(t,y)\, dy \\ &\quad + \int_0^\infty f(x,y)\, c(t,x+y)\, dy - \frac{1}{2}\int_0^x f(x-y,y)\, c(t,x)\, dy \end{aligned} \tag{2}$$

wurde in der Arbeit [1] betrachtet. Hier entspricht die Lösung $c(t,x)$ der Konzentration von Teilchen der Größe $x \in (0,\infty)$ zur Zeit t, und f bezeichnet den Fragmentationskern.

Für geeignete stochastische Teilchensysteme wurden unter sehr allgemeinen Voraussetzungen an die Kerne zum einen die relative Kompaktheit der entsprechenden empirischen Maße gezeigt und zum anderen die Häufungspunkte als Lösungen der Gleichung charakterisiert. Bemerkenswert an diesen Ergebnissen ist, daß sie neben den Erkenntnissen über das asymptotische Verhalten der stochastischen Systeme auch zu Existenzaussagen für Lösungen der Gleichungen (2) führen, die über die bisher bekannten hinausgehen. Desweiteren wurde auf der Grundlage des Studiums der relevanten Markov-Prozesse ein neuartiger numerischer Algorithmus vorgeschlagen.

Literatur

1. A. EIBECK, W. WAGNER, *Approximative solution of the coagulation-fragmentation equation by stochastic particle systems*, WIAS-Preprint No. 433, 1998.

2. A. KOLODKO, K. SABELFELD, W. WAGNER, *A stochastic method for solving Smoluchowski's coagulation equation*, WIAS-Preprint No. 423, 1998.

4.6 Forschungsgruppe Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik

4.6.1 Zusammenfassung

Die Forschungsgruppe befaßt sich mit Arbeiten zur angewandten, algorithmisch orientierten Wahrscheinlichkeitstheorie und Mathematischen Statistik, die konstruktive und theoretische Aspekte statistischer und numerischer Aufgabenstellungen beinhalten und ergänzt werden durch Komplexitätsuntersuchungen. Im Vordergrund stehen dabei Anwendungen in den Wirtschafts- und Ingenieurwissenschaften. Insbesondere geht es um die Behandlung ökonometrischer Probleme mit Methoden der Nichtparametrischen Statistik, um die Risikomodellierung für Finanzmärkte mit Hilfe stochastischer Differentialgleichungen und um die Effizienz stochastischer Algorithmen. Die Forschungsgruppe wirkt an interdisziplinären Anwendungsprojekten mit und entwickelt effiziente und problemorientierte Software.
Mit dem Vordringen stochastischer Modellbildungen bei der Untersuchung von Anwendungsproblemen wächst der Bedarf an effektiven statistischen Verfahren. *Nichtparametrische statistische Verfahren* haben sich in der Vergangenheit als sehr erfolgreich bei der stochastischen Modellierung in Wirtschafts- und Ingenieurwissenschaften erwiesen. Sie werden daher derzeit intensiv untersucht. Auch *stochastische numerische Verfahren* sind Gegenstand weltweiter Forschungen; Monte-Carlo-Methoden werden dann eingesetzt, wenn herkömmliche Methoden auch bei Einsatz modernster Rechentechnik nicht mehr durchführbar sind. So ist die Simulation stochastischer Differentialgleichungen von sehr großer Bedeutung für die Bewertung komplizierter Portfolios und Finanzderivate.
Die Forschungstätigkeit der Gruppe orientiert sich derzeit an den Anwendungsfeldern

- Modellierung von Aktien-, Zins- und Wechselkursen und Bewertung von Zinsderivaten,
- Statistische Verfahren für Ökonometrie und Finanzmathematik, Value-at-Risk,
- Stochastische Modelle für Partikelverhalten in turbulenten Strömungen,
- Signalverarbeitung in Magnetresonanz- und Ultraschalltomografie.

Im Bereich Mathematical Finance und Statistik ist die Zusammenarbeit mit dem interdisziplinären Sonderforschungsbereich 373 *Quantifikation und Simulation Ökonomischer Prozesse* an der Humboldt-Universität zu Berlin von besonderer Bedeutung.

4.6.2 Projekte

Dynamische Monte-Carlo-Verfahren

Bearbeiter: P. Mathé

Schwerpunkt der Arbeit war die Untersuchung der Konvergenzgeschwindigkeit von Markov Chain Monte-Carlo-Verfahren zur numerischen Integration. In diesem Kontext ist der Zustandsraum der Markovketten im allgemeinen nicht endlich, so daß die Techniken, die in den wegweisenden Arbeiten von Diaconis et. al, [2], bereitgestellt wurden, nicht übertragbar sind. Beim Übergang von diskreten zu allgemeineren Zustandsräumen offenbart sich, daß geeignete Techniken der Funktionalanalysis eingesetzt werden müssen, um zu Aussagen der asymptotischen Varianz zu gelangen. Als geeigneter Ersatz der Ergodizität, die im diskreten ausreicht, um entsprechende Aussagen zu treffen, erweist sich die *gleichmäßige Ergodizität*, die bereits von Doeblin, siehe [3], untersucht wurde. Dadurch gelang es, ohne Kompaktheitsannahmen Darstellungen der asymptotischen Varianz herzuleiten [4]. Auch braucht nicht a priori angenommen zu werden, daß die Markovketten stationär sind.
Als interessante Anwendung wurden *Metropolisverfahren* untersucht, vgl. [5]. Faßt man Metropolisketten als Störungen der unterliegenden Ketten auf, dann führen Vergleichstechniken, die im diskreten von Diaconis und Saloff-Coste [1] eingebracht wurden, zu Abschätzungen der Konvergenz. Die dazu nötigen Voraussetzungen an die Markovketten sind allerdings zu stark, um die praktisch relevanten Fälle zu erfassen.

Literatur

1. P. Diaconis, L. Saloff-Coste, *Comparison theorems for reversible Markov chains,* Ann. Appl. Probab., **3** (1993), No. 3, pp. 696–730.

2. ——, *Logarithmic Sobolev inequalities for finite Markov chains,* Ann. Appl. Probab., **6** (1996), No. 3, pp. 695–750.

3. J. L. Doob, *Stochastic Processes,* John Wiley & Sons, New York, 1953.

4. P. Mathé, *Numerical integration using Markov chains,* Manuskript, 1998.

5. L. Tierney, *A note on Metropolis-Hastings kernels for general state spaces*[4]*,* 1995.

[4] http://www.stat.umn.edu/PAPERS/html_prints/tr606/mhnote.html

Simulation der Ultraschallausbreitung

Bearbeiter: P. Mathé, W. Metzner, J.-H. Zacharias-Langhans

Kooperation: G&W INSTRUMENTS (Berlin), Y. Kashtanov (St. Petersburg)

Förderung: BMBF

Das bereits im vergangenen Jahr entwickelte Programm **US 2.0** zur Visualisierung und Analyse der gemessenen Daten wurde weiterentwickelt, so daß es nun eine benutzerfreundliche Windows-Oberfläche erhalten hat, sowie Schnittstellen, die es erlauben, zur Laufzeit Daten mit anderen Programmen, die die Ausbreitung von Schallwellen in nichthomogenen Medien simulieren, auszutauschen.
Der bisherige Industriepartner SONOTECH ist nunmehr Partner der Firma **G&W Instruments** (Berlin) geworden. G&W INSTRUMENTS stellt uns erheblich aufwendigere und präzisere Meßapparaturen zur Verfügung, als dies SONOTECH möglich war. So sind wir nun durch die Anschaffung eines Wassertanks in der Lage, reproduzierbare und stabile Messungen an komplizierteren Objekten, wie z. B. organischen Materialien, durchzuführen.
Aus mathematischer Sicht muß bemerkt werden, daß die These, derzufolge sich Schallwellen in den von uns untersuchten Materialien Polyethylen und Plexiglas gemäß der Telegrafengleichung ausbreiten, zwar bestätigt werden konnte, aber nicht zu der gewünschten Differenzierung zwischen Streu- und Absorptionsparametern führte, sondern eine im Rahmen unserer Meßgenauigkeit mit der Wellengleichung gleichwertige Beschreibung der Signale darstellt. Es wird daher versucht, die Signaldeformationen durch andere Effekte, insbesondere an Materialübergängen zu erklären, vgl. [2]. Jedoch hat die Analyse der auf M. Kac zurückgehenden probabilistischen Darstellung der Lösung der eindimensionalen Telegrafengleichung zu einem neuen Beweis derselben geführt, der sich zumindest auf zwei, wahrscheinlich auch auf drei Dimensionen übertragen läßt. Dies führt zu einem speziellen Grenzwertsatz auf den Gruppen $SO(1)$, $SO(2)$ und $SO(3)$ in den entsprechenden Raumdimensionen $\mathbb{R}$, $\mathbb{R}^2$ und $\mathbb{R}^3$. Physikalisch beschreibt dies die diskrete Approximation des Strahlungstransportproblems

$$\frac{\partial p_\alpha}{\partial t} = -< e_\alpha, \nabla > p_\alpha = -\int K(\alpha, \alpha') p'_\alpha d\alpha',$$

wobei α Raumwinkel bezeichnet. Obige Gleichung läßt sich unter bestimmten Annahmen aus der Wellengleichung ableiten. Derartige Ansätze gehen auf [3] zurück. Dieselbe Darstellung eröffnet weiterhin die Möglichkeit zu einer probabilistischen Interpretation der sogenannten TLM-Methode zur Lösung von Wellengleichungen in nichthomogenen Medien. Hier scheint uns ein geeigneter Ansatz zur Parameterbestimmung zu liegen, analog zu Methoden, die in der Geologie verwandt werden, siehe [1].

Literatur

1. M. ASH, W. KOHLER, G. PAPANICOLAOU, M. POSTEL, B. WHITE, *Frequency content of randomly scattered signals,* SIAM Rev., **33** (1998), pp. 519–626.

2. Y. N. KASHTANOV, *A model of reflected pulse,* Manuskript, 1998.

3. A. KISYŃSKI, *On M. Kac's probabilistic Formula for the Solution of the Telegraph Equation,* Ann. Polon. Math., **XXIX** (1974), pp. 259–272.

Numerische Methoden für nichtlineare parabolische partielle Differentialgleichungen unter Anwendung stochastischer Verfahren. Einige Probleme der nichtlinearen stochastischen Dynamik

Bearbeiter: G. N. Milstein

Kooperation: M. V. Tretjakov (Ural State University, Ekaterinburg, Forschungstipendiat der Alexander von Humboldt-Stiftung)

Förderung: Alexander von Humboldt-Stiftung

Es gibt erst relativ wenige Arbeiten, die die numerischen Aspekte stochastischer Verfahren für deterministische oder stochastische nichtlineare partielle Differentialgleichungen behandeln. Entscheidend ist hierbei der Mangel an einer geeigneten probabilistischen Darstellung der Lösungen für solche Gleichungen. Jedoch besteht zweifellos Bedarf zur Entwicklung stochastischer numerischer Methoden für solche Problemklassen.
In den Arbeiten [1], [2] und in dem Vortrag [3] wird eine neue Klasse der Schichtenmethode für nichtlineare parabolische partielle Differentialgleichungen und reaction-diffusion Systeme vorgeschlagen. Diese Methoden werten Ideen der schwachen Approximation von stochastischen Differentialgleichungen aus. Obwohl sie probabilistischer Natur sind, sind die in [1–3] vorgeschlagenen Algorithmen deterministisch.
Eine größere Anzahl numerischer Experimente für Explosionslösungen nichtlinearer Gleichungen, für Stoßwellen der Bürgers-Gleichung, für die Wellenausbreitung der verallgemeinerten Kolmogoroff-Petrovskii-Piskunoff-Gleichung mit einem kleinen Parameter bestätigt die Effektivität der entwickelten Methoden.
Das Phänomen „Stochastische Resonanz“ entsteht als Ergebnis des Zusammenspiels zwischen Rauschen und periodischen Kräften in bistabilen Systemen. In Systemen von SDG, die mit stochastischer Resonanz verbunden sind, erscheinen oft reguläre Oszillationen. In [4] werden neue mathematische Charakteristiken der Regularität dieser Oszillationen eingeführt. Diese Charakteristiken sind extrem abhängig von der Intensität des Rauschens, von der Amplitude und von der Frequenz der periodischen Kräfte. Man kann sie für die Erforschung der regulären Oszillationen in monostabilen Systemen, in Systemen mit multiplikativem Rauschen und so weiter benutzen.
Über die Stabilität von Gleichgewichtszuständen unter zufälligen Störungen wurden zahlreiche Arbeiten veröffentlicht. Wichtige Ergebnisse auf diesem Gebiet sind mit Konzeptionen von Lyapunov-Exponenten, Lyapunov-Momentexponenten, großen Abweichungen und dem Index der Stabilität verbunden. In [6] werden diese Konzeptionen auf die Orbitalstabilität übertragen. Die Arbeit [7] ist eine Untersuchung von Gesetzen der Bewegung auf Gleitflächen für sowohl deterministische als auch stochastische Systeme. Die Probleme der Arbeiten [4–7] gehören zur nichtlinearen stochastischen Dynamik.

Literatur

1. G. N. MILSTEIN, *The probability approach to numerical solution of nonlinear parabolic equations,* WIAS-Preprint No. 380, 1997.

2. G. N. MILSTEIN, M. V. TRETYAKOV, *Numerical methods for nonlinear parabolic equations with small parameter based on probability approach,* WIAS-Preprint No. 396, 1998.

3. G. N. MILSTEIN, *The probability approach to numerical solution of nonlinear parabolic equations,* (Vortrag) International Congress of Mathematicians, Berlin, 21. August 1998.

4. G. N. MILSTEIN, M. V. TRETYAKOV, *Regular oszillations in systems with stochastic resonance,* WIAS-Preprint No. 411, 1998.

5. M. V. TRETYAKOV, *Numerical technique for studying stochastic resonance,* Phys. Rev. E, **57** (1998), pp. 4789–4794.

6. G. N. MILSTEIN, *Orbital stability index for stochastic systems,* erscheint in: Stochastic Anal. Appl.

7. G. N. MILSTEIN, A. YU. VERETENNIKOV, *On deterministic and stochastic sliding modes via small diffusion approximation,* WIAS-Preprint No. 401, 1998.

Statistische Clusteranalyse

Bearbeiter: H.-J. Mucha

Kooperation: U. Grimmer (Forschungszentrum Daimler Benz AG Ulm), S. Hizir (Humboldt-Universität zu Berlin, SFB 373)

Hierarchische (agglomerative) Clusteranalysemethoden in Originalversion sind wegen der hohen Komplexität nicht zur Suche nach Auffälligkeiten und Subpopulationen in Massendaten geeignet. Auch modernste Computer können den mit der Beobachtungsanzahl in quadratischer Ordnung ansteigenden Rechenaufwand nicht bewältigen. In der Anwendungspraxis braucht trotzdem nicht auf einige dieser Methoden verzichtet werden. Beispielsweise kann unter geeigneten Annahmen (ohne detaillierte Kenntnis der Vorgeschichte des Fusionsprozesses) die hierarchische Clusteranalyse ab einem beliebigen Fusionsstand ausgeführt werden und dennoch unverfälschte Ergebnisse liefern.
Die in der praktischen Anwendung, z. B. beim Data Mining, relevanten Vorteile der hierarchischen Clusteranalyse sind insbesondere die Verarbeitung von gemischten Daten (quantitative, ordinale und qualitative Informationen) und die Zuordnung neuer Beobachtungen zu vorhandenen Klassen. So ist eine Zuordnung zu einem von K Clustern einer Hierarchie im Mittel weit weniger aufwendig als die mit linearem Aufwand durchzuführende Eingruppierung in K Cluster einer Partition.

Literatur

1. H.-J. MUCHA, *Clusteranalyse mit Mikrocomputern,* Akademie Verlag, Berlin, 1992.

2. ——, *ClusCorr: Cluster analysis and multivariate graphics under MS EXCEL,* in: *Classification and multivariate graphics: Models, software and applications,* WIAS-Report No. 10 (H.-J. Mucha, H. H. Bock, Hrsg.), Berlin, 1996, pp. 97–105.

3. U. GRIMMER, H.-J. MUCHA, *Datensegmentierung mittels Clusteranalyse,* in: *Data Mining. Theoretische Aspekte und Anwendungen,* (G. Nakhaeizadeh, Hrsg.), Physica-Verlag, Heidelberg, 1998, pp. 109–141.

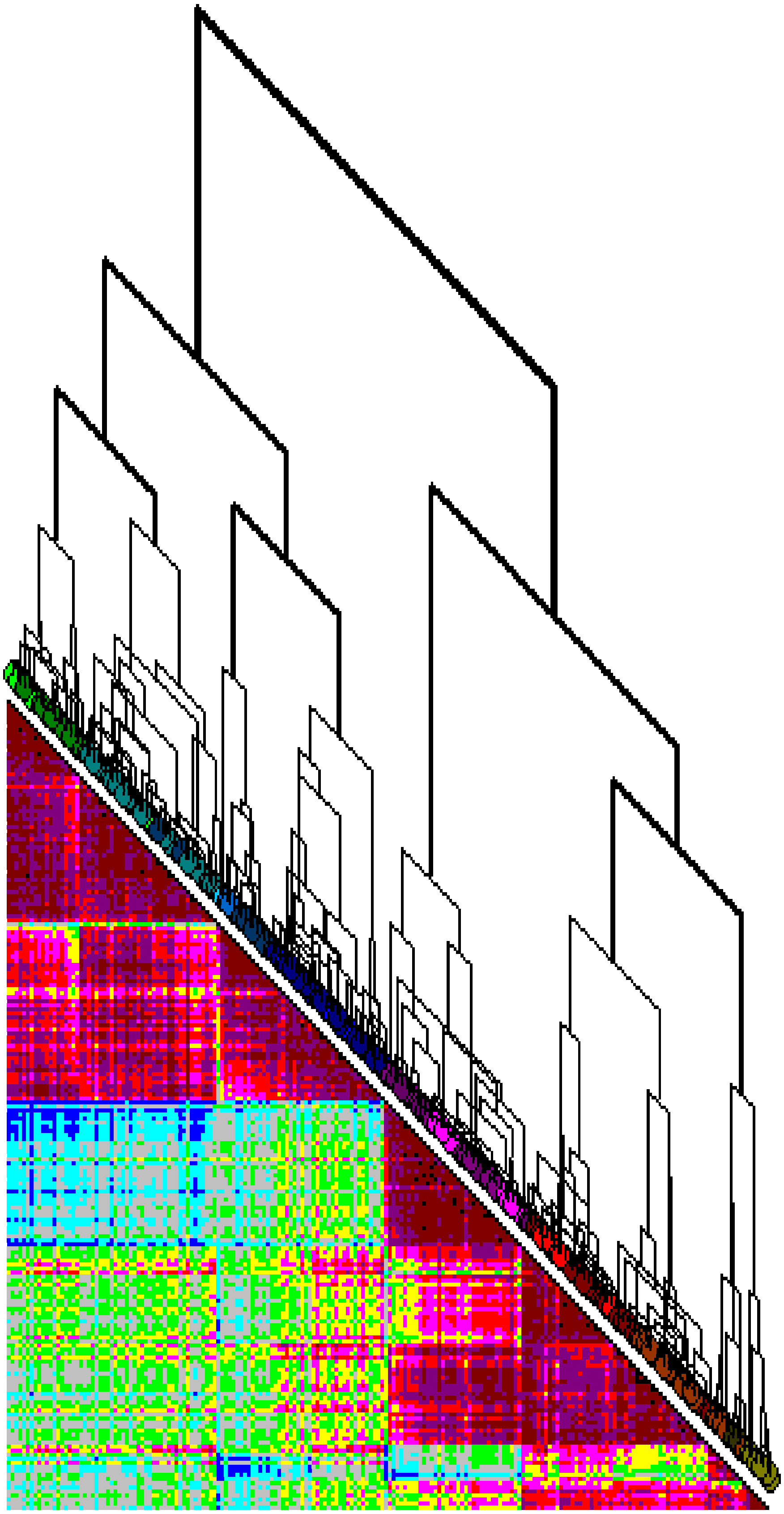


Abb. 1: Distanzmatrix mit Dendrogramm

Entscheidungstheorie für nichtparametrische Experimente

Bearbeiter: M. Nussbaum

Kooperation: V. Genon-Catalot (Universität Marne-la-Vallé, Frankreich), G. Golubev (Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau) I. Grama (Stipendiat der Alexander von Humboldt-Stiftung, z. Zt. Gießen), M. Jähnisch (Stipendiat des Graduiertenkollegs „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“), J. Klemelä (Sonderforschungsbereich 373 „Quantifikation und Simulation Ökonomischer Prozesse“/Universität Helsinki)

Förderung: Sonderforschungsbereich 373 „Quantifikation und Simulation Ökonomischer Prozesse, Berlin; Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Berlin

In der asymptotischen Theorie statistischer Experimente geht es um die Approximation allgemeiner Modelle durch einfachere; es entsteht eine Theorie, die Grundlagenprobleme der mathematischen Statistik mit Hilfe abstrakter Konzepte behandelt. Ein zentrales Thema der Forschungsgruppe in den letzten Jahren war in diesem Zusammenhang die asymptotische Äquivalenz nichtparametrischer Experimente zu Gaußschen Folgen im Sinne des Defizienzabstandes. Beim Problem der konstruktiven Realisierung konnte ein wesentlicher Fortschritt erzielt werden, indem es gelang, erstmals für ein nichtparametrisches schlechtgestelltes Problem einen Markov-Kern explizit anzugeben, der die asymptotische Äquivalenz realisiert [1]. Dies betraf den Übergang vom Modell unabhängiger identisch verteilter Beobachtungen auf das Einheitsintervall („Dichteschätzung“) zum Modell der Signalerkennung im Gaußschen weißen Rauschen. Ein verwandtes Resultat betrifft den Übergang vom Modell einer stationären Gaußschen Folge mit glatter Spektraldichte zum Modell der Signalerkennung [2], da hierbei einzelne Funktionale der Daten (z. B. empirische Korrelationskoeffizienten) aufgrund eines lokalen Grenzwertsatzes bereits asymptotische normale Dichten haben, hierbei kam eine Variante eines lokalen Grenzwertsatzes mit wachsender Dimension zur Anwendung.
Im Gegensatz dazu gelingt es bei der Beweismethodik über *coupling* von Likelihood-Prozessen mittels funktioneller Ungarischer Konstruktion (KMT-Ungleichung) im allgemeinen nicht, den Markov-Kern in sinnvoller Weise explizit anzugeben. Jedoch führt zur Zeit noch allein dieser nichtkonstruktive Ansatz zu optimalen Resultaten in Bezug auf den Parameterraum (Glattheitsgrenze $1/2$, vgl. Brown, Zhang [3]). Das in [4] bewiesene Resultat über die Gaußsche Approximation eines nichtparametrischen Regressionsmodells, das aus einer parametrischen Verteilungsfamilie durch zeitliche Variation des Parameters entsteht, basiert auf der nichtkonstruktiven Likelihood-Methodik. Eine Verallgemeinerung auf ein in Zeit und Verteilung nichtparametrisches Regressionsmodell ist der Inhalt der nunmehr eingereichten Dissertationsschrift [5].
Die Resultate von [4] für ein Regressionsmodell aus unabhängigen Beobachtungen fanden eine überraschende Anwendung, indem ein Modell diskreter Beobachtungen eines Markovschen Diffusionsprozesses mit kleinem Rauschen [6] im Sinne statistischer Äquivalenz hierauf zurückgeführt werden konnte. Dieses Ergebnis knüpft an ein früher erzieltes Resultat zur Diskretisierung von Diffusionsmodellen an (siehe [7]).

Literatur

1. J. KLEMELÄ, M. NUSSBAUM, *Constructive asymptotic equivalence of density estimation and Gaussian white noise,* Discussion paper No. 53, Sonderforschungsbereich 373, Humboldt-Universität zu Berlin, 1998.

2. G. GOLUBEV, M. NUSSBAUM, *Asymptotic equivalence of spectral density and regression estimation,* WIAS-Preprint No. 420, 1998.

3. L. D. BROWN, C.-H. ZHANG, *Asymptotic nonequivalence of nonparametric experiments when the smoothness index is $\frac{1}{2}$,* Ann. Statist., **26** (1998), No. 1, pp. 279–287.

4. I. GRAMA, M. NUSSBAUM, *Asymptotic equivalence for nonparametric generalized linear models,* Probab. Theory Related Fields, **111** (1998), pp. 167–214.

5. M. JÄHNISCH, *Asymptotische Äquivalenz für ein Modell unabhängiger nicht identisch verteilter Daten,* Dissertationsschrift, eingereicht bei der Humboldt-Universität zu Berlin, 1998.

6. V. GENON-CATALOT, C. LARÉDO, M. NUSSBAUM, *A diffusion representation of the nonparametric iid experiment on an interval,* WIAS-Preprint, No. 413, 1998.

7. G. MILSTEIN, M. NUSSBAUM, *Diffusion limits for nonparametric autoregression,* Probab. Theory Related Fields, **112** (1998), pp. 167–214.

Adaptive Verfahren der Bildverarbeitung

Bearbeiter: J. Polzehl, V. Spokoiny

Kooperation: F. Kruggel (Max-Planck-Institut für Kognitive Neurowissenschaften, Leipzig), G. Winkler (Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit, München), F. Godtliebsen (Universität Tromsø), G. Sebastiani (Institut für Angewandte Mathematik, Rom)

Förderung: SFB 373 „Quantifikation und Simulation Ökonomischer Prozesse“, Humboldt-Universität zu Berlin

Moderne Untersuchungsmethoden in Technik, Medizin, Umweltschutz, Meteorologie und Geologie liefern vielfach Daten in Form von zwei- und dreidimensionalen Bildern. Beispiele solcher Verfahren sind Satellitenaufnahmen, Radar, Röntgenverfahren, Ultraschall und Magnet-Resonanz (MR)-Aufnahmen. In der Regel sind die gewonnenen Daten fehlerbehaftet; es entsteht das Problem, aus den beobachteten Bildern die wesentliche, zugrundeliegende Struktur herauszufiltern. Diese Aufgabenstellung ist von vielen Autoren unter Nutzung verschiedener statistischer Modellansätze für verschiedene spezifische Anforderungen an das rekonstruierte Bild untersucht worden (siehe z. B. [6] für eine Auswahl von Verfahren im Kontext der Analyse von Magnet-Resonanz-Aufnahmen). Ziele der Rekonstruktion sind z. B. ein Entrauschen der Bilder, das Finden homogener Bereiche und die Verstärkung von Kontrasten. Im Rahmen des Projektes wird ein neuartiges lokal adaptives Glättungsverfahren (AWS, Adaptive Weights Smoothing) entwickelt, das über in diesem Kontext besonders wünschenswerte Eigenschaften wie Erhaltung von Ecken und Kanten (Kontrast) und „optimale“ Reduktion des Rauschens verfügt. Wir betrachten das folgende Regressionsmodell

$$Y = f(x) + \varepsilon \tag{1}$$

mit Y – beobachtete Werte an den Bildpunkten, $x \in \mathbb{R}^d$ – Bildpunkte im d-dimensionalen Raum und ε – zufällige Beobachtungsfehler. Unser Verfahren bestimmt für jeden Bildpunkt iterativ geeignete Umgebungen $V(x)$ und schätzt $f(x)$ durch eine Mittelung der Beobachtungswerte über $V(x)$. Simulative Untersuchungen anhand künstlicher Bilder zeigen eine Überlegenheit gegenüber klassischen Glättungsverfahren insbesondere in Situationen, in denen die Funktion f Sprünge aufweist und sich gut durch eine stückweise konstante Funktion approximieren läßt.
Mittelung über mehrfache Aufnahmen der gleichen Schicht ist z. Zt. die bevorzugte Methode zur Reduktion des Rauschens in MR-Bildern. Statistische Methoden sind in der Lage, Bilder gleicher Qualität aus einer einzelnen Aufnahme zu erzeugen. Wir haben unseren Algorithmus bei der Rekonstruktion von hochauflösenden zwei- bzw. dreidimensionalen MR-Aufnahmen erprobt.

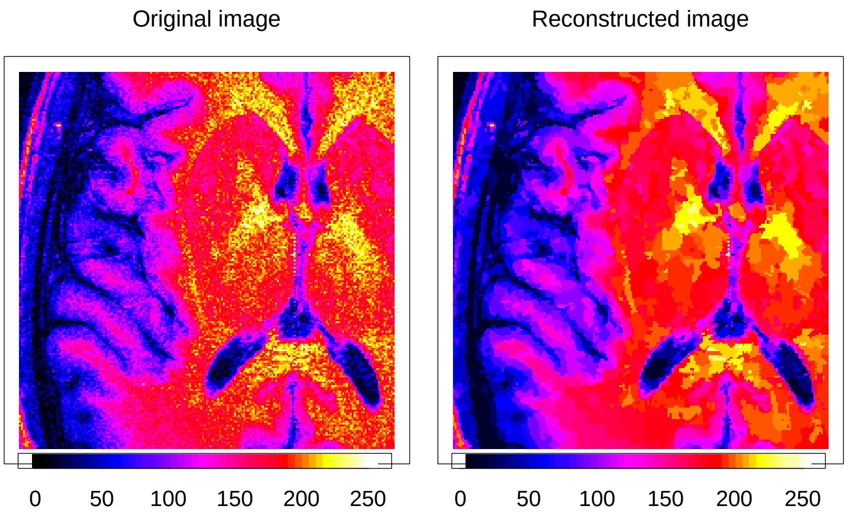


Abb. 1: Original und Rekonstruktion einer Schicht einer dreidimensionalen MRI-Aufnahme

Abb. 1 zeigt einen Ausschnitt der Originaldaten und einer Rekonstruktion einer Schicht einer MRI-Aufnahme (512x512 Voxel).
Die AWS zugrundeliegenden Ideen erlauben die effiziente Bearbeitung wesentlich komplizierterer Probleme. Funktionelle Magnet-Resonanz-Bilder (fMRI) entstehen bei Experimenten zur Bestimmung funktioneller Zentren im Gehirn. Hierbei werden Patienten einer Folge von Signalen ausgesetzt. Gleichzeitig wird eine Zeitreihe von Magnet-Resonanz-Bildern aufgezeichnet. In den Voxeln durch das Signal aktivierter Regionen des Gehirns lassen sich induzierte Signale (BOLD-Effekt) beobachten. Für eine Einführung siehe [1] oder [2]. Die Qualität der Einzelbilder ist auf Grund der kurzen Zeitabstände zwischen den Aufnahmen relativ schlecht. Unser Verfahren ermöglicht eine effiziente Signalerkennung durch die adaptive Glättung in den Raumkoordinaten.

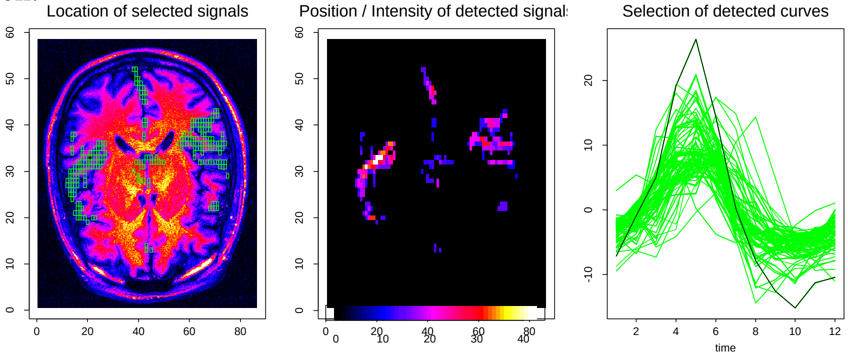


Abb. 2: Signalerkennung in fMRI

Abb. 2 zeigt die detektierten Signale für einen fMRI Datensatz (912 Bilder à 64x128 Voxel, MPI für Kognitive Neurowissenschaften Leipzig).
In dynamischen MRI wird die zeitliche Wirkung eines Kontrastmittels beobachtet. Eine Klassifikation von Gewebe, z. B. eine Entscheidung, ob Gewebeschädigungen vorliegen, wird auf Basis der in den Pixeln beobachteten zeitlichen Verläufe vorgenommen. Eine deutliche Verbesserung der Klassifikationsresultate kann durch adaptive Glättung in den Raumkoordinaten erreicht werden.

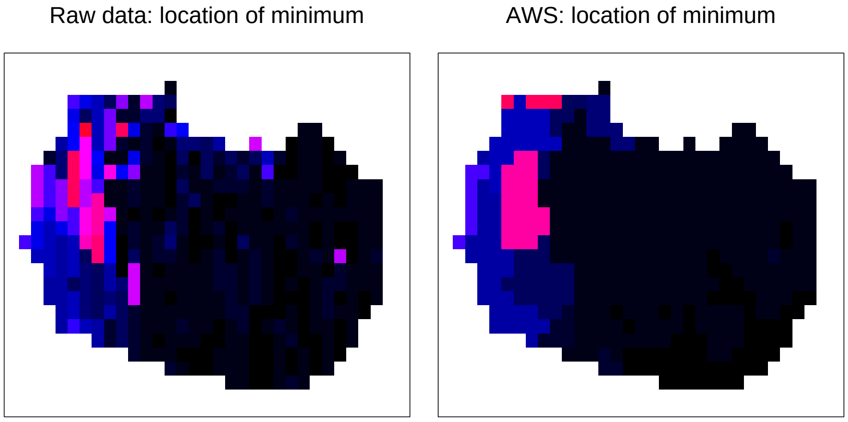


Abb. 3: Klassifikation geschädigter Regionen mit dMRI

Abb. 3 zeigt Klassifikationsresultate basierend auf den beobachteten Verlaufskurven (links) und auf räumlich geglätteten Kurven (rechts) für ein dMRI-Experiment zur Identifizierung geschädigter Gehirnregionen bei Ratten (30 Bilder à 128x128 Voxel, MR Center Trondheim).

Literatur

1. N. Lange, *Tutorial in biostatistics: Statistical approaches to human brain mapping by functional magnetic resonance imaging,* Statistics in Medicine, **15** (1996), pp. 389–428.

2. SPM course notes 1997, Wellcom Dept. of Cognitive Neurology, Institute of Neurology, University College London, http://www.fil.ion.ucl.ac.uk/spm/course/notes.html.

3. J. Polzehl, V. Spokoiny, *Image denoising: Pointwise adaptive approach,* Discussion paper No. 38, Sonderforschungsbereich 373, Humboldt-Universität zu Berlin, 1998.

4. ——, *Adaptive weights smoothing with applications to image segmentation,* WIAS-Preprint No. 405, 1998.

5. ——, *Adaptive image denoising with applications to MRI,* erscheint in: Computing Science and Statistics, Proceedings of the 30th Symposium of the Interface, Minneapolis, Mai 1998.

6. C. K. Chu, I. K. Glad, F. Godtliebsen, J. S. Marron, *Edge preserving smoothers for image processing (with discussion)*, Journal of the American Statistical Association, **93** (1998), pp. 526–556.

Statistische Inferenz in Ökonometrie und Finanzmathematik

Bearbeiter: J. Polzehl, V. Spokoiny

Förderung: SFB 373 „Quantifikation und Simulation Ökonomischer Prozesse“, Humboldt-Universität zu Berlin

Ziel des Projektes ist es, neue adaptive Schätzmethoden für Zeitreihen aus verschiedenen Anwendungsgebieten, insbesondere der Ökonometrie und Finanzmathematik zu entwickeln. Die existierenden Methoden beschränken sich auf Situationen, in denen die zu untersuchenden Daten eine Stationaritätsannahme erfüllen. Diese Annahmen sind sehr restriktiv und für typische Anwendungsbeispiele nicht adäquat. Wir bieten einen neuen Ansatz, der zuläßt, daß die zugrundeliegenden Parameter von der Zeit abhängen. Unter einem solchen Modellansatz besteht das Ziel der Untersuchung in der Bestimmung der laufenden Werte der Parameter aufgrund zeitlich vorangehender Daten. Als Kriterien werden sowohl die Empfindlichkeit der Änderungen von Modellparametern als auch die Stabilität unter Stationaritätsannahme benutzt. Wir entwickeln zwei verschiedene adaptive Schätzmethoden. Die erste verallgemeinert die in [1] entwickelte Methode für die Regressionsschätzung auf Zeitreihen. Diese Methode basiert auf der adaptiven Wahl eines Fensters für die lokale Schätzung der Parameter. Die zweite Methode benutzt die „Adaptive Weights Smoothing“-Idee, die ursprünglich für die Bildverarbeitung in [2] vorgeschlagen wurde, adaptiert für die Untersuchung von Zeitreihen. Beide Methoden demonstrieren ein vernünftiges Verhalten für Simulationsbeispiele. Sie zeichnen sich durch eine hohe Empfindlichkeit für Parameteränderungen (Strukturbrüche) aus. Die Methoden lassen sich für multiple Zeitreihen verallgemeinern, siehe auch [1].

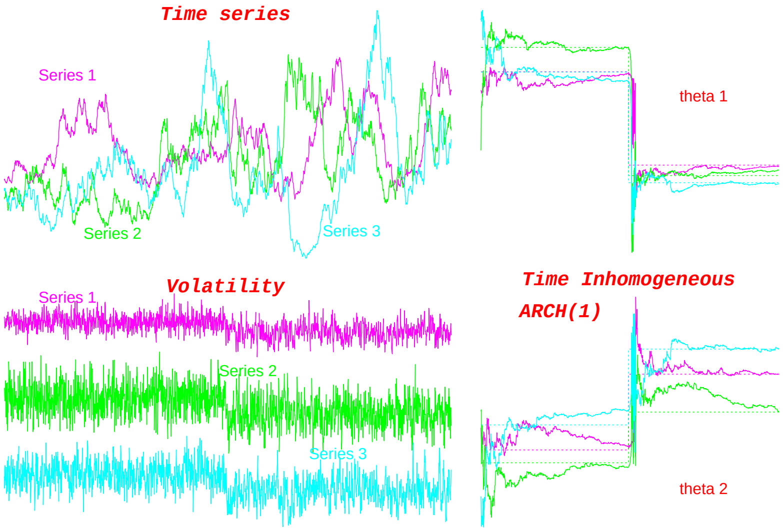


Abb. 1: Erkennung von Strukturbrüchen in multiplen zeitinhomogenen ARCH-Prozessen

Literatur

1. V. Spokoiny, *Estimation of a function with discontinuities via local polynomial fit with an adaptive window choice,* Ann. Statist., **26** (1998), No. 4, pp. 1356–1378.

2. J. Polzehl, V. Spokoiny, *Image denoising: Pointwise adaptive approach,* Discussion paper No. 38, Sonderforschungsbereich 373, Humboldt-Universität zu Berlin, 1998.

Stochastische Modelle und Monte-Carlo-Methoden für den Transport von koagulierenden Partikeln in turbulenten Strömungen

Bearbeiter: K. Sabelfeld

Kooperation: S. Orszag (Princeton University, USA), Timo Vesala (Universität Helsinki), P. K. Yeung (Georgian Institute of Technology, USA), O. Kurbanmuradov (Physikalisch-Technisches Institut, Turkmenische Akademie der Wissenschaften, Aschchabad), A. Levykin (Rechenzentrum und Institut für Mathematische Geophysik, Russische Akademie der Wissenschaften, Novosibirsk)

Förderung: INTAS Project INTAS-RFBR-95-0726 und Nato Linkage Grant N 971664

Die Entwicklung von mathematischen und insbesondere von stochastischen Modellen des turbulenten Transports von koagulierenden Partikeln ist von großer Bedeutung, weil die Wahrscheinlichkeitstheorie eine natürliche Beschreibung für Mischungen und Reaktionen von kleinen Partikeln in turbulenten Strömungen liefert [1], [3]. Deshalb stellt die Untersuchung des Transportes von koagulierenden Aerosol-Partikeln in einer realistischen Umwelt, wie einer turbulenten Atmosphäre, einen Schwerpunkt dar.
Solche Medien sind charakterisiert durch hohe Fluktuationen der physikalischen Felder. Hierbei ändern sich die zeitlichen und räumlichen Maßstäbe enorm. Dies ist die Ursache aller Schwierigkeiten bei der Benutzung konventioneller deterministischer Methoden, die auf der halbempirischen Gleichung des turbulenten Transports basieren. Deshalb ist die stochastische Betrachtungsweise, die die Natur der Fluktuationen effektiv beschreibt, von besonderem Interesse.
Die stochastischen Algorithmen basieren auf neuen Eulerschen und Lagrangeschen Modellen, die die Bewegung der Partikel in turbulenten Medien beschreiben und auf probabilistischen Darstellungen der Lösungen der Smoluchowski-Koagulations-Gleichung [8].
Die einfachste inhomogene Form der Smoluchowski-Gleichung ist [8]:

$$\frac{\partial n^E(t,x)}{\partial t} + V(t,x)\cdot\nabla_x n^E(t,x) = K\left(n^E(t,x)\right) + F(x,t); \quad n^E(0,x) = 0; \quad x \in R^3;\ t \in [0,T].$$

$$K\left(n^E(t,x)\right) = \left\{ \frac{1}{2}\sum_{i+j} K_{ij} n_i^E(t,x) n_j^E(t,x) - n_l^E(t,x)\sum_{i=1}^{\infty} K_{il} n_i^E(t,x) \right\}_{i=1}^{\infty},$$

wobei $n^E(t,x) = \left\{n_i^E(t,x)\right\}_{i=1}^{\infty}$ und $V(t,x)$ ein stochastisch simulierendes Vektorfeld der Geschwindigkeit mit gegebener Verteilung ist. Falls die Koagulation in einer turbulenten Strömung betrachtet wird, ist die Abschätzung der Partikel-Entwicklung ein sehr schwieriges und auch noch nicht gelöstes Problem. Mathematisch kann man dieses Problem als Smoluchowski-Gleichung mit zufälligen Koeffizienten betrachten [7].
Die stochastischen Lagrangeschen Modelle sind hoch entwickelt im Fall von Ein-Partikel-Verteilungen [14], aber die Entwicklung der Lagrangeschen Zwei-Partikel-Modelle begegnet einer Serie von Schwierigkeiten. Nach Thomson [10] erwähnen wir zwei solche Probleme: (1) das Problem vom eindeutigen Modell, und (2) das „Two-to-one Reduction“-Prinzip. Tatsächlich führt die allgemeine „Well-mixed Condition“ von Thomson zu einer Serie von verschiedenen

stochastischen Differentialgleichungen für die Geschwindigkeit. Es existierten keine mathematischen und auch keine physikalischen Hypothesen, die die Eindeutigkeit garantieren. Und außerdem waren für die existierenden Modelle wichtige physikalische Bedingungen nicht erfüllt. Und daraus folgt, daß Thomsons „Two-to-one Reduction“-Prinzip nicht zutreffend war. Diese beiden Probleme wurden in [2], [5], [12] und [14] gelöst: Das Einzigartigkeits-Problem wurde durch eine physikalische Hypothese über die stochastische Struktur der isotropischen Turbulenz behandelt, und es ergab die eindeutige Definition für das System der stochastischen Differentialgleichungen. Um Thomsons „Two-to-one Reduction“-Prinzip zu erfüllen, wurde in [2] ein kombiniertes Euler-Lagrangesches stochastisches Modell konstruiert. In [11] wurde die homogene Nukleation in einer fluktuierenden Übersättigung eines Dampf-Felds betrachtet. Die numerische Analysis zeigte, daß die „Intermittency“ die Partikel-Zuwachsrate stark beeinflußt.
Die probabilistische Darstellung der Lösung der Smoluchowski-Gleichung wurde in [4] konstruiert und dann in [9] verallgemeinert und geprüft. Die „Double Randomization“-Methode für die Smoluchowski-Gleichung mit zufälligen Koeffizienten ist in [6] und [7] dargelegt. Insbesondere sind diese Methoden für eine numerische Analysis der Wirkung der intermittierenden Turbulenz auf die Partikel-Formung geeignet [13].
Damit im Zusammenhang steht die Entwicklung von Methoden dieser Art für die numerische Simulation der chemischen Prozesse gekoppelt mit Koagulation, wie es im Fall der thermischen Zerlegung von Silanen und bei der Tungsten-Hexacarbonyl-Photolysis ist. Eine Theorie der Silane-Zerlegung wurde in [16] und der Tungsten-Hexacarbonyl-Photolysis in [15] entwickelt.

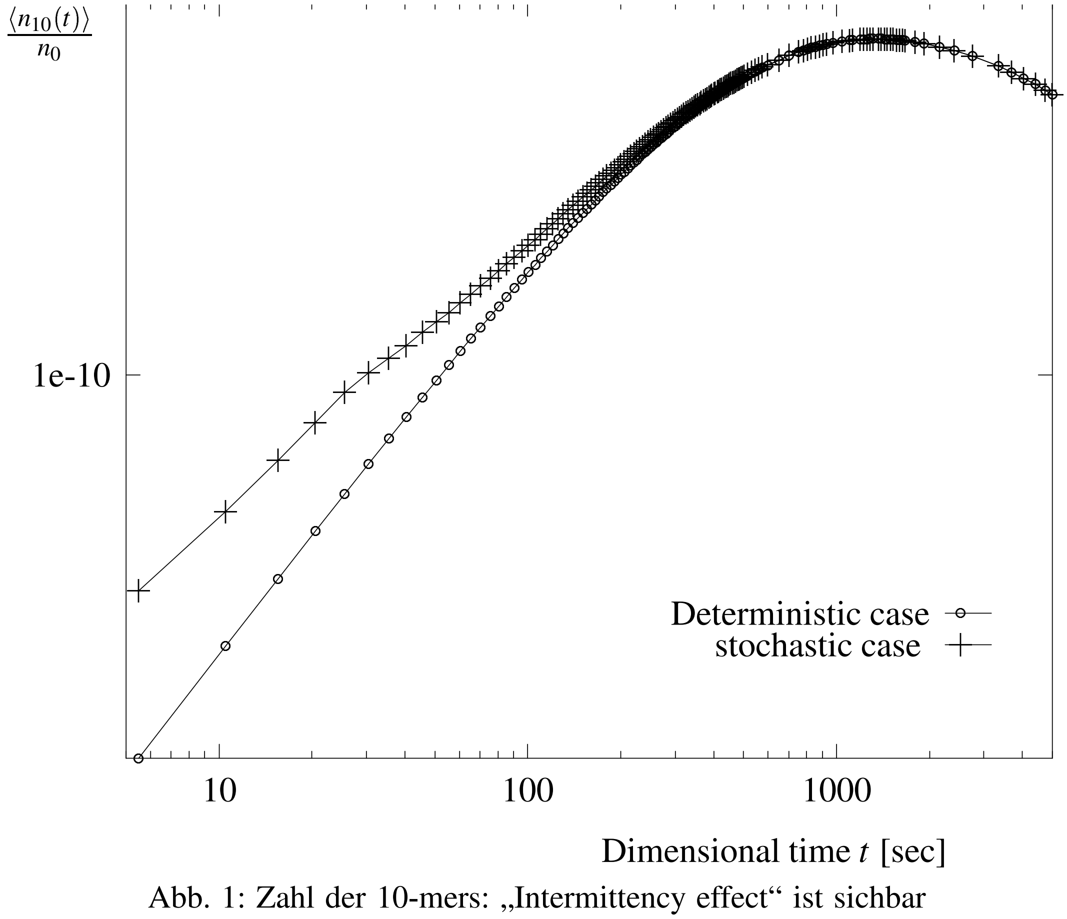


Abb. 1: Zahl der 10-mers: „Intermittency effect“ ist sichbar
für die Zeit weniger als 100-150 sec.

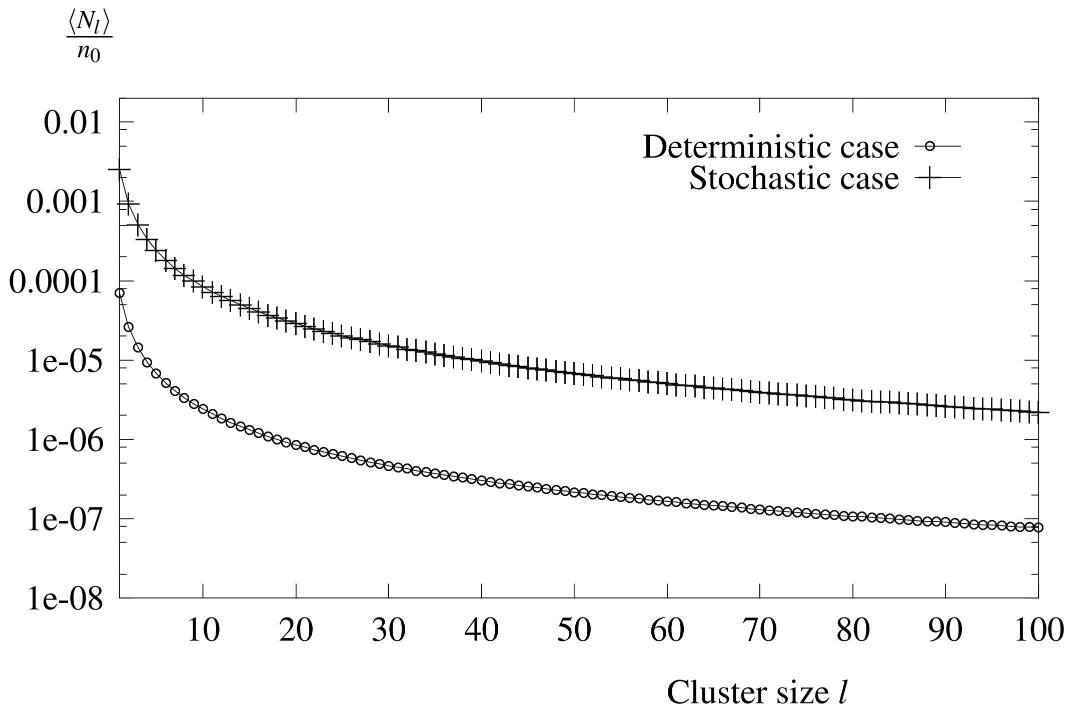


Abb. 2: Die Größe-Verteilung: Der „Intermittency effect“ ist hier sehr beeindruckend für alle Partikel.

Die Rolle von „Intermittency“ ist in Abb. 1 und 2 dargestellt: Das erste Bild zeigt den Fall, wo die Konzentration von 10-mers mit („stochastic case“) und ohne („deterministic case“) „Intermittency“ gerechnet ist. In Abb. 2 ist die Rolle von „Intermittency“ sehr groß für Partikel aller Größen.

Literatur

1. U. Frisch, *Turbulence,* Cambridge University Press, 1996.

2. O. Kurbanmuradov, K. Sabelfeld, D. Koluhin, *Stochastic Lagrangian models for two-particle motion in turbulent flows. Numerical results,* Monte Carlo Meth. Appl., **3** (1997), No. 3, pp. 199–223.

3. A. S. Monin, A. M. Yaglom, *Statistical fluid mechanics,* **2** (1975), M.I.T. Press, Cambridge, Massachusetts.

4. K. Sabelfeld, *Monte Carlo Methods in Boundary Value Problems,* Springer Verlag, New York-Heidelberg-Berlin, 1991.

5. K. Sabelfeld, O. Kurbanmuradov, *Stochastic Lagrangian models for two-particle motion in turbulent flows,* Monte Carlo Meth. Appl., **3** (1997), No. 1, pp. 53–72.

6. K. Sabelfeld, *Stochastic algorithms for solving Smolouchovsky coagulation equation,* in: Stochastic Simulation (S. Ogawa, K. Sabelfeld, Hrsg.), Kyoto, 1997, pp. 80–105.

7. K. SABELFELD, A. KOLODKO, *Monte Carlo simulation of the coagulation processes governing by Smolouchovsky equation with random coefficients,* Monte Carlo Meth. Appl., **3** (1997), No. 4, pp. 275–311.

8. M. SMOLUCHOWSKI, *Drei Vorträge über Diffusion, Brownsche Bewegung und Koagulation von Kolloidteilchen,* Phys. Z., **17** (1916), pp. 557–585.

9. K. SABELFELD, S. V. ROGASINSKY, A. KOLODKO, A. LEVYKIN, *Stochastic algorithms for solving Smolouchovsky coagulation equation and applications to aerosol growth simulation,* Monte Carlo Meth. Appl., **2** (1996), No. 1, pp. 41–87.

10. D. J. THOMSON, *A stochastic model for the motion of particle pairs in isotropic high-Reynolds-number turbulence, and its application to the problem of concentration variance,* J. Fluid. Mech., **210** (1990), pp. 113–153.

11. E. L. ZAPADINSKY, K. SABELFELD, M. KULMALA, D. M. RAKIMGULOVA, *Heterogeneous nucleation in non-uniform media: Numerical simulation,* J. Aerosol Science, **26** (1996), No. 8, pp. 1189–1195.

12. K. SABELFELD, O. KURBANMURADOV, *Two-particle stochastic Eulerian-Lagrangian models of turbulent dispersion*, Math. Comput. Simulation, **47** (1998), No. 2–5, pp. 429–440.

13. O. KURBANMURADOV, K. SABELFELD, *Coagulation of aerosol particles in turbulent flows,* WIAS-Preprint No. 421, 1998.

14. ——, *One-particle stochastic Lagrangian model for turbulent dispersion in horizontally homogeneous turbulence,* Monte Carlo Meth. Appl., **4** (1998), No. 2, pp. 127–140.

15. A. DUBTSOV, A. LEVYKIN, K. SABELFELD, *Kinetics of aerosol formation during tungsten hexacarbonyl photolysis,* erscheint in: J. Aerosol Science.

16. A. ONISCHUK, A. LEVYKIN, V. STRUNIN, M. USHAKOVA, R. SAMOILOVA, K. SABELFELD, V. PANFILOV, *Aerosol formation under heterogeneous/homogeneous thermal decomposition of Silane: Experiment and numerical modeling,* erscheint in: J. Aerosol Science.

LIBOR Zinsderivate, Zinsmodelle und Kalibration

Bearbeiter: J. Schoenmakers, O. Reiß

Kooperation: B. Coffey (Rabobank London), A. W. Heemink (Technische Universität Delft)

Förderung: Rabobank London, SWON (Holländische Forschungsgemeinschaft)

Die Zielsetzungen dieses Projektes sind: die Marktpreise von flüssig verhandelten Zinsderivaten wie „Caps“ und „Swaptions“ im Rahmen eines arbitragefreien LIBOR-Zinsmodells zu verstehen, die Kalibration dieses Modells und die Bewertung komplizierter exotischer LIBOR-Derivate bezüglich dieses Modells. Schon erworbene Resultate aus früherer Forschungsarbeit wurden weiterentwickelt.

Für ein arbitragefreies Jamshidian-LIBOR-Zinsmodell, [2], wurde eine Strategie zur Erzeugung von quasi-analytischen Approximationsverfahren einer großen Klasse von exotischen Derivaten entwickelt. Diese Strategie ist u. a. für den allgemeinen „Triggerswap“, die einfache Version des „Triggerswap“ und den „Callable reverse floater“ realisiert worden. Nebenbei ist die approximative Bewertung des „Swaption“ durch ein Jamshidian-Modell analog zu [1] nachgewiesen worden.

Die Kalibration dieser Jamshidian-Modelle ist erforscht, und dabei ist eine spezielle Korrelationstruktur identifiziert worden, die eine bekannte Anomalie, [3], in Modellen mit nur wenig stochastischen Faktoren umgeht und somit ein stabileres Kalibrationsverfahren ermöglicht. Es wird erklärt, daß zwei- oder dreifaktorige Modelle LIBOR-Korrelationen nach sich ziehen, die der Praxis widersprechen. Das Modell mit dieser bestimmten Korrelationsstruktur, das wir vorschlagen, trägt eine Vielfalt von Zufallsfaktoren in sich, hat aber trotzdem nicht mehr Parameter, die zu kalibrieren sind als ein (meistens instabiles) Zwei-Faktor-Modell. Wir betrachten dieses als einen wesentlichen Fortschritt.

Demnächst werden sowohl diese Kalibrations-Verfahren, die quasi-analytische Exotenvaluierung, als auch verschiedene Monte-Carlo-Methoden implementiert. Die Resultate werden an im Markt vorhandenen „Spread sheets“ von „implied Cap“ und „implied Swaption“-Volatilitäten geprüft.

Literatur

1. A. Brace, D. Gatarek, M. Musiela, *The market model of interest rate dynamics,* Math. Finance, **7** (1997), No. 2, pp. 127–155.

2. F. Jamshidan, *LIBOR and swap market models and measures,* Finance Stochast., **1** (1997), pp. 293–330.

3. R. Rebonato, *Interest-rate Option Models,* John Wiley & Sons, Chichester, 1996.

4. J. G. M. Schoenmakers, A. W. Heemink, *Fast Valuation of Financial Derivatives,* J. Comput. Finance, **1** (1997), No. 1, pp. 47–62.

4.7 Forschungsgruppe Kontinuumsmechanik

4.7.1 Zusammenfassung

Die im Berichtszeitraum erzielten Fortschritte sind

- Ableitung eines Modells für Massenquellen in Adsorptions- und Sublimationsprozessen,
- Festlegung des möglichen Wertebereichs von Durchlässigkeitskoeffizienten und Lösung von Kontaminationsaufgaben mit Randbedingungen dritter Art,
- Vorhersage der zeitlichen Entwicklung der Mikrostruktur von eutektischen Zinn/Blei-Legierungen mittels eines Phasenfeldmodells, das eine Kopplung von Diffusion und mechanischen Spannungen beinhaltet,
- Lösung des Anfangs- und Randwertproblems für nichtlineare hyperbolische Wärmeleitung, die bei tiefen Temperaturen im Gegensatz zur Fourierschen Wärmeleitung auftritt,
- Ableitung von nichtlinearen Zustandsgleichungen für einen thermoelastischen Festkörper mittels der Molekulardynamik.

Es wurden Kontakte zur Industrie hergestellt, und dies führte zu ersten Forschungsaufträgen. Darüber hinaus wurde eine enge Kooperation mit dem Fachbereich Chemietechnik an der Heriot-Watt-Universität (Edinburgh, Großbritannien) aufgebaut. Hier werden im nächsten Berichtszeitraum in-situ Beobachtungen der Entwicklung von Phasengrenzflächen in Zinn/Blei-Legierungen durchgeführt und diese Daten werden zum Abgleich des am WIAS entwickelten Phasenfeldmodells verwendet werden. Schließlich gab es eine enge Zusammenarbeit mit der Forschungsgruppe von Prof. Ingo Müller an der Technischen Universität Berlin.

4.7.2 Projekte

Schadstofftransporte in porösen Materialien

Bearbeiter: B. Albers, K. Wilmański

Kooperation: W. Geiger (Universität GH Essen)

Aufbauend auf Forschungsergebnissen, die im letzten Jahr erzielt worden sind, wurden zwei weitere grundlegende Fragen untersucht, nämlich

- die Bestimmung von Stoffparametern für typische Adsorptions- und Diffusionsprozesse in Böden und
- die Struktur der Massenquellen für Adsorptionsvorgänge im thermodynamischen Gleichgewicht und in Wechselwirkung mit Diffusionsvorgängen.

Das erste Problem wurde an mehreren Beispielen für Randwertaufgaben erörtert. Bereits 1997 wurden mit Hilfe von Schallwellenanalysen Stoffparameter untersucht. Daraus ergaben sich nun typische Werte für die lokalen konstitutiven Beziehungen. Die neuen Arbeiten haben sich auf die Untersuchung der Durchlässigkeit im Volumen und an den Grenzen der porösen Körper unter großen Verzerrungen konzentriert. Diese Betrachtung ist mit einer neuen Formulierung der Randbedingungen für mehrkomponentige Kontinua verbunden. Eine dieser Bedingungen auf der freien Grenzfläche hat die Gestalt

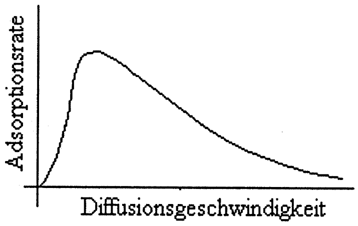
$$\rho^\beta (\mathbf{v}^\beta - \mathbf{v}^s) \cdot \mathbf{n} = \alpha \left(p^\beta - n p_{ext} \right).$$

ρ^β ist die Massendichte der Komponente β. $\mathbf{v}^\beta$ bezeichnet die Geschwindigkeit dieser Komponente. $\mathbf{v}^s$ ist die Geschwindigkeit des Skeletts. Weiterhin ist p^β der partielle Druck, p_{ext} der Außendruck und n die Porosität. Der neue Stoffparameter α beschreibt die Oberflächendurchlässigkeit. Sein Einfluß auf die Ergebnisse aus dem eigenen Modell für poröse Körper bei großen Verzerrungen wurde unter quasistationären Bedingungen untersucht. Diese Untersuchungen werden nun für nichtstationäre Probleme fortgesetzt.

Die Struktur der Massenquellen wurde mit Hilfe einer Mastergleichung entwickelt. Beim Adsorptionsvorgang beschreibt W die Wahrscheinlichkeit des Massenübergangs von Schadstoff aus der Flüssigkeit auf die innere Fläche des Skeletts. Deren zeitliche Änderung wird mit der folgenden Gleichung beschrieben

$$\frac{dW}{dt} = a(1-x)\,xp^A - bxe^{-\frac{E_b}{kT}}.$$

In dieser Gleichung ist p^A der partielle Druck des Schadstoffs in Lösung, x ist die Fraktion der sogenannten besetzten Stellen auf der inneren Fläche, E_b bezeichnet die Energiebarriere und a, b sind temperaturabhängige Stoffparameter. Diese Gleichung wurde benutzt, um die Form der Massenquelle zu bestimmen. Für den Fall der Adsorption besteht diese Quelle aus zwei Beiträgen: Der Gleichgewichtsbeitrag ist proportional zum Gleichgewichtswert der Fraktion x und entspricht dem Modell von Langmuir. Der Ungleichgewichtsbeitrag ist proportional zur Änderung der Porosität. Das Modell wurde numerisch für eine einfache Randwertaufgabe ausgewertet. Es wurde festgestellt, daß die Intensität der Adsorption nichtmonoton mit der relativen Bewegung der Komponenten gekoppelt ist (siehe Abb.). Die Existenz des Maximums in dieser Relation hat große praktische Bedeutung für die Steuerung des Prozesses. Diese Eigenschaft wird in Zukunft für weitere Beispiele untersucht.



Dieses Modell für den Massenaustausch wurde ebenfalls für Sublimationsprozesse bei Kristallwachstum untersucht. Die Kopplung der Massenquelle mit dem Temperaturgradienten wurde als Hauptmechanismus für die Sublimation ausgewählt. Dieses Modell wird weiterhin numerisch untersucht und mit experimentellen Daten verglichen.

Literatur

1. B. Albers, K. Wilmański, *An axisymmetric steady-state flow through a poroelastic medium under large deformations*, WIAS-Preprint No. 406, 1998, erscheint in: Arch. Appl. Mech.

2. ——, *On a stationary axisymmetric filtration problem under large deformations of the skeleton*, in: Trends in Applications of Mathematics to Mechanics, (G. Iooss, Hrsg.), Longman Scientific & Technical, Essex, 1999.

Entmischungsphänomene in binären Legierungen

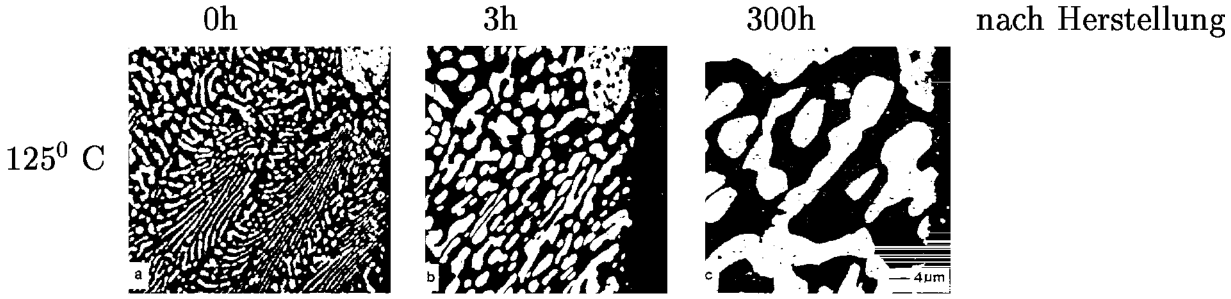
Bearbeiter: W. Dreyer

Kooperation: W. H. Müller (Heriot-Watt-Universität Edinburgh), T. Hauck (Motorola München), P. Colli (Universität Pavia)

Dieses Projekt betrifft die Aufstellung und Auswertung eines Phasenfeldmodelles zur Simulation gewisser Entmischungsvorgänge in Zinn/Blei-Legierungen, die in mikroelektronischen Bauteilen als Kontaktmaterialien eingesetzt werden. Die hauptsächlichen Ziele sind:

- Vorhersage der zeitlichen Entwicklung der lokalen Konzentrationsfelder und Spannungsfelder auf der μm-Ebene,
- Vorhersage der zeitlichen Entwicklung der Mikrostruktur,
- Vergleich der Simulationen mit experimentellen Beobachtungen, die mittels AFM- und ESEM-Techniken durchgeführt werden. Die hierzu benötigten Referenzmaterialien werden von Motorola und Siemens zur Verfügung gestellt. Die experimentellen Untersuchungen finden an der Heriot-Watt-Universität in Edinburgh statt.
- Identifizierung der entscheidenden Parameter, die einen Einfluß auf die Lebensdauer der Lotverbindungen haben.

Die folgende Abbildung zeigt eine beobachtete zeitliche Entwicklung der Mikrostruktur einer eutektischen Zinn/Blei-Legierung. Die anfängliche feine Mischung von Gebieten hoher Blei- und hoher Zinn-Konzentration, genannt α- bzw. β-Phase, vergröbert sich im Laufe der Zeit. Dieser Prozeß wird durch lokale inhomogene Spannungen gefördert.



Das zur Zeit am WIAS verwendete Basismodell betrachtet in einem repräsentativen Volumenelement von der Größe der gezeigten Mikroaufnahmen die Felder $\mathbf{u}(t,\mathbf{x})$ – Verschiebung und $c(t,\mathbf{x})$ – (Zinn-) Konzentration und besteht aus den Feldgleichungen

$$\frac{\partial}{\partial x_k}\left(C_{ikmn}(c)\left(\frac{\partial u_n}{\partial x_m}-\varepsilon^*_{mn}(c)\right)\right)=0, \tag{1}$$

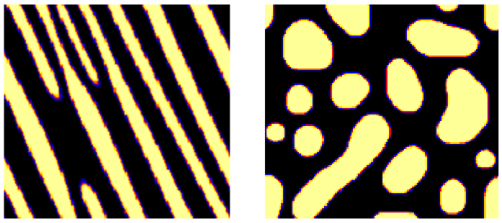
$$\frac{\partial c}{\partial t}+\frac{\partial J_k}{\partial x_k}=0, \tag{2}$$

$$J_k = -M\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\partial\psi(c)}{\partial c} - a_{ij}(c)\frac{\partial^2 c}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\partial}{\partial c}\left(\frac{1}{2}\left(\varepsilon_{ij} - \varepsilon^*_{ij}(c)\right) C_{ijmn}(c)\left(\varepsilon_{mn} - \varepsilon^*_{mn}(c)\right)\right)\right). \quad (3)$$

Hier steht ε_{ij} für den symmetrischen Verschiebungsgradienten. Die Phasen sind charakterisiert durch die Funktion

$$\Theta(t,\mathbf{x}) = \frac{c(t,\mathbf{x}) - c_\alpha}{c_\beta - c_\alpha}, \quad (4)$$

welche fernab der Phasengrenze in der α- bzw. β-Phase die Werte 0 bzw. 1 annimmt und diese beiden Zustände an der Phasengrenze kontinuierlich verbindet. Die Funktion $C_{ikmn}(c)$ ist die Steifigkeitsmatrix, welche in der α-Phase kubische Symmetrie und in der β-Phase tetragonale Symmetrie aufweist. $\varepsilon^*_{ij}(c)$ beschreibt die thermische Ausdehnung, und $a_{ij}(c)$ ist ein Maß für die Grenzflächenspannung. Auch diese beiden Funktionen spiegeln die unterschiedliche Symmetrie der beiden Phasen wider.



Die nebenstehende Abbildung zeigt beispielhaft zwei Mikrostrukturen, die mit dem Basismodell für unterschiedliche Grenzflächenspannungen berechnet wurden.
Das Modell kann somit aufzeigen, wie eine gewünschte Struktur zu erzielen ist. Es enthält drei Mechanismen als treibende Kräfte für die beobachteten Mikrostrukturänderungen: Der erste Mechanismus ist klassische Diffusion, wodurch der Entmischungsprozeß überhaupt in Gang gesetzt wird. Der zweite Mechanismus ist die Oberflächenspannung an den Phasengrenzen, welche ihre Zahl, Steilheit, Orientierung und die geometrische Gestalt kontrolliert. Drittens treten thermomechanische Spannungen auf, die ebenfalls zu einer Entmischung der Zinn/Blei-Mikrostruktur führen können. Ihr Beitrag zum Diffusionsfluß basiert auf Eigendehnungen, die zurückzuführen sind auf lokal unterschiedliche thermische Ausdehnungsparameter der anisotropen Phasen, sowie auf globalen Thermospannungen.

Literatur

1. W. DREYER, W. H. MÜLLER, J. OLSCHEWSKI, *Applications of Fourier transform methods to heterogeneous materials*, Acta Mech., **XXX** (1998).

2. W. DREYER, W. H. MÜLLER, *A study of the coarsening in tin/lead solders*, WIAS-Preprint No. 444, 1998.

Anfangs- und Randwertprobleme für hyperbolische Systeme

Bearbeiter: W. Dreyer, M. Kunik

Dies ist eine Fortführung und Erweiterung der Untersuchung über Anwendungen des Maximum-Entropie-Prinzips, [1], [2]. Das aktuelle Ziel des Projektes ist die Entwicklung einer Theorie für Anfangs- und Randwertprobleme für solche hyperbolischen Systeme, die auf einer darunterliegenden mikroskopischen Theorie basieren. Im Berichtszeitraum untersuchten wir hyperbolische Wärmeleitungsprozesse in Kristallen bei Temperaturen von etwa 10°K. Die mikroskopische Theorie ist hier die kinetische Theorie von Phononen, und das hyperbolische System besteht aus Feldgleichungen für die Variablen $e(t,\mathbf{x})$ – Energiedichte und $\mathbf{Q}(t,\mathbf{x})$ – Wärmefluß. Diese lauten bei Beschränkung auf eine makroskopische Raumdimension in schwacher Formulierung

$$\oint_{\partial\Omega} (edx - Qdt) = 0, \qquad \oint_{\partial\Omega} (Qdx - e\chi(e,Q)\,dt) = -\frac{1}{\tau_R}\iint_{\Omega} Qdtdx. \tag{1}$$

Die nichtlineare Funktion χ von e und Q ist gegeben durch

$$\chi(e,Q) = \frac{5}{3} - \frac{4}{3}\sqrt{1 - \frac{3}{4}\left(\frac{Q}{e}\right)^2}, \tag{2}$$

und τ_R ist eine konstante Relaxationszeit. Schließlich gibt es eine Entropieungleichung, nämlich

$$\oint_{\partial\Omega} (hdx - \Phi dt) \geq 0, \tag{3}$$

mit expliziten Funktionen $h(e,Q)$ für die Entropiedichte und $\Phi(e,Q)$ für den Entropiefluß, die [3] entnommen werden können.
Wir betrachten das Anfangs- und Randwertproblem für ein halbunendliches Gebiet und geben vor:

$$e(0,x) = e_0(x) > 0, \qquad Q(0,x) = Q_0(x) < e_0(x), \qquad e(t,0) = e_W(t) > 0. \tag{4}$$

Es ist uns gelungen, die kinetische Lösung dieses Problems anzugeben. Hierzu benötigen wir einige Abkürzungen und Definitionen, die in [3] ausführlich interpretiert werden und hier nur dazu dienen, die formale Struktur der Lösung aufzuzeigen.
Die Funktion

$$x(t) = \bar{x} - \nu\,(\psi(\bar{t}) - \psi(t)), \qquad \psi(t) = \tau_R\left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_R}\right)\right), \tag{5}$$

definiert Mikrocharakteristiken. Die Größe

$$\nu_0 = \frac{\bar{x}}{\psi(\bar{t})} > 0 \tag{6}$$

trennt Anfangsdaten von Randdaten. Die Schnittpunkte einer Mikrocharakteristik durch den Punkt $(\bar{t},\bar{x})$ mit der Anfangsachse $t = 0$, bzw. mit dem Rand $x = 0$, sind gegeben durch

$$x_0(\bar{t},\bar{x},\nu) = \bar{x} - \psi(\bar{t})\nu, \qquad t_W(\bar{t},\bar{x},\nu) = -\tau_R \ln\left[\exp\left(-\frac{\bar{t}}{\tau_R}\right) + \frac{\bar{x}}{\tau_R\nu}\right]\ . \tag{7}$$

Die zu integrierende zentrale Funktion lautet

$$U(e,Q,\nu) = 12\frac{e\,(1-\chi\,(e,Q))^3\,(3-\chi\,(e,Q))^2}{\left(3-\chi\,(e,Q)-2\frac{Q}{e}\nu\right)^4}. \tag{8}$$

Es folgt der Darstellungssatz für die kinetische Lösung des Anfangs- und Randwertproblems an irgendeiner Stelle $\bar{x} \geq 0$ auf einem Zeitstreifen $0 < \bar{t} \leq \tau_M$, wobei τ_M ein positiver Zeitschritt ist.

$$\begin{aligned} e(\bar{t},\bar{x}) &= \int_{-1}^{\nu_0} U(e_0(x_0(\bar{t},\bar{x},\nu)),Q_0(x_0(\bar{t},\bar{x},\nu)),\nu)\,d\nu \\ &\quad + \int_{\nu_0}^{1} U(e_W(t_W(\bar{t},\bar{x},\nu)),Q_H(t_W(\bar{t},\bar{x},\nu)),\nu)\,d\nu, \end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned} Q(\bar{t},\bar{x}) &= \exp\left(-\frac{\bar{t}}{\tau_R}\right)\left[\int_{-1}^{\nu_0} U(e_0(x_0(\bar{t},\bar{x},\nu)),Q_0(x_0(\bar{t},\bar{x},\nu)),\nu)\,\nu\,d\nu\right. \\ &\quad \left. + \int_{\nu_0}^{1} U(e_W(t_W(\bar{t},\bar{x},\nu)),Q_H(t_W(\bar{t},\bar{x},\nu)),\nu)\,\nu\,d\nu\right]. \end{aligned} \tag{10}$$

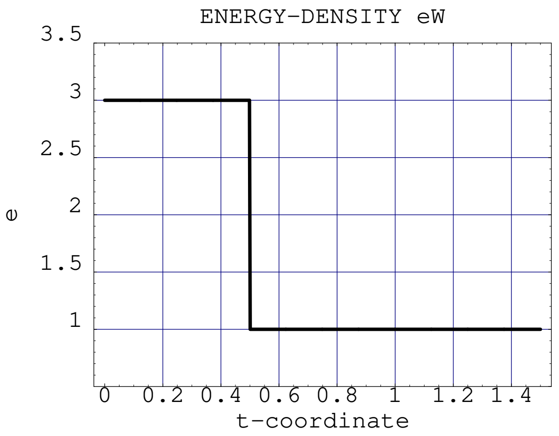
Der Darstellungssatz enthält noch eine unbekannte Funktion $Q_H(t)$, welche Lösung einer algebraischen Gleichung ist. Mit den Abkürzungen

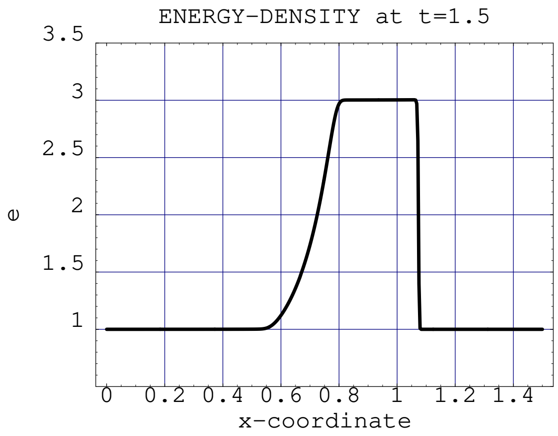
$$a = \frac{2}{(3-\chi\,(e_W,Q_H))}\frac{Q_H}{e_W}, \qquad f(a) = \frac{1}{2}\,\frac{a^2-3a+3}{a^2+3}(1+a)^3 a \tag{11}$$

lautet diese algebraische Gleichung

$$1-f(a(t)) = \frac{1}{e_W(t)}\int_{-1}^{0} U(e_0(x_0(t,0,\nu)),Q_0(x_0(t,0,\nu)),\nu)\,d\nu\;, \qquad Q_H(t) = \frac{4\,a(t)}{a(t)^2+3}\,e_W(t)\;. \tag{12}$$

Der mathematische Inhalt von (12) ist eine Stetigkeitsbedingung, die garantiert, daß die Lösung bei Annäherung an den Rand die Randdaten auch annimmt.
Die Darstellungsformeln (9) und (10) gestatten die iterative Berechnung der Felder e,Q, die zunächst noch vom Zeitschritt τ_M abhängen, aber für $t \geq 0$ und $x \geq 0$ Bilanzgleichungen sowie eine Entropieungleichung der Form (1) und (3) exakt erfüllen. Erst im Grenzfall $\tau_M \to 0$ erhalten wir die exakte Lösung des lokalen hyperbolischen Systems (1), (2) und (3).
Beispielhaft betrachten wir die Anfangsbedingung $e(0,x) = 1, Q(0,x) = 0$ sowie die Randbedingung $e\,(t,0) = e_W\,(t)$ mit $e_W\,(t) = 3$ für $0 < t < 0.5$ und $e_W\,(t) = 1$ für $t \geq 0.5$. Die hieraus entstehende Struktur wurde hier für den Grenzfall $\tau_R \to \infty$ berechnet.





Literatur

1. W. DREYER, M. KUNIK, *The maximum entropy principle revisited*, Contin. Mech. Thermodyn., **10** (1998), No. 6, pp. 331–347.

2. ——, *Reflections of Eulerian shock waves at moving adiabatic boundaries*, Monte Carlo Methods and Appl., **4** (1998), No. 3, pp. 231–252.

3. ——, *Initial and boundary value problems of hyperbolic heat conduction*, WIAS-Preprint No. 438, 1998, erscheint in: Contin. Mech. Thermodyn. (1999).

Mikromechanik und Molekulare Dynamik

Bearbeiter: W. Dreyer, M. Kunik

Kooperation: W. H. Müller (Heriot-Watt-Universität Edinburgh), T. Hauck (Motorola München)

Die Molekulare Dynamik geht aus von der Formulierung der Dynamik von Mikroteilchen und leitet durch Mittelwertbildung die makroskopischen Gesetze des aus diesen Mikroteilchen zusammengesetzten Körpers ab. Unter Mikroteilchen verstehen wir die kleinsten Einheiten, die zum Verständnis gewisser makroskopischer Phänomene betrachtet werden müssen. Viele Fragestellungen in unseren laufenden Projekten erfordern mikromechanische Betrachtungen. Hierzu gehören beispielsweise:

- In Phasenfeldtheorien ist die Kopplung zwischen Diffusion und den hierdurch erzeugten Spannungen auf der makroskopischen Ebene ein nicht gänzlich verstandenes Phänomen. Zur Klärung leiten wir die freie Energie molekulardynamisch ab.
- Die makroskopische Modellierung von Phasengrenzflächen erfordert in deren Umgebung ein mikromechanisches Studium des Spannungs/Dehnungs-Zusammenhanges.
- Anfangs- und Randwertprobleme für hochgradig nichtlineare hyperbolische Systeme lassen sich durch einfache Integrationen lösen, falls es gelingt, die betrachteten Systeme mittels kinetischer Gleichungen herzuleiten. Makroskopische hyperbolische Systeme lassen sich aber auch molekulardynamisch generieren, weshalb wir versuchen, die kinetische Dreyer/Kunik-Methode auch molekulardynamisch zu etablieren.

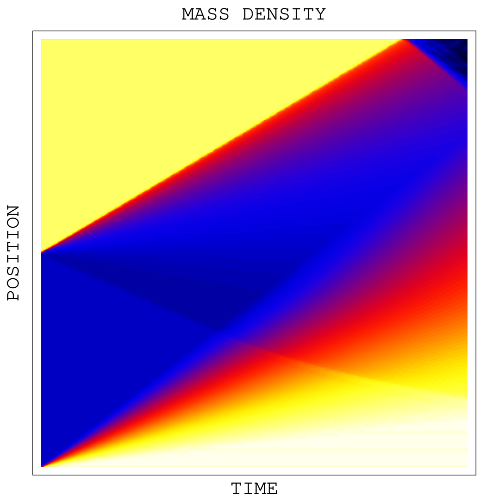
Zur Illustration betrachten wir einen eindimensionalen Festkörper, der aus einer Kette von Atomen aufgebaut ist. Die Atome mit Orten $x^\alpha(t)$ und Geschwindigkeiten $\dot{x}^\alpha(t)$, $\alpha = 1,2,...,N$, genügen den Newtonschen Bewegungsgleichungen

$$m\ddot{x}^\alpha(t) = -\sum_{\beta\neq\alpha} \frac{\partial\varphi\left(|x^\beta - x^\alpha|\right)}{\partial x^\alpha}, \tag{1}$$

wo m die Masse eines Atoms ist, und $\varphi\left(|x^\beta - x^\alpha|\right)$ bezeichnet das Potential, welches zwischen den Atomen β und α besteht. Aus den Newtonschen Gleichungen lassen sich unter gewissen Annahmen Feldgleichungen für die Makrovariablen $\rho(t,x)$ – Massendichte und $v(t,x)$ – Geschwindigkeit ableiten, nämlich

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial\rho v}{\partial x} = 0, \qquad \frac{\partial\rho v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho v^2 - \varphi'\left(\frac{m}{\rho}\right)\right) = 0. \tag{2}$$

Dies ist ein hyperbolisches System, falls $\varphi'' > 0$ gilt. Die Güte der gemachten Annahmen, die zu (2) führen, läßt sich nun dadurch testen, daß wir ein Anfangswertproblem sowohl mit (1) als auch mit (2) lösen. Wir betrachten ein Riemannsches Anfangswertproblem mit $\rho = 1$ und $v = 0$ für $x < 0$ und für $x \geq 0$ wählen wir $\rho = 1.5$ und berechnen v aus der (2) zugeordneten Rankine-Hugoniot-Beziehung, so daß ein einzelner Stoß entsteht.



Die nebenstehende Abbildung zeigt das Dichtefeld, so wie es aus den Newtonschen Gleichungen für $N = 10000$ Atome folgt. Würden nun die gemachten Annahmen, die im wesentlichen die thermischen Schwankungen vernachlässigen, für dieses Anfangswertproblem angemessen sein, dann müßte nach (2) das gleiche Bild herauskommen. Das tut es nicht, denn das System (2) liefert einen Einzelstoß, der in die obere rechte Ecke einmündet. Dies Beispiel zeigt somit eindrucksvoll, wie die Güte phänomenologischer Annahmen mittels Moleküldynamik beurteilt werden kann. Inzwischen wurde das System (2) durch Berücksichtigung der Temperatur verallgemeinert. Ein WIAS-Preprint hierzu ist in Vorbereitung.

Martensitische Umwandlung

Bearbeiter: K. Wilmański

Kooperation: M. Šilhavý (Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik, Prag)

Die Forschung auf diesem Gebiet ist eine Fortsetzung der Idee, daß die Musterentstehung bei spannungsinduzierter martensitischer Umwandlung von Shape-Memory-Legierungen mit dem zweidimensionalen Charakter der Verzerrung der Zugprobe zusammenhängt [1]. Es wurde ein zweidimensionales kontinuumsmechanisches Modell entwickelt. Damit wurde bewiesen, daß die Kompatibilität der Verzerrung (die sogenannte Hadamard-Bedingung)

$$[[\mathbf{F}]] = \mathbf{a} \otimes \mathbf{n},$$

(**F** – Deformationsgradient, **a** – Amplitude der Unstetigkeit, **n** – Normalenvektor zur Kontaktfläche, $[[\bullet]]$ – Sprung durch die Fläche) zusammen mit der Rank-1-Konvexität der freien Energie [2], d. h.

$$f(\mathbf{F} + \mathbf{a} \otimes \mathbf{n}) \geq f(\mathbf{F}) + \mathbf{S}(\mathbf{F}) \bullet (\mathbf{a} \otimes \mathbf{n}),$$

(f – freie Energie, **S** – Piola-Kirchhoff-Spannungstensor) zu einer Hystereseschleife im Spannnungs-Dehnungs-Diagramm führen kann, und dann befindet sich die Probe in Zuständen heterogener (periodischer) Verzerrungen.
Eigenschaften der Phasengleichgewichtslinie in bezug auf die Hysterese wurden mathematisch untersucht. In der zukünftigen Forschung sollen die Beziehungen des Modells zum Modell mit sogenannter Kohärenzenergie geklärt werden. Dies führt dann zur Frage nach Folgen aus dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik, die in der Arbeit [3] zur Zeit nicht behandelt wurden.

Literatur

1. K. WILMAŃSKI, *Symmetric model of stress-strain hysteresis loops in shape memory alloys*, Internat. J. Engrg. Sci., **31** (1993), pp. 1121–1138.

2. M. ŠILHAVÝ, *The Mechanics and Thermodynamics of Continuous Media*, Springer, Berlin, 1997.

3. M. ŠILHAVÝ, K. WILMAŃSKI, *On the pseudoelastic hysteresis*, erscheint 1999 als WIAS-Preprint.

Modellbildung poröser und granularer Stoffe

Bearbeiter: K. Wilmański

Kooperation: T. Ruggeri (Universität Bologna), K. Hutter (Technische Universität Darmstadt), W. Wendland (Universität Stuttgart)

Die Fortsetzung der Modellbildung für poröse und granulare Stoffe geschieht aus drei Gründen:

- Anpassung der Struktur des Modells an die Struktur der erweiterten Thermodynamik,
- Untersuchung der Einbettung des eigenen Modells in die Klasse der kontinuumsthermodynamischen Modelle für poröse und granulare Stoffe, insbesondere die Klasse der Modelle mit höheren Gradienten und Inkompressibilitätsannahmen,
- Vorbereitung der kinetischen und makroskopischen Modellbildung für granulare Stoffe mit hierarchischer Struktur der Transfergleichungen.

Die erste Aufgabe wurde in diesem Jahr abgeschlossen [1]. Es wurde gezeigt, daß die eigene Lagrangesche Modellbildung die Darstellung der hyperbolischen Feldgleichungen wesentlich vereinfacht und eine Erweiterung auf nichtisotherme Vorgänge ermöglicht. Diese Arbeit liegt auch der Untersuchung der Stoßwellen in porösen und granularen Stoffen zugrunde, die im Jahr 1999 intensiv fortgesetzt wird.
Vor einigen Jahren wurde die Frage nach Inkompressibilität oder allgemeiner nach Zwangsbedingungen in mehrkomponentigen Körpern gestellt [2]. Es wurde gezeigt, daß die üblichen Modelle über mehrkomponentige Körper thermodynamisch nicht zulässig sind. Eine neue Untersuchung hat bewiesen, daß manche Fälle der Modellbildung mit höheren Gradienten die thermodynamische Zulässigkeit doch gewährleisten. Zum Beispiel genügt das Modell mit den Feldern $\lambda-$ Porendruck, $n-$ Porosität, $\mathbf{v}^S-$ Geschwindigkeit des Skeletts, $\mathbf{v}^F-$ Geschwindigkeit der Flüssigkeit und Feldgleichungen ($\rho^{SR} =$ konst., $\rho^{FR} =$ konst. – Inkompressibilität!)

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial(1-n)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^k}\left[(1-n)\,v_k^S\right] &= 0,\\
\frac{\partial}{\partial x^k}\left[(1-n)\,v_k^S + n v_k^F\right] &= 0,\\
(1-n)\,\rho^{SR}\left(\frac{\partial v_k^S}{\partial t} + v_l^S\frac{\partial v_k^S}{\partial x^l}\right) &= \frac{\partial T_{kl}^S}{\partial x^l} + \pi\left(v_k^F - v_k^S\right) + \lambda\frac{\partial n}{\partial x^k},\\
n\rho^{FR}\left(\frac{\partial v_k^F}{\partial t} + v_l^F\frac{\partial v_k^F}{\partial x^l}\right) &= \frac{\partial T_{kl}^F}{\partial x^l} - \pi\left(v_k^F - v_k^S\right) - \lambda\frac{\partial n}{\partial x^k}.
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
T_{kl}^S &= -(1-n)\,\lambda\,\delta_{kl} + \Im_0\delta_{kl} + \Im_1 B_{kl}^S + \Im_{-1}B_{kl}^{S-1},\\
T_{kl}^F &= -n\lambda\,\delta_{kl} + \tilde{T}_{kl}^F\left(n, D_{kl}^F\right),
\end{aligned}
$$

dem zweiten Hauptsatz [3]. In diesen Gleichungen sind $\mathbf{T}^S$ und $\mathbf{T}^F$ partielle Spannungstensoren, $\Im_0, \Im_1, \Im_{-1}$ – Elastizitätskoeffizienten (abhängig von der Verzerrung des Skeletts $\mathbf{B}^S$ und der Porosität) und $D_{kl}^F = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_k^F}{\partial x^l} + \frac{\partial v_l^F}{\partial x^k}\right)$.

Dieses Modell beschreibt Sedimentationsvorgänge und wird mathematisch von der Forschungsgruppe von Prof. W. Wendland (Stuttgart) untersucht.
Neue Elemente der Modellbildung stehen in engem Zusammenhang mit dem Forschungsvorhaben für 1999. Es sollen nämlich kinetische Grundlagen der Theorie der granularen Stoffe erforscht werden mit dem Ziel, Transfergleichungen mit Hilfe des Prinzips der Maximalen Entropie zu bilden. Auf diesem Gebiet hat die Forschungsgruppe schon umfangreiche Vorarbeiten geleistet.

Literatur

1. K. WILMAŃSKI, *Toward an extended thermodynamics of porous and granular materials*, erscheint in: Proceedings of STAMM '98, Nice, (1999).

2. ——, *On incompressibility of true components in porous materials*, in: Festschrift zum 60. Geburtstag von Prof. Dr. Reint de Boer, Forschungsberichte FB Bauwesen, No. 66, Universität Essen, 1995.

3. ——, *Note on the notion of incompressibility in theories of porous and granular materials*, WIAS-Preprint No. 465, 1998.

4.8 Gruppenübergreifende Projekte

Optimale Steuerung der Sublimationszüchtung von SiC–Kristallen

Bearbeiter: N. Bubner (FG 1), O. Klein (FG 1), P. Philip (FG 1), J. Sprekels (FG 1), K. Wilmański (FG 7)

Kooperation: T. Müller, D. Schulz, D. Siche (Institut für Kristallzüchtung Berlin)

Förderung: BMBF

SiC-Einkristalle werden zunehmend in elektronischen und optoelektronischen Bauteilen verwendet. Es ist allerdings immer noch ein großes Problem, Kristalle befriedigender Qualität und ausreichender Größe zu produzieren. In den letzten Jahren hat sich die sogenannte *Lely-Methode* als die erfolgversprechendste Methode erwiesen. In einem Behälter aus Graphit (siehe Abb. 1) wird polykristallines SiC-Pulver auf ca. 2500 K erhitzt, so daß dieses verdampft und ein mehrkomponentiges Gasgemisch in diesem Graphittiegel erzeugt. Im Tiegel befindet sich oben ein Keim, bestehend aus einem dünnen SiC-Einkristall. Durch Sublimation wächst dieser im Gasgemisch nach unten in den Tiegel hinein. Die Experimente werden vom Kooperationspartner, dem Institut für Kristallzüchtung Berlin (IKZ), durchgeführt. Ziel ist es, diesen komplexen Prozeß mathematisch zu modellieren und numerisch zu simulieren, um die Produktionsmethode zu verbessern.

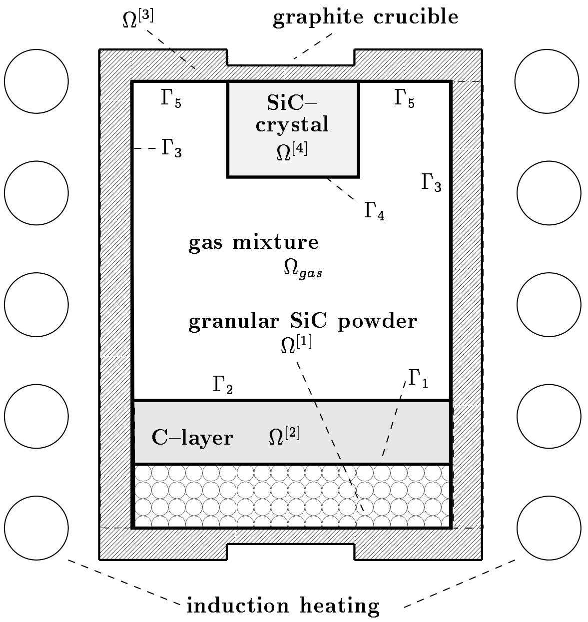


Abb. 1: Schematische Versuchsanordnung

Die numerischen Simulationen sind zum Verständnis der Vorgänge im Inneren des Tiegels unerläßlich, da aufgrund der Gegebenheiten der Wachstumsprozeß nicht beobachtet und nur unten und oben am Tiegel die Temperatur gemessen werden kann, was die Temperaturverhältnisse im Tiegel nur grob wiedergibt.

Es gilt also, die Vorgänge im Inneren zu simulieren, um dann den Prozeß des Kristallwachstums zu optimieren. Kontrollmöglichkeiten bieten der innere Aufbau des Tiegels, der großen Einfluß auf die Temperaturverteilung hat, die Heizung des Tiegels und der Druck des Inertgases Argon, mit dem der Reaktor geflutet ist.

Aufgrund der hohen Temperaturen wird Graphit als Tiegelmaterial benutzt. Da dieser porös ist, entweichen Teile des aus mindestens sechs zu berücksichtigenden Komponenten bestehenden Gases. Dies und die chemischen Reaktionen auf der Oberfläche des SiC-Pulvers, an den Reaktorwänden, im Gasgemisch selbst und auf der wachsenden Kristalloberfläche ändern die Stöchiometrie des Systems ständig, was maßgeblichen Einfluß auf das Wachstum hat. Weiterhin ändert sich die innere Struktur des Reaktors ständig im Laufe der Zeit, da mehrere freie Ränder existieren: der wachsende Kristall, die sich abbauenden Graphitwände, die sich ebenfalls abbauende, sinternde SiC-Quelle und eine sich darauf aufbauende Graphitschicht.

Die Modellierung des Gasgemisches unter Berücksichtigung aller Erhaltungsgleichungen für alle Komponenten sowie der Reaktions-Diffusions-Gleichungen und die Modellierung der Temperaturentwicklung im gesamten, aus verschiedenen Materialien bestehenden Reaktor konnten im Berichtsjahr abgeschlossen werden [1]. Weiterhin wurde die Wärmeleitungsgleichung ohne Strahlung im gesamten Reaktor implementiert. Die Wärmeübertragung durch Strahlung, die hier von großer Bedeutung ist, wurde modelliert und für einfache Gebiete implementiert.
Mit Hilfe des IKZ konnten bereits einige der notwendigen Materialparameter bestimmt werden. Sobald die Implementierung der Strahlung abgeschlossen sein wird, werden verschiedene Geometrien des Reaktors ausgetestet. Entsprechende experimentelle Untersuchungen sind sehr teuer und zeitaufwendig.
Die nächsten Schritte werden der Einbau der Reaktions-Diffusions-Gleichungen, das Kristallwachstum und die genaue Simulation der Induktionsheizung sein. Spätere Aufgaben sind die Berücksichtigung des Einflusses der porösen Graphitwände und des granularen, sinternden SiC-Pulvers auf den Stoff- und Wärmetransport sowie auf die chemischen Vorgänge.
Abb. 2 zeigt zwei Zeitpunkte der Temperaturentwicklung ohne Berücksichtigung der Strahlung für eine mögliche Reaktorgeometrie. Geheizt wird der zylindersymmetrische Tiegel von außen, hier durch eine Dirichlet-Randbedingung. Im wesentlichen besteht der Tiegel aus Graphit, unten und oben sieht man eine aus Graphitfilz bestehende Isolierung. In den Sacklöchern unten und oben am Tiegel, die der Temperaturmessung und der Kühlung des Kristalls dienen, ist eine Abstrahlungsrandbedingung implementiert. Am restlichen Rand ist eine homogene Neumann-Bedingung realisiert. In der Mitte befindet sich unten das SiC-Pulver, darüber ist ein Hohlraum mit Argongas. Dort soll der Kristall wachsen.
Die Isothermen im linken Bild haben einen Abstand von 100 K, im rechten Bild von 5 K. In der Mitte des Hohlraums herrscht eine Temperatur von 2300 K bzw. von 2550 K.

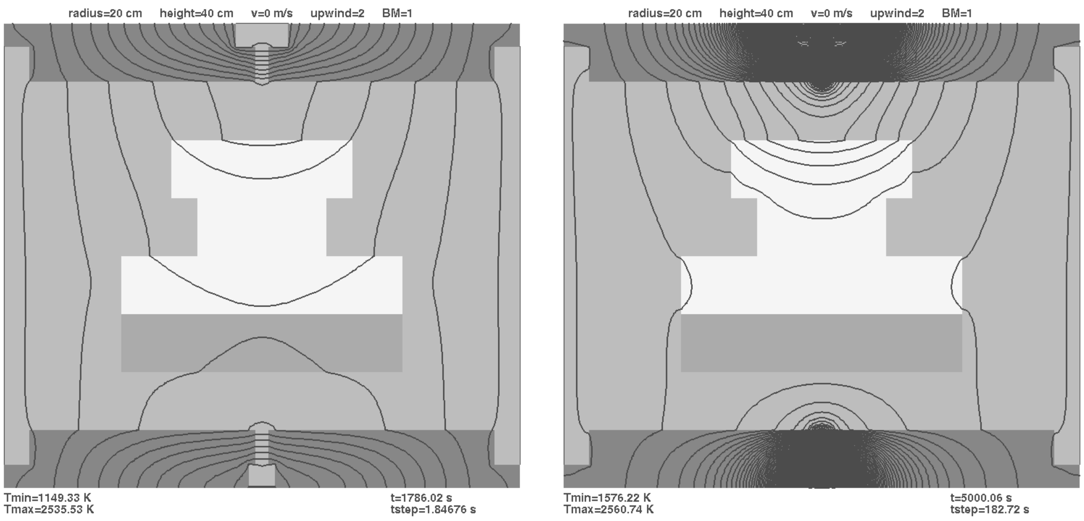


Abb. 2: Temperaturverteilung nach T_1 = 1786.02 sec und nach T_2 = 5000.06 sec

Literatur

1. N. Bubner, O. Klein, P. Philip, J. Sprekels, K. Wilmański, *A transient model for the sublimation growth of silicon carbide single crystals*. WIAS-Preprint No. 443, 1998, eingereicht.

Modellierung, Analyse und Simulation des Widerstands-Impulsschweißens

Bearbeiter: W. Dreyer (FG 7), F. Duderstadt (FG 1), D. Hömberg (FG 1)

Kooperation: Impuls Schweisstechnik GmbH, Ellerbek

Förderung: BMBF

Das Widerstands-Impulsschweißen beruht auf dem Prinzip der transformierten Kondensatorentladung. Im Gegensatz zum Standard-Widerstandsschweißen, dessen Anwendungsbereich und technische Durchführung in DIN-Normen beschrieben ist, fehlt diese Normung für das Impulsschweißen.
Daher ist es das erste technische Ziel des Projektes, durch Simulationsrechnungen für verschiedene Standardgeometrien und Metallegierungen die notwendigen Schweißparameter zu bestimmen und den breiten Anwendungsbereich dieser Technologie unter Beweis zu stellen.
Das mathematische Ziel besteht darin, die in den letzten Jahren erzielten Resultate bei der analytischen und numerischen Behandlung von Stefan-Problemen auf Systeme zu erweitern, in denen mechanische, elektrische und thermische Effekte gekoppelt auftauchen.
Ausgangspunkt für die mathematische Modellierung ist ein Modell für die nichtlineare Thermoviskoelastizität, das auf folgenden Grundgleichungen beruht:

$$
\begin{aligned}
-\nabla.\Big(\gamma(T)\nabla\phi\Big) &= 0, && (1)\\
\mu(T)T_t - \nabla.\Big(k(T)\nabla T\Big) &= \sigma : B(\sigma,T) - 3\alpha k T\nabla.v + \gamma(T)|\nabla\phi|^2, && (2)\\
\nabla.\sigma &= 0, && (3)\\
A^{-1}\sigma_t + B(\sigma,T) &= \varepsilon(v) - \alpha T_t I. && (4)
\end{aligned}
$$

Dabei sind ϕ das elektrische Potential, T die Temperatur, σ die Spannung, v die Geschwindigkeit, $\varepsilon(v) = \frac{1}{2}(Dv + (Dv)^T)$ der symmetrische Anteil des Geschwindigkeitsgradienten und γ, μ, k und α temperaturabhängige Materialparameter. Gleichung (1) beschreibt das elektrische Potential, (2) ist die Energiebilanz und (3) die quasistatische Impulsbilanz. (4) beschreibt ein viskoelastisches Materialgesetz mit einem phänomenologischen Kriechgesetz der Form

$$B(\sigma,T) = \eta_1 |S|^{\eta_2 - 1} S,$$

mit S als dem spurfreien Teil des Spannungstensors und den Materialparametern η_1 und η_2.
Im Berichtszeitraum wurde damit begonnen, auf der Basis eines gemischten Finite-Element-Ansatzes die mechanischen Grundgleichungen und das viskoelastische Materialgesetz im Rahmen der *pdelib* (siehe S. 64) zu implementieren. Die vom Kooperationspartner vorgegebenen Bauteilgeometrien und Randbedingungen ließen die vollständige Behandlung als rotationssymmetrisches Problem zu.
Der Kooperationspartner stellte Kondensatorentladungsstromkurven für verschiedene Kondensatorkapazitäten bezüglich eines Testwiderstands zur Verfügung. Die Abbildungen zeigen erste numerische Resultate für die Simulation von Schweißvorgängen basierend auf den Meßkurven und realen Materialparametern.

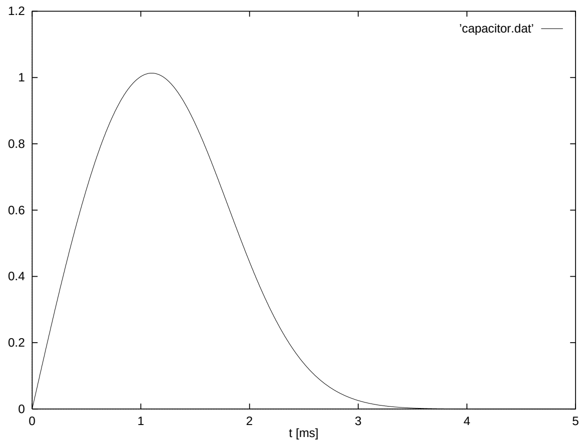


Abb. 1: Kondensatorentladungsstrom

Abb. 1 beschreibt die flächenbezogene Entladungsstromkurve für einen Kondensator der Kapazität 400 μF, was einer Energie von $2kJ$ entspricht. Der Maximalstrom liegt bei 94,7 kA. Abb. 2 zeigt die zugehörige Temperaturverteilung im Schweißgut zum Zeitpunkt $t = 1.3$ ms.

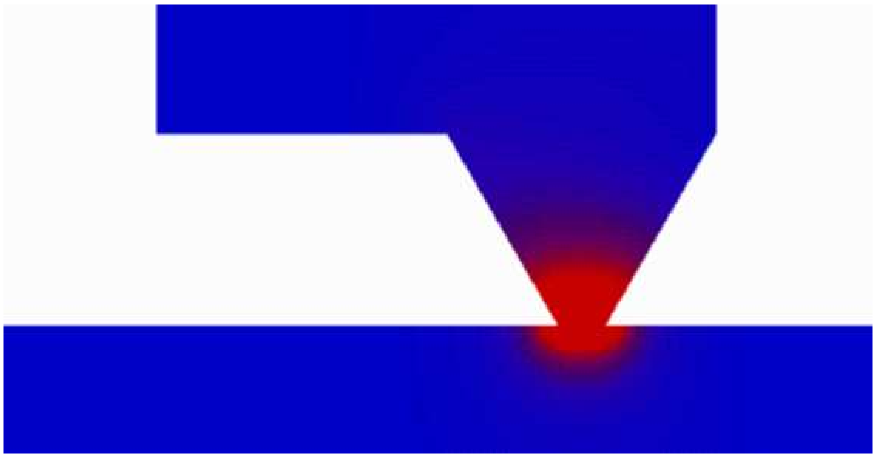


Abb. 2: Temperaturverteilung im Schweißgut zum Zeitpunkt $t = 1.3$ ms

An der Schweißbuckelspitze liegen dabei Temperaturen in Höhe der Schmelztemperatur von Stahl vor. Aufgrund der großen Querschnittsverengung tritt am Kontaktbereich ein großer Potentialgradient auf, der lokal zu einer hohen Energiezufuhr führt. Dies hat eine schnelle Erwärmung der Spitze des Schweißbuckels zur Folge. Die erzielten Temperaturen und die Größe des aufgeschmolzenen Bereichs stimmen sehr gut mit einem realen Schweißvorgang überein.

Literatur

1. W. DREYER, F. DUDERSTADT, D. HÖMBERG, *Numerical simulation of thermovisco–elastic solids*, in Vorbereitung.

Approximation und Optimierung von Platten

Bearbeiter: H. Langmach (FG 3), J. Sprekels (FG 1)

Kooperation: V. Arnăutu (Universität Iaşi, Fachbereich für Mathematik), D. Tiba (Rumänische Akademie der Wissenschaften, Bukarest)

Die Auslenkung $y = y(x_1, x_2)$ einer dünnen Platte unter der Kraft $f = f(x_1, x_2)$ wird beschrieben durch eine Randwertaufgabe zur biharmonischen Gleichung

$$\Delta(u^3 \Delta y) = f \quad \text{in } \Omega \subset \mathbb{R}^2, \tag{1}$$

wobei $u = u(x_1, x_2)$ die Dicke der Platte bedeutet. Als Randbedingung treten die folgenden Fälle auf:

$$y = \Delta y = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \quad \text{(gestützte Platte)}, \tag{2}$$

$$y = \frac{\partial y}{\partial n} = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \quad \text{(eingespannte Platte)}, \tag{3}$$

$$\begin{aligned} y = \frac{\partial y}{\partial n} &= 0 \quad \text{auf } \Gamma_1, \\ \Delta y = \frac{\partial}{\partial n}(u^3 \Delta y) &= 0 \quad \text{auf } \Gamma_2, \\ \text{wobei } \partial\Omega = \Gamma_1 \cup \Gamma_2, \quad \Gamma_1 \cap \Gamma_2 &= \emptyset \quad \text{(teilweise eingespannte Platte)}. \end{aligned} \tag{4}$$

In den früheren Arbeiten [1–3] wurde eine neue Methode zur Approximation und Optimierung von Stäben und Platten entwickelt, die auf einer Dekomposition der Randwertaufgaben (1)+(2) bzw. (1)+(3) in zwei elliptische Randwertprobleme zweiter Ordnung beruht, die als Nebenbedingungen in ein Problem der optimalen Steuerung eingehen. Dabei wurde die Einhaltung der Randbedingungen mittels eines Penalty-Terms im Zielfunktional erzwungen. Neben der Randwertaufgabe wurde auch eine daraus abgeleitete Variationsungleichung behandelt. Die Konvergenz der Penalty-Methoden konnte jeweils gezeigt werden.
Im Berichtsjahr konnten die bisher erzielten Ergebnisse erheblich verbessert werden. So gelang es in [4], für den Fall (1)+(2) der gestützten Platte ein verallgemeinertes Bang-Bang-Prinzip für die optimalen Steuerungen zu beweisen; ferner konnte in [5] erstmalig der schwierige Fall (1)+(4) einer nur teilweise eingespannten Platte unter punktweisen Zustandsrestriktionen behandelt werden. Dabei gelang der Nachweis der Konvergenz für das verwendete Penalty-Verfahren, und für die approximativen Lösungen konnten die Eindeutigkeit nachgewiesen sowie die notwendigen Optimalitätsbedingungen hergeleitet werden.
In numerischer Hinsicht hat der gewählte Zugang den Vorteil, daß bei der Problemlösung stückweise lineare finite Elemente verwendet werden können und keine Elemente höherer Ordnung benötigt werden.

Literatur

1. V. ARNĂUTU, H. LANGMACH, J. SPREKELS, D. TIBA, *On the approximation and optimization of plates*, WIAS-Preprint No. 357, 1997, eingereicht.

2. J. SPREKELS, D. TIBA, *A duality-type method for the design of beams*, WIAS-Preprint No. 222, 1996, erscheint in: Adv. Math. Sci. Appl.

3. ——, *A duality approach in the optimization of beams and plates*, WIAS-Preprint No. 335, 1997, erscheint in: SIAM J. Control Optimiz.

4. ——, *Propriétés de bang-bang généralisées dans l'optimisation des plaques*, C. R. Acad. Sci. Paris, t. 327, Série I (1998), pp. 705–710.

5. ——, *On the approximation and optimization of fourth order elliptic systems*, erscheint in: Proceedings der IFIP-Tagung 1998 in Chemnitz.

Gekoppelter Fluid- und Wärmetransport

Bearbeiter: J. Fuhrmann (FG 3), K. Gärtner (FG 7), I. Schmelzer (FG 3)

Kooperation: U. Bayer, V. Clausnitzer, B. Lewerenz (GeoForschungsZentrum Potsdam)

Der gekoppelte Fluid- und Wärmetransport im porösen Medium läßt sich beschreiben durch die Gleichungen:

$$\begin{array}{ll} \text{Massenbilanz:} & \partial_t(\varphi\rho_f) - \nabla\cdot\mathbf{q}_f = 0, \\ \text{Darcy-Gesetz:} & \mathbf{q}_f = \frac{k\rho_f}{\mu}(\nabla p - \rho_f\gamma), \\ \text{Energiebilanz:} & \partial_t((1-\varphi)\rho_s c_s + \varphi\rho_f c_f T) - \nabla\cdot\mathbf{q}_T = 0, \\ \text{Fourier-Gesetz:} & q_T = \lambda\nabla T - T c_f \mathbf{q}_f. \end{array}$$

Die Temperaturabhängigkeit der Fluiddichte $\rho_f = \rho_f(p,T)$ führt zu instabilen Auftriebseffekten, welche eine sorgfältige Arbeitsweise bei der numerischen Simulation erfordern.
Ziel des Projektes ist ein Simulationscode, welcher am GeoForschungsZentrum Potsdam die Durchführung numerischer Experimente zur Untersuchung der Rolle von Auftriebseffekten bei der Entstehung von Sedimentschichten im nordostdeutschen Becken ermöglicht.
Auf der Basis des Finite-Volumen-Codes *„pdelib/sysconlaw“* (siehe S. 143) konnte im Berichtszeitraum ein Prototyp-Code erstellt werden, mit dem erste Testrechnungen ausgeführt wurden.

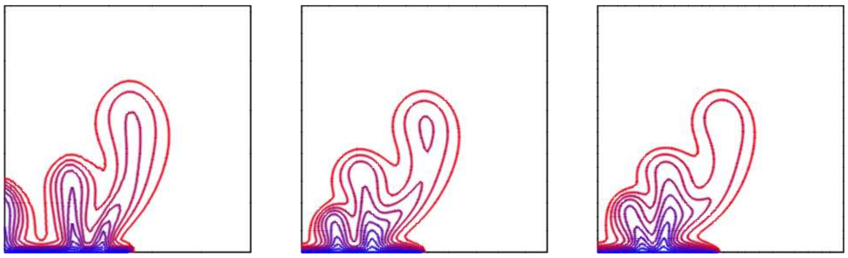


Abb. 1: Konvektionsgetriebene Strömung, Gittergrößen $41x41$, $81x81$,$161x161$

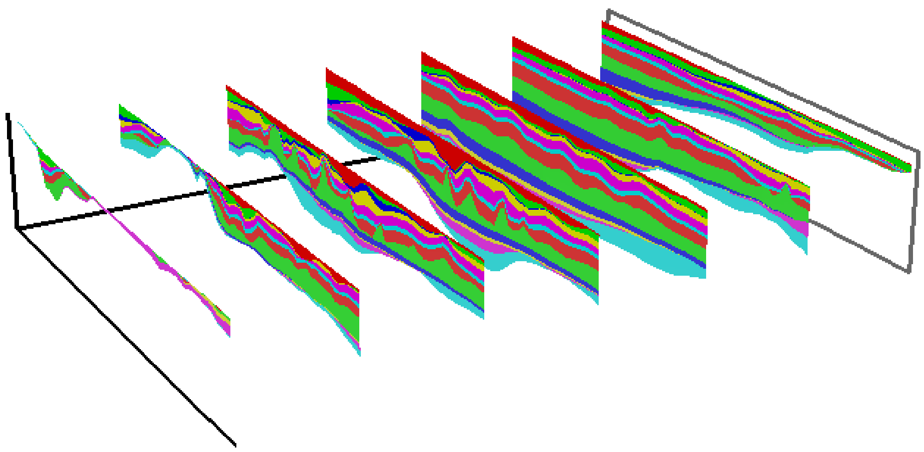


Abb. 2: Sedimentschichten im nordostdeutschen Becken

Numerische Simulation von Zweiphasenströmungen in porösen Medien

Bearbeiter: J. Fuhrmann (FG 3), K. Gärtner (FG 7)

Kooperation: H. J. Diersch (WASY GmbH, Berlin)

Die Ausbreitung von zwei Fluiden (z. B. Wasser, Luft, Öl, andere nichtlösliche Schadstoffe) läßt sich mit Hilfe des Gleichungssystems

$$\partial_t\left(\varphi\rho_i s_i\right) - \nabla\cdot\frac{\rho_i k_i(s_i)k(x)}{\mu_i}(\nabla p_i - \rho_i\gamma) = f_i; \quad s_1 + s_2 = 1; \quad i = 1,2$$

beschreiben. Dabei ist $\rho_i(p_i)$ die Dichte, $s_i(p_1 - p_2)$ die Sättigung und p_i der Druck des i-ten Fluids.
Ziel des Projekts ist, ein Plug-in für das System FEFLOW der WASY GmbH auf der Basis der Druck-Druck-Formulierung zu entwickeln, d. h. unter Benutzung der Phasendrücke als Grundvariablen und Voronoibox-basierter Finite-Volumen-Verfahren auf der Grundlage des *pdelib/sysconlaw* Finite-Volumen-Codes *„pdelib/sysconlaw“* (siehe S. 143) und der Gitterschnittstelle *„pdelib/sxgrid“*.
Im Berichtszeitraum wurde ein funktionierender Prototyp-Code erstellt, und es wurden erste Vergleichsrechnungen ausgeführt. Es konnten u. a. Resultate von Bastian und Helmig [1] reproduziert werden, die wesentliche Aspekte von Fließprozessen in heterogenen Gebieten widerspiegeln. In [1] wurde die weiter verbreitete Druck-Sättigungsformulierung benutzt, welche aus einer Variablentransformation der oben beschriebenen Grundgleichungen hervorgeht.

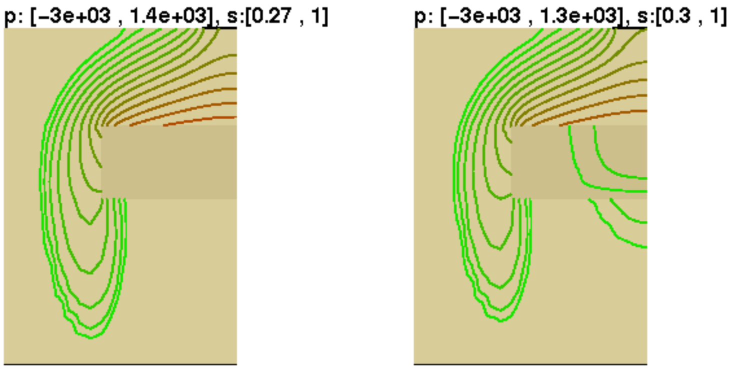


Abb. 1: DNAPL-Infiltration aus [1].
Abhängigkeit des Fließbildes vom Lufteintrittsdruck

Literatur

1. P. Bastian, R. Helmig, *Efficient fully-coupled solution techniques for two-phase flow in porous media. 1. Parallel multigrid solution*, eingereicht in: Technical Report der Universität Stuttgart, 1998, Forschungsbericht SFB 404, Mehrfeldprobleme in der Kontinuumsmechanik.

Analysis und Implementierung von Finite-Volumen-Verfahren für nichtlineare Erhaltungsgleichungen

Bearbeiter: J. Fuhrmann (FG 3), H. Langmach (FG 3), K. Gärtner (FG 7)

Auf der Grundlage der Perron-Frobenius-Theorie nichtnegativer Matrizen konnten neue Resultate zur Existenz und Einzigkeit von Lösungen nichtlinearer Gleichungssysteme mit außerdiagonaler Nichtlinearität erzielt werden. Diese Ergebnisse lassen sich auf zeitimplizite Finite-Volumen-Diskretisierungen von skalaren nichtlinearen Erhaltungsgleichungen der Art

$$\partial_t b(x,u) + \nabla \cdot \mathbf{j}(x,u) = 0,$$
$$\mathbf{j}(x,u) = -k(x,u)\nabla u + \mathbf{q}(x,u)$$

mit stückweise konstanten Ortsabhängigkeiten anwenden. Weiterhin lassen sich mit Hilfe dieser Methode Aussagen zu Stabilität und Maximumprinzipien für die diskreten Gleichungen ableiten. Anwendungen dieser Resultate finden sich beim gesättigt/ungesättigten Fluidtransport und bei nichtlinearen Wärmeleitprozessen.
Auf der Grundlage struktureller Überlegungen zur Darstellung der diskreten nichtlinearen Operatoren ist es möglich, die numerischen Verfahren auf Systeme vom Typ

$$\partial_t b_l(x,u_1 \dots u_\nu) + \nabla \cdot \mathbf{j}_l(x,u_1 \dots u_\nu) + r_l(x,u_1 \dots u_\nu) = f_l,$$
$$\mathbf{j}_l(x,u_1 \dots u_\nu) = -k_l(x,u_1 \dots u_\nu)\nabla u_l + \mathbf{q}_l(x,u_1 \dots u_\nu)$$

aus k Gleichungen in ein-, zwei- und dreidimensionalen Gebieten zu verallgemeinern. Der entsprechende Code – *pdelib/sysconlaw* – ist inzwischen Ausgangspunkt für die Anwendungsprojekte „Simulation des gekoppelten Wärme- und Fluidtransports“ und „Zweiphasenströmungen in porösen Medien“.

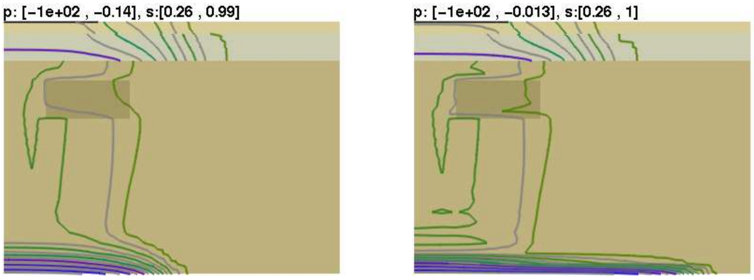


Abb. 1: Stabile (links) und instabile (rechts) Diskretisierung des gesättigt/ungesättigten Grundwasserflusses

Literatur

1. J. Fuhrmann, *Existence and uniqueness of solutions of certain systems of algebraic equations with off diagonal nonlinearity*, WIAS-Preprint No. 425, 1998.

2. J. Fuhrmann, H. Langmach, *Stability of solutions of time-implicit finite volume schemes for viscous nonlinear conservation laws*, WIAS-Preprint No. 437, 1998.

Modellierung, Simulation und Optimierung der Oberflächenhärtung von Stahl

Bearbeiter: J. Fuhrmann (FG 3), D. Hömberg (FG 1), M. Uhle (FG 3)

Kooperation: O. Biró (Technische Universität Graz), A. Kost, L. Jänicke (Brandenburgische Technische Universität Cottbus), V. Arnăutu (Universität Iaşi), J. Sokołowski (Universität Nancy I), H.-J. Spies, A. Buchwalder (Technische Universität Freiberg)

Die wissenschaftliche Arbeit konzentrierte sich im vergangenen Jahr auf zwei Schwerpunkte:

1. Numerische Simulation der induktiven Erwärmung

Quelle induktiver Erwärmung im Eisen sind mit Hilfe eines von hochfrequentem Wechselstrom durchflossenen Kupferinduktors induzierte Wirbelströme [3]. Da auch im Kupfer Stromverdrängung stattfindet, ist das Wirbelstromproblem sowohl im Induktor als auch im Werkstück zu simulieren. Zur Berechnung der Wirbelströme wird eine Vektorpotentialformulierung auf der Basis des magnetischen Vektorpotentials mit Coulomb-Eichung verwendet.
Es wurden Untersuchungen zur Diskretisierung dieser Gleichungen unter Verwendung stückweise linearer finiter Elemente vorgenommen. Der Schwerpunkt lag dabei auf dem Vergleich von Varianten zur Implementierung von Randbedingungen für das Vektorpotential.
Nach der Zeitdiskretisierung mit Hilfe des impliziten Eulerverfahrens und einigen algebraischen Umformungen erhält man in jedem Zeitschritt das lineare Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} C_{AA} + \frac{1}{\Delta t} D_{AA} & D_{A\Phi} \\ D_{\Phi A} & \Delta t \; D_{\Phi\Phi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_n \\ \Phi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_n \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{1}{\Delta t} D_{AA} & 0 \\ D_{\Phi A} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{n-1} \\ \Phi_{n-1} \end{bmatrix}.$$

Hier bezeichnet A_n das ortsdiskrete Vektorpotential und Φ_n das ortsdiskrete elektrostatische Potential zum Zeitpunkt t_n.
Im Berichtszeitraum wurde an der Entwicklung von iterativen Lösungsverfahren für solche Systeme auf der Basis von vorkonditionierten CG-Verfahren gearbeitet. Zur Gewinnung von geeigneten Vorkonditionierern wurden Verfahren zur Zerlegung des Gleichungssystems in Untersysteme untersucht. Getestet wurden neben verschiedenen Varianten des Gauß-Seidel-Verfahrens auch 2-Ebenen-Verfahren mit approximiertem Schur-Komplement. Dabei hat sich gezeigt, daß Vorkonditionierer nach diesen Methoden wesentlich schneller konvergieren als symmetrische Gauß-Seidel-Verfahren.
Es entstand eine umfangreiche Software, die realistische Gitter (siehe Gittergenerierung mit LBG) im SimplexGrid2.0-Format einlesen kann, die Gleichungssysteme generiert und zur Testung der verschiedenen Löser für lineare Gleichungssysteme dient.

2. Optimierung von Wärmebehandlungen

Ausgehend von den bisher erzielten Resultaten für die Simulation und Optimierung des Randschichthärtens [2, 4, 5] konzentrierte sich die Arbeit im Berichtszeitraum auf zwei Bereiche: Strahlverfahren für die Randschichtbearbeitung und Optimal Shape Design für Induktoren.
Für die Gewinnung der im Bereich der Kurzzeitmetallurgie teilweise noch unbekannten Materialparameter wurde eine Kooperation mit dem Institut für Werkstofftechnik der Technischen Universität Bergakademie Freiberg begonnen. Ein gemeinsamer Forschungsantrag zum Thema

„Numerische Simulation von Temperaturfeldern bei der Strahlbearbeitung von kompliziert geformten Bauteilen“ wurde bei der *Stiftung Industrieforschung* eingereicht und befindet sich zur Zeit in Begutachtung.
Die in [5] entwickelten notwendigen Optimalitätsbedingungen wurden in [1] umformuliert und so modifiziert, daß sie einer numerischen Behandlung zugänglich sind. Unterstützt durch ein DFG-Reisestipendium für V. Arnăutu soll im nächsten Jahr ein numerischer Algorithmus für die optimale Steuerung entwickelt und implementiert werden.
Für das optimale Induktordesign wurden während eines Arbeitsaufenthalts an der Universität Nancy I erste Resultate erzielt. Grundlegende Idee ist es, den Induktor durch eine Raumkurve als Röhre überall gleichen Querschnitts zu charakterisieren.
Zur Beschreibung der Gebietsvariation wurde die „Speed-Method“ verwendet. Stabilität und Differenzierbarkeit bezüglich Gebietsvariationen und die Existenz eines optimalen Designs konnten nachgewiesen werden [6]. Die nächsten Ziele sind die Charakterisierung des optimalen Designs in Abhängigkeit von Variationen der Raumkurve sowie die Entwicklung eines numerischen Verfahrens.

Literatur

1. V. ARNĂUTU, D. HÖMBERG, J. SOKOŁOWSKI, *On a laser hardening problem*, erscheint in: An. St. Univ. Ovidius Constanta.

2. J. FUHRMANN, D. HÖMBERG, *Numerical simulation of surface heat treatments*, erscheint in: Internat. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow.

3. J. FUHRMANN, D. HÖMBERG, M. UHLE, *Numerical simulation of induction hardening of steel*, in: Proceedings of the 8th International IGTE Symposium on Numerical Field Calculation in Electrical Engineering and TEAM Workshop (K. R. Richter, Hrsg.), Vol. **II**, Department of Fundamentals and Theory in Electrical Engineering, Technical University of Graz, September 21–24, 1998, pp. 426–431.

4. J. FUHRMANN, D. HÖMBERG, J. SOKOŁOWSKI, *Modeling, simulation and control of laser heat treatments*, erscheint in: Proceedings of International Conference on Control of Partial Differential Equations, Chemnitz, 20.–24.4.1998.

5. D. HÖMBERG, J. SOKOŁOWSKI, *Optimal control of laser hardening*, Adv. Math. Sci. Appl., **8** (1998), pp. 911–928.

6. ——, *Optimal shape design of inductor coils for surface hardening*, in Vorbereitung.

Bandstrukturberechnungen für Quantum Wells in Halbleiter-Heterostrukturen

Bearbeiter: U. Bandelow (FG 1), H.-Chr. Kaiser (FG 1), Th. Koprucki (FG 3), J. Rehberg (FG 1)

Kooperation: Bosch Telecom GmbH, H. Wenzel (Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik Berlin), H.-J. Wünsche (Institut für Physik, Humboldt-Universität zu Berlin)

Förderung: BMBF

Die kp-Methode ist ein etabliertes Standardmodell zur Berechnung der Bandstruktur von Halbleitermaterialien [1], siehe 4.1.2. Diese Methode ist unabhängig von der Zahl der Atome und macht nur von Bandstrukturdaten der beteiligten Volumenmaterialien Gebrauch. In der Enveloppenfunktionsapproximation eignet sie sich darüber hinaus zur Behandlung von ggf. mechanisch verspannten Heterostrukturen, z. B. Quantum Wells.

Physikalisches Modell. Die kp-Methode im *Volumenmaterial* beruht auf einer störungstheoretischen Beschreibung der Bandstruktur $E(\vec{k})$ im Rahmen einer Basis als physikalisch relevant identifizierter Bandkanten-Blochfunktionen. Diese führt auf matrixwertige Eigenwertprobleme für $E(\vec{k})$, die parametrisch vom Wellenvektor $\vec{k}$ abhängen.
In *Heterostrukturen* führt der Verlust der Translationssymmetrie zu einer Aufspaltung in Subbänder. Weitere Effekte wie Spin-Bahn-Wechselwirkung und mechanische Verspannung bewirken zusätzliche Aufspaltungen. Die Wellenfunktionen in der Heterostruktur werden durch Enveloppenfunktionen approximiert, die Eigenfunktionen von matrixwertigen Hamiltonoperatoren sind. Letztere hängen parametrisch vom reduzierten Wellenvektor $\vec{k}_{\|}$ ab. Dabei werden die Daten für die einzelnen beteiligten Materialien aus denen der entsprechenden Volumenmaterialien übernommen, was zu springenden Koeffizienten in den Hamiltonoperatoren führt. Speziell für Quantum Wells ergeben sich daraus räumlich eindimensionale matrixwertige Hamiltonoperatoren.

Mathematische Analyse. Im Rahmen des Projektes wurde eine funktionalanalytische Untersuchung [2] für eindimensionale kp-Operatoren durchgeführt. Hierbei wurden kp-Operatoren mit stückweise konstanten Koeffizienten betrachtet. Von Interesse waren einerseits Aussagen über die spektralen Eigenschaften der einzelnen Operatoren und andererseits über die Abhängigkeit dieser spektralen Eigenschaften vom Wellenvektor $\vec{k}_{\|}$. Aus physikalischer Sicht stellte sich insbesondere die Frage nach der Erhaltung einer bei $\vec{k}_{\|} = 0$ vorhandenen spektralen Lücke für endliche Werte von $\vec{k}_{\|}$ sowie diejenige nach globaler Existenz von Eigenwertkurven $E(\vec{k}_{\|})$. Erstere konnte unter Ausnutzung von Struktureigenschaften der Koeffizientenmatrizen positiv beantwortet werden, dabei gelangen sogar quantitative Abschätzungen in den Daten des Problems. An spektralen Eigenschaften konnten Selbstadjungiertheit und Nuklearität der Resolvente bewiesen werden. Von den Eigenwertkurven wurde Analytizität gezeigt, hingegen gelang der Beweis globaler Existenz nur für ein in den Koeffizienten erster Ordnung regularisiertes Problem, welches das ursprüngliche allerdings spektral beliebig genau zu approximieren gestattet.

Numerisches Verfahren. Zur numerischen Lösung des Problems wurde ein Finite-Elemente-Ansatz verwendet. Dieser wird durch die mathematische Analyse der Operatoren nahegelegt. Numerische Untersuchungen an einem analytisch lösbaren Testproblem haben für diese Methode in den Eigenwerten eine Konvergenz der Ordnung $O(h^2)$ belegt. Diese h^2-Konvergenz konnte für ein physikalisches Testproblem (siehe Abb. 1) für zwei schwere und zwei leichte Löcher (4×4 Hamiltonian nach Chuang [1]) mit springenden Koeffizienten bestätigt werden (siehe Abb. 2). Über den Bereich der gesamten Brillouin-Zone erwies sich das Verfahren als stabil.
Das Verfahren zur Diskretisierung und Lösung des Eigenwertproblems wurde mit *pdelib*-Komponenten (siehe S. 64) realisiert und steht in Form der Problembeschreibungsklasse *kplib* zur Verfügung. Zusätzlich wurde über eine Anbindung der *kplib* an die Skriptsprache *lua* ein komfortabler, leicht erweiterbarer Simulator realisiert. Der Code *kplib* kann als Ausgangsbasis für weitere kp-Modelle dienen.

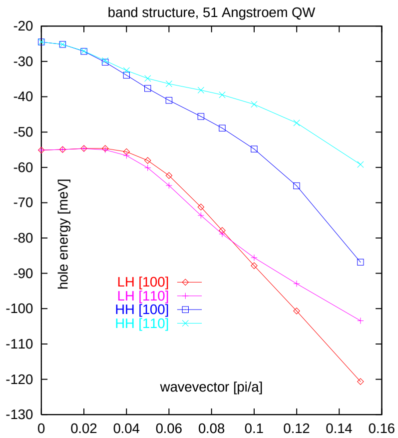


Abb. 1: Subbandstruktur für schwere Löcher (HH) und leichte Löcher (LH) für einen 51Å dicken AlGaAs/GaAs Quantum Well für jeweils $\vec{k}_\parallel = [100]$ und $\vec{k}_\parallel = [110]$-Richtung. Nichtparabolizität und Warping (Richtungsabhängigkeit der Energie) sind deutlich zu sehen.

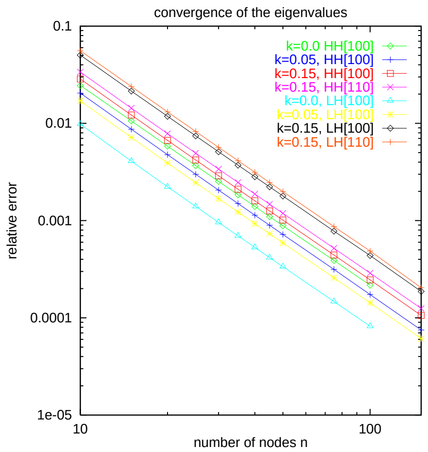


Abb. 2: Relativer Fehler der Eigenwerte in Abhängigkeit von der Anzahl der Gitterpunkte im Quantum Well mit äquidistantem Gitter für verschiedene Beträge und Richtungen von $\vec{k}_\parallel$. Es ist eine strikte h^2-Konvergenz zu beobachten.

Literatur

1. S. L. Chuang, *Physics of optoelectronic Devices*, John Wiley & Sons, Inc., New York Chichester Brisbane Toronto Singapore, 1995, pp. 1–717.

2. U. Bandelow, H.-Chr. Kaiser, Th. Koprucki, J. Rehberg, *Spectral properties for the kp-operators in one dimension (Quantum Wells)*, WIAS-Preprint, in Vorbereitung.

Integrationsalgorithmen für die mehrdimensionalen Eulerschen Gleichungen

Bearbeiter: W. Dreyer (FG 7), M. Kunik (FG 7), K. Sabelfeld (FG 6)

Kooperation: N. Simonov (Sibirische Sektion der Russischen Akademie der Wissenschaften, Novosibirsk)

Die von Dreyer & Kunik entwickelte Lösungstheorie hyperbolischer Systeme mit darunterliegender Mikrotheorie ([1], [2], [3]) erfordert die Auswertung von ein-, zwei- und dreidimensionalen Integralen. Hierzu sind insbesondere im Mehrdimensionalen effiziente Algorithmen notwendig, die wir gemeinsam mit Nikolai Simonov vom Instititut für Numerische Mathematik und Mathematische Geophysik in Novosibirsk erarbeiten. Begonnen haben wir diese Zusammenarbeit im Berichtszeitraum mit einer Studie über Integrale, die im Zusammenhang mit mehrdimensionalen Eulerschen Gleichungen auftreten. Die hier auftretenden Integranden sind ausnahmslos fast Gaußsche Integrationskerne, die wir durch geschickte Erweiterung auf exakt Gaußsche Kerne umformen konnten. Sodann haben wir zur Auswertung dieser Integrale die Methoden von Stroud/Secrest ([5]) sowie eigens hierzu entwickelte Monte-Carlo-Methoden angewendet.
In dem Spezialfall der zweidimensionalen Eulergleichungen ist zwar die Stroud/Secrest-Methode wesentlich effizienter als die Monte-Carlo-Methode, da sie mit ganz wenigen Gaußschen Integrationspunkten auskommt. Allerdings ist die Monte-Carlo-Methode im Gegensatz hierzu einer Übertragung auf höherdimensionale Probleme mit komplizierter Gebietsgeometrie unmittelbar zugänglich. Zusätzlich kann die Monte-Carlo-Methode durch eine Regularisierung der zufälligen Integrationsknotenpunkte bei bestimmten Anwendungen in ihrer Effizienz erheblich gesteigert werden. Diese Erweiterung wird zur Zeit gemeinsam mit den oben genannten Autoren erarbeitet und auf weitere Anwendungsbeispiele ausgedehnt.

Literatur

1. W. DREYER, M. KUNIK, *Maximum entropy principle revisited*, WIAS-Preprint No. 367, 1997, Contin. Mech. Thermodyn., **10** (1998), No. 6, pp. 331–347.

2. ——, *Reflections of Eulerian shock waves at moving adiabatic boundaries*, WIAS-Preprint No. 383, 1997, Monte Carlo Methods and Appl., **4** (1998), No. 3, pp. 231–252.

3. ——, *Initial and boundary value problems of hyperbolic heat conduction*, WIAS-Preprint No. 438, 1998, erscheint in: Contin. Mech. Thermodyn.

4. W. DREYER, M. KUNIK, K. SABELFELD, N. SIMONOV, K. WILMAŃSKI, *Iterative procedure for multidimensional Euler equations*, WIAS-Preprint No. 445, 1998, Monte Carlo Methods and Appl., **4** (1998), No. 3, pp. 253–271.

5. A. H. STROUD, D. SECREST, *Approximate integration formulas for certain spherical symmetric region*, Math. Comp., **17** (1963), pp. 105–135.

5 Wissenschaftlich-technische Dienste

5.1 Bibliothek

Die Wissenschaftler des Instituts benötigen zur Lösung ihrer aus den Anwenderprojekten entstammenden Forschungsaufgaben sowohl Literatur aus mathematischen Teildisziplinen (vorrangig Analysis, Stochastik, Numerik) und Grenzgebieten der Mathematik (überwiegend aus den Zweigen der Mathematischen Physik) als auch (besonders in der Phase der Modellbildung) Literatur aus den jeweiligen (teilweise schwerpunktmäßig am Institut bearbeiteten) Anwendungsfeldern. Sie können sich (neben individuellen Formen der Literatur- und Informationsbeschaffung) auf die (Zu)Arbeit von Bibliothek und Fachinformation stützen.

Die Bibliothek ist hinsichtlich ihres Bestandsaufbaus eine Spezialbibliothek auf dem Gebiet der Angewandten Mathematik, die die traditionellen Aufgaben Auswahl, Erwerbung, Erschließung und Bereitstellung erfüllt, wobei sie sich seit einigen Jahren moderner Medien (fachliche und bibliographische Datenbanken, Internetdokumente etc.) und Methoden (Online-Nutzung, CD-ROM-Recherche) bedienen kann.

Zunehmend tritt neben den *Besitz* von gedruckten Informationsquellen in Form von Zeitschriften, Büchern, Preprints/Reports im eigenen Bestand der Bibliothek die Schaffung von *Zugangsmöglichkeiten* zu gedruckten oder elektronischen Fremdangeboten und -beständen im Institut (an den Arbeitsplätzen, in der Fachinformation, in der Bibliothek).

Gedruckte Fremdbestände werden wie bisher im Wege des Leihverkehrs (Ausleihe und Artikelkopie) mitgenutzt. Unsere Bibliothek stellt ihrerseits ihre Bestände der Fachöffentlichkeit zur Nutzung bereit.

Das Angebot und die Nutzung elektronisch verfügbarer Originalquellen hat sich innerhalb der jüngsten Vergangenheit schon breit, aber besonders vielgestaltig entwickelt, da hier neben kostenfreien Angeboten von Autoren, Wissenschaftsinstitutionen o. a. (Preprints, Reports, Tagungsberichte, Tutorials etc., mitunter sogar Bücher) auch die kostenpflichtigen Angebote der kommerziellen Verlage (in erster Linie deren Zeitschriften-Volltexte) stehen (vgl. Abschnitt „Mitarbeit im Konsortium“).
Diese Zusammenfassung ist sehr kurz gefaßt, um Angaben in vorangegangenen Jahresberichten, die permanent gültig sind, möglichst nicht zu wiederholen.

Kooperationen/Mitgliedschaften der Bibliothek

- Seit 1992 Mitglied in der Arbeitsgemeinschaft der Spezialbibliotheken (ASpB).
- Seit 1992 Fachinformationsmitglied bei der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV).
- Seit 1992 Indirekt-Teilnehmer an der Zeitschriftendatenbank (ZDB) des Deutschen Bibliotheksinstituts (DBI).
- Seit 1998 ist das WIAS, vertreten durch die Bibliothek, Mitglied des Friedrich-Althoff-Konsortiums Berlin-Brandenburg (FAK B/B), einem offenen Zusammenschluß von universitären und außeruniversitären wissenschaftlichen Bibliotheken in der Region.

Mitarbeit im Konsortium

Das WIAS (vertreten durch die Leiterin der Bibliothek) nimmt aktiv an den Arbeitstreffen der Konsorten (ergänzt durch Interessenten und Gäste) teil.

Gegenwärtiger Schwerpunkt ist der Erhalt der Informationsvielfalt aus wissenschaftlichen Zeitschriften in Bibliotheken der Region als Ganzes und die Erweiterung des Angebots für die einzelne Bibliothek. Dies ist *möglich* durch die elektronischen Ausgaben der Zeitschriften, und *notwendig* auf Grund der Budget/Preis-Diskrepanz, die bedarfsgerechte Erwerbungen gedruckter Ausgaben seit längerem nicht mehr zuläßt. Für die *einzelne* Einrichtung ist mit der (aus finanziellen Gründen erzwungenen) Aufgabe des Print-Abonnements auch der ggf. angebotene elektronische Zugriff verwehrt, wenn er denselben oder nur einen unwesentlich geringeren Preis hat. Durch *Zusammenschluß* und damit gemeinsames Handeln werden zwar nicht die seitens der Wissenschaft angemahnten Bedingungen erreicht, aber günstigere Bezugs- und Nutzungskonditionen erzielt, als es der einzelnen Einrichtung gegenüber einem kommerziellen Verlag möglich wäre.

Das Friedrich-Althoff-Konsortium ist 1997, 1998 (und auch für 1999) zu funktionierenden jährlichen Vereinbarungen mit den Verlagen Academic Press und Springer gelangt, nachdem anfangs längerfristige Verträge angestrebt wurden. Das WIAS nimmt derzeit an den abgeschlossenen Nutzungsvereinbarungen des FAK teil, die in der Hinsicht noch Pilotcharakter tragen, daß gegenwärtig für den List Price der abonnierten Zeitschriften sowohl Print-Exemplar als auch Online-Zugriff geliefert werden. Beide Verlage erlauben „Cross Access". Für die dafür erhobene Gebühr erhält die Bibliothek einen Mehrwert.

Neben der *Verfügbarkeit* der Zeitschrifteninhalte (aus Print- oder e-Journals) ist für den Endnutzer (ob Wissenschaftler oder Bibliothekar/Informationsvermittler) die *Erschließung* wichtig. Am Anfang stand die interne titelweise Auflistung und Verlinkung im Vordergrund, die von der Fachinformation in der entsprechenden Server-Kollektion angeboten wird. Daneben sind die direkten Links zu den Systemen der Rechte-Inhaber (IDEAL, LINK) oder Provider vorteilhaft. Hier gibt es inzwischen mehrere unterschiedliche Projekte: elib (Uni Osnabrück), EZB (Uni Regensburg), L@SER (Zeitschriften-Agentur Lange & Springer), ZDB (Deutsches Bibliotheksinstitut). Unsicherheiten bestehen nach wie vor in bezug auf die Archivierung.

Statistische Angaben

- **Erwerbung**

  1998 wurden 151 Zeitschriften durch Kauf erworben, davon 141 Fachzeitschriften und 10 sonstige (Verwaltung, Bibliothek, Betriebsrat).

  Aus finanziellen Gründen wurden 4 Zeitschriften abbestellt. Dem standen 2 Neubestellungen gegenüber, die 1999 anlaufen werden.

  Der Zugang an Bestandseinheiten betrug insgesamt rd. 3030 Stück, und zwar: 373 Bücher bzw. Medienkombinationen (12 Buch/Disc; 3 Buch/CD); 47 Erg.-Lfgn.; 1 CD-ROM; 292 Zeitschriftenbände; 2316 Preprints/Reports. Aussonderungen wurden nicht vorgenommen.

  Damit beläuft sich der Gesamtbestand auf rd. 65 410 Medieneinheiten.

- **Literaturbereitstellungen aus eigenen Beständen**

  Benutzungen *in der Bibliothek* und die Bereitstellung von kopierten Artikeln werden nicht gezählt oder registriert.

  Arbeitsplatzliteratur wird in Dauerleihe an Sonderstandorte verliehen. Zeitschriften und Nachschlagewerke werden präsent gehalten und nur in Ausnahmefällen kurzfristig verliehen.

  Die Zahl der Entleihungen *aus der Bibliothek* (nur Bücher, Preprints/Reports) betrug rd. 4 000.

- **Literaturbeschaffung aus fremden Beständen**

  Für Institutsmitarbeiter wurden rd. 560 Beschaffungsvorgänge überwiegend aus Berliner Bibliotheken (sonst in Fernleihe) erledigt.

  Das Schwergewicht liegt bei älteren Büchern sowie bei Zeitschriften aus anderen Fachgebieten.

5.2 Fachinformation

Die Fachinformation des WIAS bietet kontinuierlich und aktuell u. a. die Online-Recherchemöglichkeit in einem breiten Spektrum bibliographischer Datenbanken für alle Mitarbeiter des WIAS an. Steht bei diesen Retrievalmöglichkeiten die Nutzung der beiden für die Mathematik wichtigsten Datenbanken „Zentralblatt für Mathematik und ihre Grenzgebiete“ und „Mathematics Reviews“ im Vordergrund, werden aufgrund der Zielstellung des WIAS, projektorientierte Forschung zu betreiben, im realisierten Datenbankretrieval auch andere naturwissenschaftliche und ingenieurwissenschaftliche Datenbanken zur uneingeschränkten Nutzung in der Fachinformation vorgehalten.
Eine wesentliche Grundlage hierfür sind die mit dem Fachinformationszentrum Karlsruhe (FIZ) jährlich abgeschlossenen Nutzungsverträge.
Komplexe Recherchen werden nach wie vor in bewährter Form in der Regel zentral in der Fachinformation durchgeführt. Das Spektrum der Recherchemöglichkeiten an den Wissenschaftler-Arbeitsplätzen konnte im Berichtszeitraum wiederum erweitert werden. Dazu zählen in erster Linie die institutsoffene Nutzung von „DB-MATH“ (FIZ-Karlsruhe) und „MathSciNet“ (AMS) über das WWW, deren Nutzung im WIAS für alle Rechnerplattformen realisiert ist.
Diese Online-Dienste werden durch Offline-Nutzung kostenpflichtiger Datenbanken auf CD-ROM zweckmäßig ergänzt. Zu den Erweiterungen dieses Informationangebots gehört auch die Verfügbarkeit dieser Inhouse-Datenbanken über den Windows-NT-Server des Instituts. Der Nutzerkreis dieser Datenbanken konnte derart auf alle Unix-Workstations am Wissenschaftler-Arbeitsplatz erweitert werden.
Von der Fachinformation wird darüber hinaus eine angemessene und effektive Nutzung der weltweiten Netzdienste (WWW) individuell angeboten und rege genutzt.
Im WWW aktuell und als elektronische Versionen angebotene mathematische Zeitschriften werden auf dem Server des WIAS, soweit sie für das im Institut bearbeitete Aufgabenspektrum von Relevanz sind, von der Fachinformation in der Kollektion „Electronic Journals“ (http://www.wias-berlin.de/WIAS/fachinf/ejournals) mit ihren aktuellen Links gespiegelt.
Dazu gehört auch der Dienst L@SER, über den Inhaltsangaben, Abstracts und Volltexte der wissenschaftlichen Journale (derzeit: Springer & Academic Press) komfortabel recherchiert werden können.
Mit diesem aktuellsten Informationsangebot wird es den wissenschaftlichen Mitarbeitern des WIAS ermöglicht, sich effektiv über die veröffentlichte Fachinformation weltweit zu orientieren.

Auf dem WIAS-Server (http://www.wias-berlin.de) werden von der Fachinformation die im Institut erstellten Preprints, die den erreichten Forschungsstand widerspiegeln, in den derzeit üblichen Formaten bereitgestellt (http://www.wias-berlin.de/WIAS_publ_preprints). Die Benutzung des WWW als schnellem und effektivem Distributionsmittel für die Preprints erforderte deren einheitliche Beschreibung durch die Informationsanbieter. Hierzu hat sich der Dublin Core als beschreibende Metasprache zur Erschließung und zum Nachweis international durchgesetzt. Dieser Prozeß wurde im WIAS mit der Einreichung der Preprints verknüpft und weitestgehend automatisiert. Damit ist gewährleistet, daß die vom WIAS im WWW bereitgestellten Preprints weltweit recherchierbar sind. Der Dublin Core, als beschreibende Metasprache für die Web-Dokumente wurde auch für die offiziellen Homepages der Mitarbeiter durchgängig auf dem WIAS-Server realisiert.

Sinn und Zweck des Dublin Cores und die Handhabung entsprechender Tools zur Generierung dieser metasprachlichen Elemente wurden allen interessierten Mitarbeitern des WIAS auf der jährlichen Informationsveranstaltung der Fachinformation vermittelt.
Das WIAS ist Mitglied des Math-Net und dort mit einer standardisierten „Secondary Homepage“ (http://www.wias-berlin.de/WIAS/Math-Net) präsent.
Als Hilfe zur weiteren Effizienzsteigerung der Forschungsarbeit wurde von der Fachinformation eine Studie „Zur Bestimmung von Publikationsindikatoren in der Mathematik mittels des Science Citation Index (SCI)“ erstellt.

Der Fachinformationsbeauftragte des WIAS arbeitet in der IuK-Kommission der wissenschaftlichen Fachgesellschaften mit. Dadurch ist sichergestellt, daß die nationalen und internationalen Empfehlungen auf dem Gebiet IuK im WIAS zügig umgesetzt werden.

5.3 Rechentechnik

Die Gruppe Rechentechnik besteht aus fünf Mitarbeitern. Zwei Mitarbeiter sind für die technische Betreuung der Rechner und deren Verkabelung sowie für die Betreuung der Windows-Software zuständig. Zwei Mitarbeiter kümmern sich um die Softwarebetreuung der UNIX-Rechner sowie um das Management des gesamten Rechnersystems einschließlich der Ankopplung des hausinternen Netzes an das Weitverkehrsnetz. Ein Mitarbeiter unterstützt Anwendergruppen bei der Anwendung der installierten Software (z. B. Bibliotheksrecherche und mathematische Spezialsoftware) und betreut die Internet-Informationsdienste (HyperWave, WWW, FTP).
Als Rechentechnik sind folgende Geräte installiert (in Klammern stehen die entsprechenden Zahlen des Jahres 1997):

- 55 (53) PC (16 x 80486, 39 x Pentium) mit MS-DOS und MS Windows
- 1 (1) DEC VAX (1 x 4000-300) unter OpenVMS
- 52 (46) DEC Alpha (2 x 3000-300X, 5 x 3000-400, 1 x 3000-500, 5 x 3000-600, 1 x 3000-800, 10 x 200 4/233, 2 x 255 4/232, 1 x 400 4/166, 2 x 1000 4/233, 8 x AlphaStation 500/400, 2 x AlphaStation 500/500, 4 x PersonalWorkstation 433au, 5 x PersonalWorkstation 500au, 3 x AlphaServer 800 5/400, 1 x AlphaServer 4100 5/400) unter DEC UNIX (51), OpenVMS (1)
- 23 (19) Silicon Graphics (13 x Indy, 3 x Indigo2, 2 x Octane, 1 x Challenge S, 1 x Challenge DM, 1 x Onyx, 1 x O2, 1 x Origin 2000) unter IRIX
- 1 (1) SUN (1 x SUNserver 630) unter SunOS
- 1 (1) HP (1 x HP 9000/715) unter HP UX

Neben dem Einsatz immer leistungsfähigerer Workstations und PCs bestimmten folgende Projekte die Entwicklung der Rechentechnik des WIAS im Jahr 1998:

1. ATM-Backbone

   Erstmals wurde es durch den Einsatz von Fast-Ethernet-Access-Switches ES3810 im Etagenbereich möglich, Workstations mit Full Duplex Fast Ethernet anzuschließen.

2. WWW-Server

   Es wurde die neueste Version 4.1 des Hyperwave-Servers auf einem Digital-Cluster bestehen aus zwei Alphaservern 800 5/400 unter DEC UNIX installiert. Dadurch hat sich das Antwortzeitverhalten des WWW-Servers drastisch verbessert. Außerdem ist die Zuverlässigkeit stark erhöht worden.

3. File-Server

   Die Kapazität des Fileservers wurde um ca. 180 GByte auf ca. 275 GByte erhöht. Außerdem wurde ein Bandroboter mit ca. 3,6 TByte Bandkapazität installiert und somit ein automatsches Backup aller wesentlichen Daten aller Server ermöglicht. Zur regelmäßigen Sicherung von Backupbändern wurde ein Feuersicherer Datensafe beschafft.

4. Video-Bearbeitung

   Um die Bearbeitung und Herstellung von Videos für Präsentationen zu ermöglichen, wurde ein System beschafft, das aus eine Silicon Graphics Workstation O2 mit digitalem Video-Adapter sowie einem speziellen sehr schnellen Disk-Array besteht.

5. Zugang zu den WIAS-Rechnern

   Durch die Zusammenarbeit mit dem Max-Born-Institut ist es möglich geworden, sowohl über ISDN als auch über analoge Anschlüsse auf die Rechner des Instituts zuzugreifen. Eine einheitliche Zugriffskontrolle wurde mittels eines Radius-Servers realisiert.

6. Telefonanlage

   Es wurde eine eigene Telefonanlage installiert. Damit ergeben sich für die Mitarbeiter auf diesem Gebiet wesentliche Verbesserungen (z. B. hat nun jeder Mitarbeiter eine eigene personengebundene Apparatnummer).

6 Publikationen, wissenschaftliches Leben

6.1 Veröffentlichungen

Monographien

M. Kraft, *Stochastic Modeling of Turbulent Reacting Flow in Chemical Engineering*, Fortschr.-Ber. VDI, Reihe 6 **391**, VDI Verlag, Düsseldorf, 1998.

L. Shilnikov, A. Shilnikov, D. Turaev, L. Chua, *Methods of qualitative theory in nonlinear dynamics. Part I*, World Scientific, Singapore, 1998.

K. Wilmański, *Thermomechanics of Continua*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1998.

Aufsätze in referierten Fachzeitschriften

U. Bandelow, L. Recke, B. Sandstede, *Frequency regions for forced locking of self-pulsating multi-section DFB lasers*, Optics Communications, **147** (1998), pp. 212–218.

A. Bovier, *The Kac version of the Sherrington-Kirkpatrick model at high temperatures*, J. Stat. Phys., **91** (1998), pp. 459–474.

A. Bovier, V. Gayrard, *Metastates in the Hopfield model in the replica symmetric regime*, Math. Phys. Anal. Geom., **1** (1998), pp. 107–144.

G. Bruckner, *An inverse problem from the 2D-groundwater modelling*, Inverse Problems, **14** (1998), pp. 835–851.

——, *On the regularization of an inverse vibration problem*, Z. Angew. Math. Mech., **78** (1998), pp. S193–S194.

G. Bruckner, S. Handrock-Meyer, H. Langmach, *An inverse problem from 2d groundwater modelling*, Inverse Problems, **14** (1998), pp. 835–851.

N. Bubner, J. Sokołowski, J. Sprekels, *Optimal boundary control problems for shape memory alloys under state constraints for stress and temperature*, Numer. Funct. Anal. Optim., **19** (1998), no. 5 & 6, pp. 489–498.

N. Bubner, J. Sprekels, *Optimal control of martensitic phase transitions in a deformation-driven experiment on shape memory alloys*, Adv. Math. Sci. Appl., **8** (1998), pp. 329–355.

W. Dreyer, M. Kunik, *The maximum entropy principle revisited*, Contin. Mech. Thermodyn., **10** (1998), No. 6, pp. 331–347.

——, *Reflections of Eulerian shock waves at moving adiabatic boundaries*, Monte Carlo Methods and Appl., **4** (1998), No. 3, pp. 231–252.

W. Dreyer, M. Kunik, K. Sabelfeld, N. Simonov, K. Wilmański, *Iterative procedure for multidimensional Euler equations*, Monte Carlo Methods and Appl., **4** (1998), No. 3, pp. 253–271.

W. DREYER, W. H. MÜLLER, J. OLSCHEWSKI, *Applications of Fourier transform methods to heterogeneous materials*, Acta Mech. **XXX.** (1998).

J. ELSCHNER, G. SCHMIDT, *Diffraction in periodic structures and optimal design of binary gratings. I: Direct problems and gradient formulas*, Math. Methods Appl. Sci., **21** (1998), pp. 1297-1342.

——, *Numerical solution of optimal design problems for binary gratings*, J. Comput. Phys., **146** (1998), pp. 603–626.

H.-J. ROSTALSKI, J. ELSCHNER, G. SCHMIDT, ET AL., *Use of a multilayer dielectric diffraction grating as the resonator mirror of a neodymium-doped yttrium aluminium garnet laser*, J. Modern Opt., **45** (1998), pp. 1523–1535.

A. M. ETHERIDGE, K. FLEISCHMANN, *Persistence of a two-dimensional super-Brownian motion in a catalytic medium*, Probab. Theory Related Fields, **110** (1998), pp. 1–12.

D. A. DAWSON, K. FLEISCHMANN, G. LEDUC, *Continuous dependence of a class of superprocesses on branching parameters and applications*, Ann. Probab., **26** (1998), pp. 262–301.

H. GAJEWSKI, K. ZACHARIAS, *Global behaviour of a reaction-diffusion system modelling chemotaxis*, Math. Nachr., **195** (1998), pp. 77–114.

R. HENRION, *Characterization of stability for cone-increasing mappings*, Set-Valued Anal., **5** (1997), pp. 323–349.

——, *Simultaneous simplification of loading and core matrices in N-way PCA*, Fresenius J. Anal. Chem., **361** (1998), pp. 15–22.

R. HINDER, S. A. NAZAROV, *Asymptotics of the circulation around a three-dimensional thing wing*, Asymptotic Anal., **18** (1998), pp. 279–305.

D. HÖMBERG, J. SOKOŁOWSKI, *Optimal control of laser heat treatmens*, Adv. Math. Sci. Appl., **8** (1998), pp. 911–928.

R. MODEL, M. WALZEL, R. HÜNLICH, *Optical imaging: Three-dimensional approximation and perturbation approaches for time-domain data*, Applied Optics, **37** (1998), pp. 7968–7976.

D. IOFFE, *Ornstein-Zernike behaviour and analyticity of shapes for self-avoiding walks on* $\mathbb{Z}^d$, Mark. Proc. Rel. Fields, **4** (1998), pp. 323–350.

F. JOCHMANN, *Convergence to stationary states for the transient drift-diffusion equations for semiconductors with prescribed currents*, Asymptotic Anal., **18** (1998), pp. 67–111.

——, *The semistatic limit for Maxwell's equations in an exterior domain*, Comm. Partial Differential Equations, **23** (1998), vol. 11-12, pp. 2035–2076.

M. BROKATE, P. KREJČÍ, *Wellposedness of kinematic hardening models in elastoplasticity*, Math. Model. Num. Anal. (M^2AN), **32** (1998), pp. 177–209.

M. BROKATE, P. KREJČÍ, D. RACHINSKII, *Some analytical properties of the multidimensional continuous Mróz model of plasticity*, Control Cybernet., **27** (1998), 199–215.

P. KREJČÍ, J. SPREKELS, *Global solutions to a coupled parabolic-hyperbolic system with hysteresis in 1-d magnetoelasticity*, Nonlin. Anal., **33** (1998), pp. 341–358.

——, *Temperature-dependent hysteresis in one-dimensional thermovisco-elastoplasticity*, Appl. Math., **43** (1998), pp. 173–205.

——, *Hysteresis operators in phase-field models of Penrose-Fife type*, Appl. Math., **43** (1998), pp. 207–222.

C. KÜLSKE, *Metastates in disordered mean-field models II: The superstates*, J. Stat. Phys., **91** (1998), No. 1/2, pp. 155–176.

——, *A random energy model for size dependence: Recurrence vs. transience*, Probab. Theory Related Fields, **111** (1998), pp. 57–100.

K. GATERMANN, R. LAUTERBACH, *Automatic classification of normal forms*, Nonlinear Anal., **34** (1998), pp. 157–190.

P. MATHÉ, *Asymptotically optimal weighted numerical integration*, J. Complexity, **14** (1998), pp. 34–48.

——, *Relaxation of product Markov chains on product spaces*, J. Complexity, **14** (1998), pp. 319–332.

G. N. MILSTEIN, *On the mean-square approximation of a diffusion process in a bounded domain*, Stochastics Stochastics Rep., **64** (1998), pp. 211–233.

G. N. MILSTEIN, M. NUSSBAUM, *Diffusion limits for nonparametric autoregression*, Probab. Theory Related Fields, **112** (1998), pp. 167–214.

G. N. MILSTEIN, E. PLATEN, H. SCHURZ, *Balanced implicit methods for stiff stochastic systems*, SIAM J. Numer. Anal., **35** (1998), No. 3, pp. 1010–1019.

W. MÜLLER, K. R. SCHNEIDER, *Feedback stabilization of nonlinear discrete-time systems*, J. of Difference Equations and Applications, **4** (1998), pp. 579–596.

I. GRAMA, M. NUSSBAUM, *Asymptotic equivalence for nonparametric generalized linear models*, Probab. Theory Related Fields, **111** (1998), pp. 167–214.

P. PHILIP, *Cardinality and structure of extreme infinite doubly stochastic matrices*, Arch. Math., **71** (1998), pp. 417–424.

O. BUNKE, O. DROGE, J. POLZEHL, *Splus tools for model selection in nonlinear regression*, Comput. Statist., **13** (1998), pp. 257–281.

B. GRUND, J. POLZEHL, *Bias-corrected bootstrap bandwidth selection*, J. Nonparametr. Statist., **8** (1998), pp. 97–126.

M. NEUMANN, J. POLZEHL, *Simultaneous bootstrap confidence bands in nonparametric regression*, J. Nonparametr. Statist., **9** (1998), pp. 307–333.

S. PRÖSSDORF†, J. CHENG, M. YAMAMOTO, *Local estimation for first kind integral equations with analytic kernel*, J. Inverse and Ill-Posed Problems, **6** (1998), pp. 115–126.

S. PRÖSSDORF†, S. V. PEREVERZEV, *A discretization of Volterra integral equations of the third kind with weakly singular kernels*, J. Inverse and Ill-Posed Problems, **5** (1998), pp. 565–577.

S. PRÖSSDORF†, J. SCHULT, *Multiwavelet approximation methods for pseudodifferential equations on curves. Stability and convergence analysis*, Adv. Comput. Math., **9** (1998), pp. 145–171.

M. RADZIUNAS, F. IVANAUSKAS, *The stability conditions of finite difference schemes for Schrödinger-, Kuramoto-Tsuzuki- and heat equations*, Mathematical Modelling and Analysis, Vilnius, **3** (1998), pp. 177–194.

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

W. N. EVERITT, G. NASRI-ROUDSARI, J. REHBERG, *A note on the analytic form of the Kramer sampling theorem*, Results Math., **34** (1998), pp. 310–319.

H. RÜCKER, B. HEINEMANN, W. RÖPKE, R. KURPS, D. KRÜGER, G. LIPPERT, H. J. OSTEN, *Suppressed diffusion of boron and carbon in carbon-rich silicon*, Applied Physics Letters, **73** (1998), No. 12, pp. 1682–1684.

K. SABELFELD, *Stochastic models for coagulation of aerosol particles in intermittent turbulent flows*, Math. Comput. Simulation, **47** (1998), No. 2–5, pp. 85–102.

S. N. DUBTSOV, A. LEVYKIN, K. SABELFELD, *Kintetics of aerosol formation during tungsten hexacarbonyl photolysis*, Opt. Atmosphere Ocean, **11** (1998), No. 5, pp. 548–554.

K. SABELFELD, O. A. KURBANMURADOV, *Two-particle stochastic Eulerian-Lagrangian models of turbulent dispersion*, Math. Comput. Simulation, **47** (1998), No. 2–5, pp. 429–440.

——, *One-particle stochastic Lagrangian model for turbulent dispersion in horizontally homogeneous turbulence*, Monte Carlo Methods and Appl., **4** (1998), No. 2, pp. 127–140.

K. P. KUTSENOGII, A. LEVYKIN, K. SABELFELD, *Numerical simulation of the day danamics of the size spectrum of atmospheric aerosol*, Opt. Atmosphere Ocean, **11** (1998), No. 5, pp. 540–542.

O. SCHMIDTMANN, F. FEUDEL, N. SEEHAFER, *Nonlinear Galerkin methods based on the concept of determining modes for the magnetohydrodynamic equations*, J. Phys. A, **31** (1998), pp. 7141–7155.

K. R. SCHNEIDER, N. NEFEDOV, *Delayed exchange of stabilities in singularly perturbed systems*, Z. Angew. Math. Mech., **78** (1998), Suppl. 1, pp. S199-S202.

K. R. SCHNEIDER, N. X. TAN, *Some results on reduction principles, bifurcation and Hopf bifurcation of equations concerning Lipschitz continuous mappings*, Acta Math. Vietnam, **22** (1998), pp. 427–465.

V. SPOKOINY, *Estimation of a function with discontinuities via local polynomial fit with an adaptive window choice*, Ann. Statist., **26** (1998), No. 4, pp. 1356–1378.

——, *Adaptive and spatially adaptive testing of a nonparametric hypothesis*, Math. Methods Statist., **7** (1998), No. 3, pp. 245–273.

P. COLLI, J. SPREKELS, *Weak solution to some Penrose-Fife phase-field systems with temperature-dependent memory*, J. Differ. Equations, **142** (1998), No. 1, pp. 54–77.

J. SPREKELS, D. TIBA, *Propriétés de bang-bang généralisées dans l'optimisation des plaques*, C. R. Acad. Sci. Paris, t. **327** (1998), Série I, pp. 705–710.

——, *A duality approach in the optimization of beams and plates*, SIAM J. Control Optimiz., **37** (1998), pp. 486–501.

J. SPREKELS, S. ZHENG, *Maximal attractor for the system of a Landau-Ginzburg theory for structural phase transitions in shape momory alloys*, Physica D, **121** (1998), pp. 252–262.

J. SPREKELS, S. ZHENG, P. ZHU, *Asymptotic behavior of the solutions to a Landau-Ginzburg system with viscosity for martensitic phase transitions in shape memory alloys*, SIAM J. Math. Anal., **29** (1998), No. 1, pp. 69–84.

E. YA. KHRUSLOV, H. STEPHAN, *Splitting of some non-localized solutions of the Korteweg-de Vries equation into solitons*, Matematicheskaya fizika, analiz, geometriya, Vol. **5**, No. 1/2 (1998), pp. 49–67.

L. A. BUNIMOVICH, D. V. TURAEV, *Localized solutions in lattice systems and their bifurcations caused by spatial interactions*, Nonlinearity, **11** (1998), pp. 1539–1545.

B. FIEDLER, D. V. TURAEV, *Normal forms, resonances and meandering tip motions near relative equilibria of Euclidian group actions*, Arch. Rational Mech. Anal., **145** (1998), pp. 129–159.

V. PISAREVSKY, A. SHILNIKOV, D. TURAEV, *Asymptotic normal forms for equilibria with a triplet of zero characteristic exponents in systems with symmetry*, Regular and Chaotic Dynamics, **3** (1998), No. 1/2, pp. 126–138.

D. TURAEV, V. ROM-KEDAR, *Elliptic islands appearing in near-ergodic flows*, Nonlinearity, **11** (1998), pp. 575–599.

D. V. TURAEV, L. P. SHILNIKOV, *An example of a wild strange attractor*, Sb. Math., **189** (1998), No. 2, pp. 137–160.

S. CAPRINO, M. PULVIRENTI, W. WAGNER, *Stationary particle systems approximating stationary solutions to the Boltzmann equation*, SIAM J. Math. Anal., **29** (1998), No. 4, pp. 913–934.

S. RJASANOW, W. WAGNER, *A generalized collision mechanism for stochastic particle schemes approximating Boltzmann type equations*, Comput. Math. Appl., **35** (1998), No. 1/2, pp. 165–178.

——, *On time counting procedures in the DSMC method for rarefied gases*, Math. Comput. Simulation, **48** (1998), No. 2, pp. 153–178.

——, *Stochastic particle methods for nonlinear equations*, Z. Angew. Math. Mech., **78** (1998), pp. 173–176.

S. RJASANOW, T. SCHREIBER, W. WAGNER, *Reduction of the number of particles in the stochastic weighted particle method for the Boltzmann equation*, J. Comput. Phys., **145** (1998), No. 1, pp. 382–405.

K. WILMAŃSKI, *A thermomechanic model of compressible porous materials with the balance equation of porosity*, Transport in Porous Media, **32** (1998), pp. 21–47.

——, *On the time of existence of weak discontinuity waves in poroelastic materials*, Arch. Mech., **50** (1998), No. 3, pp. 657–669.

K. ZACHARIAS, *A special system of reaction equations*, Z. Angew. Math. Mech., **78** (1998), pp. 271–275.

Beiträge zu Sammelwerken

U. BANDELOW, H.-CHR. KAISER, H.-J. WÜNSCHE, *Energy calculations for localized multiparticle states in quantum wells*, in: Report of the Workshop Scientific Computing in Electrical Engineering (P. Deuflhard, H. Gajewski, G. Hebermehl, W. Heinrich, A. Koste, U. Langer, T. Weiland, Hrsg), WIAS-Report No. **16**, 1998, Berlin, pp. 28–29.

H.-J. WÜNSCHE, F. HENNEBERGER, O. BRANDT, U. BANDELOW, H.-CHR. KAISER, *Gain calculations for localized excitons and biexcitons: (In,Ga)N versus (Zn,Cd)Se quantum wells*, in: Conference Digest of the 16th International Semiconductor Laser Conference (ISLC'98), 4–8 October, 1998, Nara, Japan, pp. 191–192.

J. BORCHARDT, *Parallelized block-structured Newton-type methods in dynamic process simulation*, in: Applied Parallel Computing, PARA'98 (B. Kågström et al., Hrsg.), Lecture Notes in Comput. Sci., No. **1541**, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1998, pp. 38–42.

A. BOVIER, *Fluctuations of the free energy in the Kac version of the Sherrington-Kirckpatrick model at high temperatures*, in: Probability theory and its applications (M. Löwe, P. Eichelsberger, Hrsg.), Bielefeld, 1998, pp. 1–9.

J. FUHRMANN, *Algebraic multigrid methods – a comparison*, in: Iterative Methods in Scientific Computing, Jackson Hole, WY, July 9-12, 1997, (Proceeding) Vol. **4**, IMACS Series in Computational and Applied Mathematics, 1997, pp. 155–161.

——, *Finite volume methods for the discretization of flow and transport phenomena*, in: Fachtagung Grafikgestützte Grundwassermodellierung, 27.-28.5.1998 (WASY GmbH, Hrsg.), Berlin, 1998, pp. 25–31.

J. FUHRMANN, D. HÖMBERG, M. UHLE, *Numerical simulation of induction hardening of steel*, in: Proceedings of the 8th International IGTE Symposium on Numerical Field Calculation in Electrical Engineering and TEAM Workshop (K. R. Richter, Hrsg.), Vol. **II**, Department of Fundamentals and Theory in Electrical Engineering, Technical University of Graz, September 21-24, 1998, pp. 426–431.

J. FUHRMANN, H. LANGMACH, *Mass conservative numerical solution of subsurface transport problems*, in: Proceedings of the 3rd International Conference on Hydroscience and Engineering, BTU Cottbus, 31.8.-3.9.1998 (K. Holz, W. Bechteler, S. Wang, M. Kawahara, Hrsg.), Vol. **3**, Advances in Hydroscience and Engineering, Cottbus, 1998, Institut für Bauinformatik, BTU Cottbus, The University of Mississippi, Center for Hydroscience and Engineering, URL http://www.bauinf.tu-cottbus.de/ICHE98/Proceedings/Welcome.html.

H. GAJEWSKI, H.-CHR. KAISER, *Transversal modeling of semiconductor lasers with ToSCA*, in: Report of the Workshop Scientific Computing in Electrical Engineering (P. Deuflhard, H. Gajewski, G. Hebermehl, W. Heinrich, A. Koste, U. Langer, T. Weiland, Hrsg.), WIAS-Report No. **16**, 1998, Berlin, pp. 16–17.

B. SCHMITHÜSEN, K. GÄRTNER, W. FICHTNER, *Grid adaption for device simulation according to the dissipation rate*, in: Simulation of Semiconductor Process and Devices 1998 (K. De Meyer, S. Biesemans, Hrsg.), Springer-Verlag Wien, New York, 1998, pp. 197–200.

F. GRUND, J. BORCHARDT, D. HORN, T. MICHAEL, *Numerische Methoden in der Prozeßsimulation*, in: GAMM 97, Annual Meeting (R. Mennicken, F. Pfeifer, Hrsg.), Vol. **78**, Suppl. 3, Z. Angew. Math. Mech., Wiley-VCH Berlin, 1998, pp. 929–930.

G. HEBERMEHL, R. SCHLUNDT, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *Computation of eigen modes for transmission lines*, in: Report of the Workshop Scientific Computing in Electrical Engineering (P. Deuflhard, H. Gajewski, G. Hebermehl, W. Heinrich, A. Kost, U. Langer, T. Weiland, Hrsg.), WIAS-Report No. **16**, 1998, pp. 34–35.

——, *Numerical solution of the eigenmode problem for microwave transmission lines*, in: Proceedings of the Fourth International Conference on Mathematical and Numerical Aspects of Wave Propagation (John A. DeSanto, Hrsg.), Golden, Colorado, USA, SIAM, Philadelphia, 1998, pp. 606–608.

R. HENRION, *Simple-structure transformation of core arrays in N-way PCA*, in: Proceedings 2nd Berlin Colloquy on Statistical and Mathematical Modelling, 1998, pp. 61–67.

D. KLATTE, R. HENRION, *Regularity and stability in nonlinear semi-infinite optimization*, in: Semi-Infinite Programming (R. Reemtsen, J. Rückmann Hrsg.), Kluwer, Dordrecht, 1998, pp. 69–102.

R. MODEL, W. ORLT, M. WALZEL, R. HÜNLICH, *Mathematische Behandlung der Streulicht-tomographie von dicken Gewebeschichten und Phantomen*, Lasermedizinforschung. Projekte im

Schwerpunkt „Lasermedizin“, BMBF-Förderkonzept LASER 2000, VDI Technologiezentrum Physikalische Technologien, Düsseldorf, 1997, pp. 130–132.

R. MODEL, W. ORLT, M. WALZEL, R. HÜNLICH, *Reconstruction algorithm for nearinfrared imaging in turbid media by means of time-domain data*, Optical tomography. Fundamentals and applications in medicine (O. Minet, G. Müller, J. Beuthan, Hrsg.), SPIE Milestone Series, Vol. MS **147**, SPIE Optical Engineering Press, Bellingham, 1998, pp. 537–548.

M. BROKATE, P. KREJČÍ, *On the wellposedness of the Chaboche model*, in: Control and Estimation of Distributed Parameter Systems (W. Desch, F. Kappel, K. Kunisch, Hrsg.), Proceedings of the conference held in Vorau (Austria), July 14–20, 1996, Int. Series Num. Math., Vol. **126**, Birkhäuser, Basel, 1998, pp. 67–79.

P. KREJČÍ, J. SPREKELS, *Weak stabilization of solutions to PDEs with hysteresis in thermovisco-elastoplasticity*, in: Proceedings of Equadiff 9, Conference on Differential Equations and Their Applications, Brno, August 25–29, 1997 (R. P. Agarwal, F. Neuman, J. Vosmanský, Hrsg.), Masaryk University, Brno & Electronic Publishing House, Stony Brook, NY, 1998, pp. 81–96.

C. KÜLSKE, *Limiting behavior of random Gibbs measures: Metastates in some disordered mean field models*, in: Mathematical aspects of spin glasses and neural networks (A. Bovier, P. Picco, Hrsg.), Progr. Probab. **41**, Birkhäuser Boston, 1998, pp. 151–160.

C. PROCACCINI, M. KRAFT, H. FEY, H. BOCKHORN, J. P. LONGWELL, A. F. SAROFIM, K. A. SMITH, *Influence of turbulent mixing on PIC production: Experimental and modeling studies*, in: 27th International Symposium on Combustion, The Combustion Institute, 1998.

U. GRIMMER, H.-J. MUCHA, *Datensegmentierung mittels Clusteranalyse,* in: Data Mining. Theoretische Aspekte und Anwendungen (G. Nakhaeizadeh, Hrsg.), Physica-Verlag, Heidelberg, 1998, pp. 109–141.

H. KAUDERER, H.-J. MUCHA, *Supervised learning with qualitative and mixed attributes. A local scaling approach to discriminate between good and bad redit risks,* in: Classification, Data Analysis, and Data Highways, Proc. 21th Annual Conference of the GfKl (I. Balderjahn, R. Mathar, M. Schader, Hrsg.), Universität Potsdam 1997, Series „Studies in Classification, Data Analysis, and Knowledge Organization“, Springer-Verlag, Berlin, 1998, pp. 374–382.

H.-J. MUCHA, R. SIEGMUND-SCHULTZE, K. DÜBON, *Adaptive cluster analysis techniques - software and applications,* in: Data Science, Classification, and Related Methods (C. Hayashi, N. Ohsumi, K. Yajima, Y. Tanaka, H.-H. Bock, Y. Baba, Hrsg.), Series „Studies in: Classification, Data Analysis, and Knowledge Organization“, Springer-Verlag, Tokio, 1998, pp. 231–238.

R. SCHLUNDT, G. HEBERMEHL, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *On the computation of systems of linear algebraic equations for monolithic microwave integrated circuits*, in: Report of the Workshop Scientific Computing in Electrical Engineering (P. Deuflhard, H. Gajewski, G. Hebermehl, W. Heinrich, A. Kost, U. Langer, T. Weiland, Hrsg.), WIAS-Report No. **16**, 1998, p. 40.

6.2 Preprints, Reports

6.2.1 WIAS-Preprint-Serie

Preprints 1998[1]

[385] Peter E. Kloeden: Lyapunov functions for cocycle attractors in nonautonomous difference equations.

[386] Yuri I. Ingster: Minimax detection of a signal for l_q^n-balls with l_p^n balls removed.

[387] Sergei Leonov: On the optimal kernels in nonparametric curve estimation.

[388] Vladimir E. Bening, Dmitrii M. Chibisov: Higher order asymptotic optimality in testing problems with nuisance parameters.

[389] Lutz Dümbgen, Vladimir G. Spokoiny: Optimal nonparametric testing of qualitative hypotheses.

[390] Pavel Krejčí, Jürgen Sprekels: Hysteresis operators in phase-field models of Penrose-Fife type.

[391] Martin Brokate, Pavel Krejčí, Dmitrii Rachinskii: Some analytical properties of the multidimensional continuous Mróz model of plasticity.

[392] Anton Bovier: Sharp bounds on perfect retrieval in the Hopfield model.

[393] Alexandre Yu. Veretennikov: On polynomial mixing and convergence rate for stochastic difference and differential equations.

[394] Sergei V. Pereverzev, Siegfried Prössdorf: On the characterization of self-regularization properties of a fully discrete projection method for Symm's integral equation.

[395] Siegfried Prössdorf: Tricomi's composition formula and the analysis of multiwavelet approximation methods for boundary integral equations.

[396] Grigori N. Milstein, Michael V. Tretyakov: Numerical methods for nonlinear parabolic equations with small parameter based on probability approach.

[397] René Henrion, Werner Römisch: Stability of solutions to chance constrained stochastic programs.

[398] Georgii Golubev: Wavelet method and asymptotically minimax estimation of regression.

[399] Sergej Rjasanow, Wolfgang Wagner: A temperature time counter scheme for the Boltzmann equation.

[400] Johannes Elschner, Rainer Hinder, Frank Penzel, Gunther Schmidt: Existence, uniqueness and regularity for solutions of the conical diffraction problem.

[1] http://www.wias-berlin.de/WIAS_publ_preprints_1998

[401] Grigori N. Milstein, Alexandre Yu. Veretennikov: On deterministic and stochastic sliding modes via small diffusion approximation.

[402] Tjavdar Ivanov, Vladimir Maz'ya, Gunther Schmidt: Boundary layer approximate approximations and cubature of potentials in domains.

[403] Orazgeldy Kurbanmuradov, Karl Sabelfeld: One-particle stochastic Lagrangian model for turbulent dispersion in horizontally homogeneous turbulence.

[404] Philippe Laurençot: Singular behaviour of finite approximations to the addition model.

[405] Jörg Polzehl, Vladimir G. Spokoiny: Adaptive weights smoothing with applications to image segmentation.

[406] Bettina Albers, Krzysztof Wilmański: An axisymmetric steady-state flow through a poroelastic medium under large deformations.

[407] Gottfried Bruckner, Masahiro Yamamoto: On an operator equation with noise in the operator and the right-hand side with application to an inverse vibration problem.

[408] Valentin F. Butuzov, Nikolai N. Nefedov, Klaus R. Schneider: Singularly perturbed boundary value problems for systems of Tichonov's type in case of exchange of stabilities.

[409] Marian Hristache, Anatoli Juditski, Vladimir Spokoiny: Direct estimation of the index coefficients in a single-index model.

[410] Jürgen Sprekels, Dan Tiba: Propriétés de boum-boum généralisées dans l'optimisation des plaques.

[411] Grigori N. Milstein, Michael V. Tretyakov: Regular oscillations in systems with stochastic resonance.

[412] Christof Külske: The continuous spin random field model: Ferromagnetic ordering in $d \geq 3$.

[413] Valentine Genon-Catalot, Catherine Larédo, Michael Nussbaum: A diffusion representation of the nonparametric iid experiment on an interval.

[414] Sergei M. Pergamenshchikov: On large deviation probabilities in ergodic theorem for singularly perturbed stochastic systems.

[415] Friedrich Grund: Direct linear solvers for vector and parallel computers.

[416] Anton Bovier, Aernout C. D. van Enter, Beat Niederhauser: Stochastic symmetry-breaking in a Gaussian Hopfield model.

[417] Dmitry Ioffe: Ornstein-Zernike behaviour and analyticity of shapes for self-avoiding walks on $\mathbb{Z}^d$.

[418] Dmitry Ioffe,Yvan Velenik: A note on the decay of correlations under δ-pinning.

[419] Yuri I. Ingster: Adaptation in minimax nonparametric hypothesis testing for ellipsoids and Besov bodies.

[420] Georgii Golubev, Michael Nussbaum: Asymptotic equivalence of spectral density and regression estimation.

[421] Orazgeldy Kurbanmuradov, Karl Sabelfeld: Coagulation of aerosol particles in turbulent flows.

[422] Vladimir Maz'ya, Gunther Schmidt: On quasi-interpolation with non-uniformly distributed centers on domains and manifolds.

[423] Anastasya Kolodko, Karl Sabelfeld, Wolfgang Wagner: A stochastic method for solving Smoluchowski's coagulation equation.

[424] Olaf Klein: A class of time discrete schemes for a phase-field system of Penrose-Fife type.

[425] Jürgen Fuhrmann: Existence and uniqueness of solutions of certain systems of algebraic equations with off diagonal nonlinearity.

[426] Elena A. Shchepakina, Vladimir A. Sobolev: Standard chase on black swans and canards.

[427] Regine Model, Matthias Orlt, Monika Walzel, Rolf Hünlich: Optical imaging: 3D approximation and perturbation approaches for time-domain data.

[428] Annegret Glitzky, Rolf Hünlich: Electro-reaction-diffusion systems including cluster reactions of higher order.

[429] Rolf Hünlich, Annegret Glitzky: On energy estimates for electro-diffusion equations arising in semiconductor technology.

[430] Jin Cheng, Siegfried Prössdorf, Masashiro Yamamoto: Local estimation for an integral equation of first kind with analytic kernel.

[431] Donald A. Dawson, Klaus Fleischmann, Carl Mueller: Finite time extinction of super-Brownian motions with catalysts.

[432] Pavel Krejčí: Evolution variational inequalities and multidimensional hysteresis operators.

[433] Andreas Eibeck, Wolfgang Wagner: Approximative solution of the coagulation-fragmentation equation by stochastic particle systems.

[434] Sven Ehrich, Andreas Rathsfeld: Piecewise linear wavelet collocation on triangular grids, approximation of the boundary manifolds and quadrature.

[435] Philippe Laurençot: On a class of continuous coagulation-fragmentation equations.

[436] Michael Ermakov: Importance sampling for large and moderate large deviation simulation of tests and estimators.

[437] Jürgen Fuhrmann, Hartmut Langmach: Stability and existence of solutions of time-implicit finite volume schemes for viscous nonlinear conservation laws.

[438] Wolfgang Dreyer, Matthias Kunik: Initial and boundary value problems of hyperbolic heat conduction.

[439] Jürgen Borchardt, Klaus Ehrhardt, Friedrich Grund, Dietmar Horn: Parallel modular dynamic process simulation.

[440] Kamal N. Soltanov, Jürgen Sprekels: Nonlinear equations in non-reflexive Banach spaces and strongly nonlinear differential equations.

[441] Gottfried Bruckner, Masahiro Yamamoto: Determination of point wave sources by pointwise observations: stability and reconstruction.

[442] Masahiro Yamamoto: Reconstruction of source terms in evolution equations by exact controllability.

[443] Nikolaus Bubner, Olaf Klein, Peter Philip, Jürgen Sprekels, Krzysztof Wilmański: A transient model for the sublimation growth of silicon carbide single crystals.

[444] Wolfgang Dreyer, Wolfgang H. Müller: A study of the coarsening in tin/lead solders.

[445] Wolfgang Dreyer, Matthias Kunik, Karl Sabelfeld, Nikolai Simonov, Krzysztof Wilmański: Iterative procedure for multidimensional Euler equations.

[446] Jens A. Griepentrog, Lutz Recke: Linear elliptic boundary value problems with non-smooth data: Normal solvability on Sobolev-Campanato spaces.

[447] Ilja Schmelzer: A metric theory of gravity with condensed matter interpretation.

[448] Alexandre Yu. Veretennikov: On parameter estimation for ergodic Markov chains with unbounded loss functions.

[449] Vladimir Piterbarg, Sinisha Stamatovich: On maximum of Gaussian non-centered fields indexed on smooth manifolds.

[450] Jean-François Delmas, Klaus Fleischmann: On the hot spots of a catalytic super-Brownian motion.

[451] Peter Donnelly, Steven N. Evans, Klaus Fleischmann, Thomas G. Kurtz, Xiaowen Zhou: Continuum-sites stepping-stone models, coalescing exchangeable partitions, and random trees.

[452] Anton Bovier, Michael Eckhoff, Véronique Gayrard, Markus Klein: Metastability in stochastic dynamics of disordered mean-field models.

[453] Sasha Cyganowski, Peter E. Kloeden, Thomas Pohl: MAPLE for stochastic differential equations.

[454] Johannes Elschner: The work of Vladimir Maz'ya on integral and pseudodifferential operators.

[455] Klaus Fleischmann, Vladimir A. Vatutin: Deviations from typical type proportions in critical multitype Galton-Watson processes.

[456] Markus Kraft, Harald Fey: Some analytic solutions for stochastic reactor models based on the joint composition PDF.

[457] Klaus R. Schneider, Thomas Wilhelm: Model reduction by extended quasi-steady-state approximation.

[458] Pavel Krejčí, Jürgen Sprekels: Phase-field models with hysteresis.

[459] Jan Sieber, Uwe Bandelow, Hans Wenzel, Matthias Wolfrum, Hans-Jürgen Wünsche: Travelling wave equations for semiconductor lasers with gain dispersion.

[460] René Henrion: Qualitative stability of convex programs with probabilistic constraints.

[461] Barbara Gentz, Matthias Löwe: Fluctuations in the Hopfield model at the critical temperature.

[462] Herbert Gajewski, Klaus Gärtner: Domain separation by means of sign changing eigenfunctions of p-Laplacians.

[463] Gottfried Bruckner, Jin Cheng: Tikhonov regularization for an integral equation of the first kind with logarithmic kernel.

[464] Mindaugas Radziunas, Feliksas Ivanauskas: The convergence and stability of splitting finite difference schemes for nonlinear evolutionary type equations.

[465] Krzysztof Wilmański: Note on the notion of incompressibility in theories of porous and granular materials.

[466] Christof Külske: Stability for a continuous SOS-interface model in a randomly perturbed periodic potential.

[467] Georg Hebermehl, Rainer Schlundt, Horst Zscheile, Wolfgang Heinrich: Improved numerical methods for the simulation of microwave circuits.

6.2.2 WIAS-Report-Serie

Reports 1998[2]

[15] Matthias Wolfrum: Geometry of heteroclinic cascades in scalar parabolic differential equations.

[16] Peter Deuflhard, Herbert Gajewski, Georg Hebermehl, Wolfgang Heinrich, Arnulf Kost, Ulrich Langer, Thomas Weiland (eds.): SCEE Workshop "Scientific Computing in Electrical Engineering" September 30 - October 2, 1998 Berlin, Germany.

[2]http://www.wias-berlin.de/WIAS_publ_reports#rep98

6.2.3 Preprints/Reports an anderen Einrichtungen

C. MÜLLER, K. FLEISCHMANN, *Finite time extinction of catalytic branching processes*, technical report, University of Rochester 4, S. 7, 1998.

O. SCHENK, K. GÄRTNER, W. FICHTNER, *Parallel sparse LU factorization in a shared memory computing environment*, ETH IIS Technical Report 98/8.

——, *Parallel multigrid methods for the continuity equations in semiconductor device simulation*, ETH IIS Technical Report 98/17.

——, *Efficient sparse LU factorization with left-right looking strategy on shared memory multiprocessors*, ETH IIS Technical Report 98/40.

H. A. GARCIA, R. HENRION, P. LI, A. MÖLLER, W. RÖMISCH, M. WENDT, G. WOZNY, *A model for the online optimization of integrated distillation columns under stochastic constraints*, Preprint No. 98–32 des DFG-Schwerpunktprogramms „Echtzeitoptimierung großer Systeme“, 1998.

R. GOLLMER, A. MÖLLER, M. P. NOWAK, W. RÖMISCH, R. SCHULTZ, *Primal and dual methods for unit commitment in a hydro-thermal power system*, Preprint 98–20, Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Mathematik, 1998.

J. KLEMELÄ, M. NUSSBAUM, *Constructive asymptotic equivalence of density estimation and Gaussian white noise,* Discussion paper SFB 373, No. 53, Humboldt-Universität zu Berlin, 1998.

J. POLZEHL, V. SPOKOINY, *Image denoising: Pointwise adaptive approach,* Discussion paper SFB 373, No. 38, Humboldt-Universität zu Berlin, 1998.

——, *Adaptive weights smoothing with applications to image restoration,* Discussion paper SFB 373, No. 38, Humboldt–Universität zu Berlin, 1998.

6.3 Mitherausgabe von Zeitschriften

A. BOVIER, Editorial Board, *Journal of Statistical Physics*, Plenum Press, New York-London.

——, Editorial Board, *Markov Processes and Related Fields*, Polymat, Moskau.

H. GAJEWSKI, Advisory Board, *Mathematische Nachrichten*, Wiley-VCH Verlag GmbH, Berlin.

——, Editorial Board, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Wiley-VCH Verlag GmbH, Berlin.

——, Herausgeber, *Teubner-Texte zur Mathematik*, B. G. Teubner Verlagsgesellschaft mbH, Leipzig.

P. KREJČÍ, Editorial Board, *Applications of Mathematics*, Akademie der Wissenschaften, Prag, Tschechische Republik.

M. NUSSBAUM, Editorial Board, *Annals of Statistics*, Institute of Mathematical Statistics, Hayward, USA.

——, Editorial Board, *Annales de l'Institut Henri Poincaré, Probabilités et Statistiques*, Editions Gauthiers-Villars, Paris, Frankreich.

——, Editorial Board, *ESAIM: Probabilités et Statistique*, elektronisches Journal, Societé de Mathématiques Appliquées et Industrielles (SMAI), Paris, Frankreich.

S. PRÖSSDORF, Editorial Board, *Advances in Computational Mathematics*, Baltzer, Amsterdam.

——, Editorial Board, *Complex Variables: Theory and Applications*, Gordon and Breach Science Publishers, New York.

——, Editorial Board, *Journal of Integral Equations and Applications*, The Rocky Mountain Mathematics Consortium, Lubbock.

——, Editorial Board, *Journal of Inverse and Ill-Posed Problems*, VSP, Zeist.

——, Editorial Board, *Mathematische Nachrichten*, Wiley-VCH Verlag GmbH, Berlin.

——, Editorial Board, *Zeitschrift für Analysis und ihre Anwendungen*, Heldermann Verlag, Lemgo.

K. K. SABELFELD, Editor, *Monte Carlo Methods and Applications*, VSP, Utrecht, Niederlande.

——, Editorial Board, *Mathematics and Computers in Simulation*, Verlag Elsevier/North Holland, Niederlande.

J. SPREKELS, Editorial Board, *Advances in Mathematical Sciences and Applications*, Gakkotōsho, Tokio, Japan.

W. WAGNER, Editorial Board, *Monte Carlo Methods and Applications*, VSP, Zeist.

6.4 Vorträge und Gastaufenthalte von Mitarbeitern

B. ALBERS, *Axialsymmetrische Strömung durch einen nichtlinearen poroelastischen Körper*, Thermodynamisches Seminar, Technische Universität Berlin, 14. Januar.

——, *Physikalische Adsorption als Mechanismus für Massenaustausch*, Thermodynamisches Seminar, Technische Universität Berlin, 17. Juni.

G. ALBINUS, *Convex analysis of the energy model of semiconductor devices*, International FORTWIHR Conference 1998, Siemens München-Perlach, 18. März.

U. BANDELOW, *Modellierung raumzeitlicher Effekte in Halbleiterlasern mit innerer Rückkopplung*, Kolloquium des Instituts für Angewandte Physik, Technische Universität Darmstadt, 9. Juni.

——, *Energy calculations for localized multiparticle stats in quantum wells*, WIAS-Workshop „Scientific Computing in Electrical Engineering", Berlin, 30. September.

——, *Die kp-Methode. Eine Einführung*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden" (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 28. Oktober.

——, *Erzwungene, resonante Synchronisation*, Forschungsseminar zum Halbleiterlaser, Humboldt-Universität zu Berlin, 19. November.

N. BERGLUND, *Adiabatic dynamical systems and hysteresis*, Oberseminar „Nichtlineare Dynamik", Freie Universität Berlin, 3. November.

A. BOHÉ, *Metastability and supersensitivity in a viscous shock problem*, Centre International de Rencontres Mathématiques, Luminy, Frankreich, 9. Juni.

J. BORCHARDT, *Block-structured Newton-type methods in large-scale process simulation*, Bayer AG, Leverkusen, 27. Februar.

——, *Parallelized block-structured Newton-type methods in dynamic process simulation*, 4th International Workshop „Applied Parallel Computing", PARA'98, Umeå, Schweden, 15. Juni.

——, *Large-scale dynamic process simulation of chemical plants*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 24. August.

——, *Parallele dynamische Prozeßsimulation*, DAE-Workshop, Technische Universität Darmstadt, 26. November.

A. BOVIER, *The Sherrington-Kirkpatrick model with Kac potential*, DFG-Schwerpunktkolloquium „Interagierende stochastische Systeme von hoher Komplexität", Berlin, 9. Februar.

——, *Statistische Mechanik ungeordneter Systeme*, Fakultät für Mathematik und Informatik, Universität Leipzig, 12. Februar.

——, *Résultats rigoureux sur le modèle de Kac-Hopfield*, UFR de mathématiques, Universität Paris 7, Frankreich, 28. April.

——, *Applications des inégalités de Brascamp et Lieb dans l'étude du modèle de Hopfield*, Institut Henri Poincaré, Paris, Frankreich, 29. April.

——, *Phase transitions in spin systems with long-range interactions*, Tagung „Mathematische Behandlung von Phasenübergängen", Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 11. Mai.

——, *Metastability and Wentzell-Freidlin theory for stochastic dynamics of disordered mean field models*, Workshop „Macroscopic stochastic fluctuations: Equilibrium and non equilibrium", Vulcano, Italien, 15. September.

I. BREMER, *Experiences with the optimization of batch distillation processes*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 26. August.

G. BRUCKNER, *On the regularization of a linear operator equation with an uncertain operator*, GAMM-Tagung 1998, Bremen, 9. April.

——, *On the regularization of an inverse vibration problem with noisy data*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 24. August.

N. BUBNER, *Phase transitions in shape memory alloys*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 19. August.

——, *Modelling and control of martensitic phase transitions in shape memory alloys*, 5th International Symposium on Methods and Models in Automation and Robotics, Międzyzdroje, Polen, 28. August.

——, *On sublimation growth of silicon carbide single crystals*, Workshop „Phase Field Models and Surface Effects", Cortona, Italien, 14. September.

W. DREYER, *Der elektromagnetische Engel*, Ausstellung „Naturwissenschaft, Scholastik und Kunst", Galerie am Fischmarkt, Erfurt, 7. Januar.

——, *Der elektromagnetische Engel*, Ausstellung „Wissenswertes über Engel", ACC Galerie Weimar, 8. Januar.

——, *Between extended thermodynamics with 10 fields and Navier Stokes. Part I*, DFG-Kolloquium „Hyperbolische Erhaltungsgleichungen", Technische Universität Berlin, 10. Januar.

——, *The maximum entropy principle revisited*, TMR-Workshop „Closure Problems of Moment Equations", IACM/FORTH, Kreta, Griechenland, 3. April.

——, *Phononentheorie für 4 Felder. Teil I*, Thermodynamisches Seminar, WIAS, Berlin, 20. Mai.

——, *Thermodynamics of complex materials*, Mechanik-Kolloquium, Heriot-Watt-Universität, Edinburgh, Großbritannien, 5. Juni.

——, *On the history of thermodynamics*, Mechanik-Kolloquium, Heriot-Watt-Universität, Edinburgh, Großbritannien, 8. Juni.

——, *Entropie und Ordnung*, Podiumsdiskussion „Wirtschaft, Kunst und Philosophie“, Pädagogische Hochschule Erfurt, 24. Juli.

——, *Metamorphoses of the entropy*, Kolloquium der Numerischen Analysis, Universität Pavia, Italien, 10. September.

——, *A study of the coarsening in Tin/Lead solders*, Tagung „Phase Field Models and Surface Effects“, Cortona, Italien, 16. September.

——, *Thermodynamik und Gradiententheorie*, Arbeitskreis Stoffgesetze, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Berlin, 25. September.

——, *Der Schnittpunkt von Parallelen entzieht sich der Annäherung*, Ausstellung „Annäherungen an die Unendlichkeit“, Frankfurt/Dreieich, 30. September.

——, *Thermodynamik und Statistische Mechanik von Zinn/Blei-Loten*, Thermodynamisches Seminar, Technische Universität Berlin, 28. Oktober.

——, *Entmischungsvorgänge in Zinn/Blei-Loten*, WIAS-Kolloquium, Berlin, 12. Oktober.

——, *Decomposition of granular bodies and binary alloys. Part I*, WIAS-Workshop „Dynamics of Granular Materials“, Berlin, 3. Dezember.

——, *Kinetic representations of hyperbolic systems. Part I*, WIAS-Workshop „Dynamics of Granular Materials“, Berlin, 4. Dezember.

——, *Statistische Mechanik und Thermodynamik von Zinn/Blei-Legierungen*, Tagung „Mechanik von Compositen“, Universität Paderborn, 8. Dezember.

——, *Statistical mechanics and thermodynamics of Tin/Lead alloys*, Tagung „Mathematical Approaches to Continuum Mechanics of Solids and Fluids“, Wahlen (Odenwald), 20. Dezember.

K. EHRHARDT, *Heterogene Prozeßsimulation in der chemischen Verfahrenstechnik*, Technische Universität Magdeburg, 23. Januar.

——, *Ableitungsfreie Verfahren zur Simulatorkopplung*, Bayer AG, Leverkusen, 21. Oktober.

A. EIBECK, *Gelation phenomena for the coagulation equation*, Seminar „Stochastische Algorithmen“, WIAS, Berlin, 3. Juni.

J. ELSCHNER, *Zur p- und h-p-Version von Randelementmethoden*, Seminarvortrag, TU Chemnitz, 13. Januar.

——, *Optimal design problems for binary optical gratings*, BMBF-Workshop „Shape- and Topology Optimization“, Augsburg, 8. Mai.

——, *Existence, uniqueness and regularity of solutions of the conical diffraction problem*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 21. August.

——, *The work of Vladimir Maz'ya on integral and pseudodifferential operators*, Konferenz „Functional Analysis, Partial Differential Equations, and Applications“, Rostock, 2. September.

——, *Multilineare Faktoranalyse mit Anwendungen auf fluoreszenzspektroskopische Meßdaten*, Kolloquium des Fachbereichs Chemie der Humboldt-Universität zu Berlin, 7. Mai.

——, *Perturbation analysis of optimization problems with probabilistic constraints*, Conference „Mathematical Methods in Economy and Industry“, Liberec, Tschechische Republik, 5. Juni.

——, *Lösungs-Stabilität für stochastische Optimierungsprobleme mit Wahrscheinlichkeitsrestiktionen*, Kolloquium der Arbeitsgruppe Wirtschaftsmathematik der Universität Kaiserslautern, 30. Juni.

——, *Quantitative stability of convex stochastic programs with probabilistic constraints*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 26. August.

——, *Quantitative stability of convex programs with chance constraints*, 9. Belgisch/Französisch/-Deutsche Konferenz über Optimierung, Namur, Belgien, 10. September.

——, *Core transformations in N-way principal components analysis*, Conference on Computer Application in Analytical Chemistry, Duisburg, 17. September.

——, *Wahrscheinlichkeitsrestriktionen in einem Optimierungsmodell für Destillationskolonnen*, DFG-Berichtskolloquium, Kerkrade, Niederlande, 5. November.

——, *Convex probabilistic constraints under nonconvex perturbations*, Workshop on Applied Stochastic Optimization, Prag, Tschechische Republik, 1. Dezember.

K. FLEISCHMANN, *Eine stetige Super-Brownsche Bewegung mit einem Super-Brownschen Katalysator*, Kolloquium, Universität Paderborn, 6. Januar.

——, *An introduction to catalytic branching*, Kolloquium, The Fields Institute and University of Toronto, Kanada, 21. Mai.

——, *An introduction to catalytic branching processes*, Kolloquium, University of Alberta, Edmonton, Kanada, 28. Mai.

——, *Finite time extinction of super-Brownian motions with catalysts*, „International Conference on Stochastic Models“, Ottawa, Kanada, 9. Juni.

——, *Super-Brownian motion with a super-Brownian catalyst*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 19. August.

——, *Katalytische Verzweigungsstrukturen*, DFG-Schwerpunktkolloquium „Interagierende stochastische Systeme von hoher Komplexität“, Berlin, 30. November.

J. FUHRMANN, *pdelib: An open modular tool box for the numerical solution of partial differential equations. Design patterns*, 14th GAMM Seminar „Concepts of Numerical Software“, Kiel, 23. Januar.

——, *Numerical simulation of saturated/unsaturated flow based on Newton's method and finite volumes*, Université Paris Sud, Orsay, Frankreich, 12. Februar.

——, *Numerical solution of nonlinear parabolic problems based on Newton's method and finite volumes*, Institut Elie Cartan, Vandœuvre-les-Nancy, Frankreich, 18. Februar.

——, *Variants of modular algebraic multigrid methods*, Workshop „Practical Aspects of Algebraic Multigrid Methods", Universität Stuttgart, 25. März.

——, *Finite volume methods for the discretization of flow and transport phenomena*, WASY GmbH, Fachtagung „Grafikgestützte Grundwassermodellierung", Berlin, 27. Mai.

——, *Existenz- und Einzigkeitsaussagen für nichtlineare Gleichungssysteme aus Finite-Volumen-Diskretisierungen*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden" (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 10. Juni.

——, *Existenz- und Stabilitätsaussagen für zeitlich implizite Finite-Volumen-Diskretisierungen von nichtlinearen Erhaltungsgleichungen*, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, 30. Juni.

——, *Existenz- und Stabilitätsaussagen für zeitlich implizite Finite-Volumen-Diskretisierungen von nichtlinearen Erhaltungsgleichungen*, Universität-Gesamthochschule Essen, 1. Juli.

——, *Numerically stable finite volume discretizations for nonlinear parabolic problems*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 20. August.

——, *Mass conservative numerical solution of subsurface transport problems*, 3rd International Conference on Hydroscience and Engineering, Brandenburgische Technische Universität Cottbus, 1. September.

——, *Voronoi box based finite volume schemes for the numerical solution of subsurface transport problems*, International Symposium on Computer Methods for Engineering in Porous Media, Giens, Frankreich, 28. September.

——, *Variants of modular algebraic multigrid methods*, 10th GAMM Workshop „Multigrid Methods", Bonn, 7. Oktober.

H. GAJEWSKI, *Gebietszerlegungen mit Hilfe von Eigenfunktionen des p-Laplaceoperators*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden" (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 22. April.

——, *Mathematische und numerische Modellierung von Strom- und Wärmetransport bei hoher Ladungsträgerinjektion*, DFG-Kolloquium „Halbleiterbauelemente hoher Leistung", Braunschweig, 24. Juni.

——, *On Lyapunov functions for the qualitative and numerical study of drift-diffusion equations*, Eötvös Loránd Universität Budapest, Ungarn, 10. November.

——, *Modeling and simulation of semiconductor devices*, Eötvös Loránd Universität Budapest, Ungarn, 12. November.

H. GAJEWSKI, H.-CHR. KAISER, *Mathematische Modellierung und Simulation von Halbleiterstrukturen*, Kolloquium, Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik, Berlin, 12. Dezember.

H. GAJEWSKI, K. ZACHARIAS, *On a reaction-diffusion system modelling chemotaxis*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 24. August.

K. GÄRTNER, *Das Drift-Diffusionsmodell für den Ladungstransport in Halbleitern*, Thermodynamisches Seminar, Technische Universität Berlin, 6. Mai.

——, *Algorithmen zur Lösung der Ladungsträger-Transportgleichungen in Halbleitern*, Technische Universität Chemnitz, 15. Mai.

——, *Parallel multigrid methods for the continuity equations in semiconductor device simulation*, 24th SPEEDUP Workshop „HPC Applications in Natural Sciences and Engineering“, Bern, Schweiz, 25. September.

——, *Reservoir equations and algebraic multigrid methods*, WIAS-Workshop „Dynamics of Granular Materials“, Berlin, 4. Dezember.

B. GENTZ, *The asymptotic behaviour of the overlap in the Hopfield model*, Berliner Kolloquium Wahrscheinlichkeitstheorie, Berlin, 25. November.

A. GLITZKY, *Energetische Abschätzung für Elektro-Reaktions-Diffusionsgleichungen mit schnellen Reaktionen*, Seminar „Prozeßsimulation in der Halbleitertechnologie“, Hirschegg/Kleinwalsertal, 2. Februar.

——, *Energetische Abschätzungen für Elektro-Reaktions-Diffusionssysteme mit schnellen Reaktionen*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 6. Mai.

——, *On electro-reaction-diffusion systems in heterostructures*, Technische Universität München, 23. Juni.

——, *Electro-reaction-diffusion systems in heterostructures*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 19. August.

J. A. GRIEPENTROG, *Regularität nichtglatter linearer elliptischer Randwertprobleme in Sobolev-Campanato-Räumen*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 25. November.

F. GRUND, *Chemische Prozeßsimulation auf Parallelrechnern*, Universität Stuttgart, 4. Juni.

——, *Direct linear solver for vector and parallel computers*, VECPAR'98, 3rd International Meeting on Vector and Parallel Processing, Universität Porto, Portugal, 23. Juni.

——, *Sparse-matrix techniques for parallel computers*, SIAM Anniversary Meeting, University of Toronto, Kanada, 17. Juli.

——, *Sparse-Matrix-Techniken für Parallelrechner*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 20. August.

F. GUYARD, *Numerical simulation and analytical methods for the Boussinesq convection in a spherical domain*, 5. DFG-Kolloquium im Schwerpunkt „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“, Schwäbisches Bildungszentrum Irsee, 11. Mai.

——, *Forced symmetry breaking in numerical computations*, 5. DFG-Kolloquium im Schwerpunkt „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“, Schwäbisches Bildungszentrum Irsee, 11. Mai.

G. HEBERMEHL, *Numerical solution of the eigen mode problem for microwave transmission lines*, 4th International Conference on Mathematical and Numerical Aspects of Wave Propagation, Colorado School of Mines, Golden, Colorado, USA, 3. Juni.

——, *On the computation of eigen modes for lossy monolithic microwave integrated circuits*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 19. August.

——, *Computation of eigen modes for transmission lines*, WIAS-Workshop „Scientific Computing in Electrical Engineering“, Berlin, 1. Oktober.

——, *Simulation von monolithisch integrierten Mikrowellenschaltungen und Multi-Chip-Modulen*, Präsentation, Siemens AG, Berlin, 16. Dezember.

R. HINDER, *Zur Existenz, Eindeutigkeit und Regularität bei der konischen Diffraktion*, Workshop „Analytische Probleme der Kontinuumsphysik“, Darmstadt, 12. Februar.

D. HÖMBERG, *Optimal control of laser surface hardening*, IFIP Conference on Optimal Control of Partial Differential Equations, Chemnitz, 21. April.

——, *A continuum mechanical approach to the derivation of interface conditions*, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 13. Mai.

——, *Modelling, simulation and optimal control of surface heat treatments*, 5th International Symposium on Methods and Models in Automation and Robotics, Międzyzdroje, Polen, 28. August.

——, *Modelling, simulation and optimal control of surface heat treatments*, Workshop „Phase Field Models and Surface Effects“, Cortona, Italien, 15. September.

R. HÜNLICH, *Asymptotik des Paardiffusionsmodells*, Seminar „Prozeßsimulation in der Halbleitertechnologie“, Hirschegg/Kleinwalsertal, 2. Februar.

——, *Zur Asymptotik von Paardiffusionsmodellen*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 29. April.

——, *On energy estimates for electro-diffusion equations arising in semiconductor technology*, Conference „Partial Differential Equations Theory and Numerical Solutions“, Prag, Tschechische Republik, 14. August.

——, *Modellierung und Simulation von Halbleiterbauelementen*, Präsentation, Siemens AG, Berlin, 16. Dezember.

D. IOFFE, *Dobrushin-Kotecký-Shlosman theory up to the critical temperature*, Hebrew University Jerusalem, Israel, 3. Februar.

——, *Decay of two-point functions and analyticity of shapes for self-avoiding walks*, DFG-Schwerpunktkolloquium „Interagierende stochastische Systeme von hoher Komplexität“, Berlin, 11. Februar.

——, *Droplet concentration in solid-on-solid models with stricly convex potentials*, Tagung „Mathematische Behandlung von Phasenübergängen“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 14. Mai.

——, *Concentration results for a class of $\nabla\phi$ interface models*, Inégalités de Sobolev Logarithmique, Méchanique Statistique et Grand Déviation, Institut Henri Poincaré, Paris, Frankreich, 5. Juni.

——, *On the geometry of self-avoiding polygons*, Workshop „Microscopic stochastic fluctuations: Equilibrium and non-equilibrium“, Vulcano, Italien, 14. September.

——, *Probabilistic problems of phase separation*, Italian Probability Meeting, Padua, Italien, 16. September.

——, *Ornstein-Zernike behaviour for self-avoiding walks*, Universität Bologna, Italien, Minikurs, 21., 22. September.

——, *Effective interface models of gradient type*, Universität Rom 2, Italien, Minikurs, 25., 28. September.

F. JOCHMANN, *Asymptotic behaviour of solutions of first order semilinear hyperbolic systems in unbounded domains*, Oberseminar „Nichtlineare Dynamik“, Freie Universität Berlin, 8. Dezember.

H.-CHR. KAISER, *Transversal modeling of semiconductor lasers with ToSCA*, WIAS-Workshop „Scientific Computing in Electrical Engineering“, Berlin, 30. September.

O. KLEIN, *Existence and approximation results for Penrose-Fife systems,* Università di Pavia, Dipartimento di Matematica, Pavia, Italien, 4. Februar.

——, *Approximation results for phase field systems of Penrose-Fife type*, Workshop „Interface Dynamics and Non-equilibrium Phase Transitions“, TÜBİTAK-Boğaziçi University, Istanbul, Türkei, 16. April.

——, *Approximation results for phase-field systems*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 19. August.

——, *A phase field model involving macroscopic effects of microscopic movements*, Workshop „Phase Field Models and Surface Effects“, Cortona, Italien, 17. September.

——, *A class of time discrete schemes for a Penrose-Fife system*, VIth Workshop on Numerical Analysis of Free Boundary Problems, Braga, Portugal, 13. November.

TH. KOPRUCKI, *Numerische Verfahren zu kp-Operatoren. Methode und Beispiele*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 11. November.

M. KRAFT, *Higher order factorization and particle approximation of stochastic reactor models based on the PDF transport equation*, SIAM, 7th International Conference on Numerical Combustion, York, Großbritannien, 31. März.

——, *Higher order factorization and particle approximation of stochastic reactor models based on the PDF transport equation*, Lund Technical University, Department of Combustion Physics, Lund, Schweden, 15. Juni.

——, *Soot and NOx formation in a stationary turbulent combustor, some new analytic solutions and an improved numerical solution method*, Lund Technical University, Department of Mechanical Engineering, Lund, Schweden, 17. Juli.

——, *Soot and NOx formation in a stationary turbulent combustor, some new analytic solutions and an improved numerical solution method*, University of Utah, USA, 21. August.

——, *Soot and NOx formation in a stationary turbulent combustor, some new analytic solutions and an improved numerical solution method*, University of California at Berkeley, USA, 18. September.

——, *Higher order factorization and particle approximation of stochastic reactor models based on the PDF transport equation*, University of Delaware, USA, 22. September.

——, *Higher order factorization and particle approximation of stochastic reactor models based on the PDF transport equation*, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, USA, 25. September.

——, *Stochastische Reaktormodelle und deren Anwendung*, Kolloquium, ITV, Universität Stuttgart, 27. November.

P. KREJČÍ, *Hysteresis in hyperbolic equations*, 7th International Conference on Hyperbolic Equations, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Schweiz, 10. Februar.

——, *A comparison between the Mróz model of plasticity and multidimensional rheological models*, Workshop „Mathematical Approaches to the Continuum Mechanics of Fluids and Solids“, Wahlen (Odenwald), 17. Februar.

——, *Mehrdimensionale Hystereseoperatoren*, Technische Universität Darmstadt, 3. Juni.

——, *Evolution variational inequalities and multidimensional hysteresis operators*, Seminar in differential equations, Chvalatice, Tschechische Republik, Vorlesungsreihe, 29. Juni – 3. Juli.

——, *Solution operators to evolution variational inequalities in a Hilbert space*, Università di Pavia, Italien, 10. September.

——, *Thermodynamic consistency of phase-field models with hysteresis*, Tagung „Phase Field Models and Surface Effects“, Cortona, Italien, 15. September.

——, *Inéquations variationnelles et opérateurs d'hystérésis*, Université de Nancy I, Institut Elie Cartan, Vandoeuvre-les-Nancy, Frankreich, 28. Oktober.

C. KÜLSKE, *Metastates in random spin systems: Some examples of chaotic volume dependence*, Karls-Universität Prag, Tschechische Republik, 4. Februar.

——, *Metastates and chaotic size dependence in random systems*, Minikurs, 4 Stunden, Workshop „Prague Phase Transitions", CTS Prag, Tschechische Republik, 20., 21., 22., 23., 24. April.

——, *Coarse-grainings for continuous spins in a random field*, Courant Institute, New York, USA, 24. September.

M. KUNIK, *Between extended thermodynamics with 10 fields and Navier Stokes. Part I*, DFG-Kolloquium „Hyperbolische Erhaltungsgleichungen", Technische Universität Berlin, 10. Januar.

——, *Phononentheorie für 4 Felder. Teil II*, Thermodynamisches Seminar, WIAS, Berlin, 20. Mai.

——, *Phonon theory with four fields*, STAMM-Tagung '98, Nizza, Frankreich, 29. Mai.

——, *Decomposition of granular bodies and binary alloys. Part II*, WIAS-Workshop „Dynamics of Granular Materials", Berlin, 3. Dezember.

——, *Kinetic representations of hyperbolic systems. Part II*, WIAS-Workshop „Dynamics of Granular Materials", Berlin, 4. Dezember.

——, *Hyperbolische Wärmeleitung*, Universität Stuttgart, 10. Dezember.

R. LAMOUR, *Calculation of consistent initial values for lower index differential-algebraic equations*, GAMM-Tagung, Universität Bremen, 6. April.

R. LAUTERBACH, *Intermittierende Dynamik und Stabilität*, Medizinische Universität Lübeck, 10. Januar.

——, *Forced symmetry breaking for reaction-diffusion equations*, University of Southampton, Großbritannien, 14. Januar.

——, *Dynamik, Symmetrie und Geometrie*, Universität Magdeburg, 17. Januar.

——, *Intermittierende Dynamik in Systemen mit Symmetrie*, GAMM-Tagung, Universität Bremen, 8. April.

——, *Intermittent dynamics and stability*, University of California, Santa Cruz, USA, 5. Mai.

——, *Intermittent dynamics and symmetry*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 19. August.

P. MATHÉ, *Efficiency of Monte Carlo integration using Markov chains,* Seminar „Algorithms and Complexity for Continuous Problems", Dagstuhl, 21. Mai.

——, *Efficiency of Monte Carlo integration using Markov chains,* Seminar „Stochastische Algorithmen", WIAS, Berlin, 3. Juni.

——, *On uniform ergodicity of Markov chains,* Seminar „Stochastische Algorithmen", WIAS, Berlin, 17. Juni.

——, *Efficiency of Monte Carlo integration using Markov chains,* International Congress of Mathematicians, Berlin, 21. August.

G. N. MILSTEIN, *The probabilistic representation of solutions to systems of hyperbolic equations,* Seminar „Stochastische Algorithmen", WIAS, Berlin, 8. April.

——, *The probability approach to numerical solution of nonlinear parabolic equations,* Seminar „Stochastische Algorithmen", WIAS, Berlin, 6. Mai.

——, *The probability approach to numerical solution of nonlinear parabolic equations,* International Congress of Mathematicians, Berlin, 21. August.

H.-J. MUCHA, *Clusteranalyse, Distanzmaße,* Humboldt-Universität zu Berlin, 8. Januar.

——, *Adaptive Clusteranalyse,* Humboldt-Universität zu Berlin, 15. Januar.

——, *Data Mining mit hierarchischer Clusteranalyse,* 22. Jahreskonferenz der GfKl, Technische Universität Dresden, 4. März.

——, *Klassifikation mit adaptiven Distanzen,* 22. Jahreskonferenz der GfKl, Technische Universität Dresden, 6. März.

——, *Cluster analysis based on adaptive distances,* IFCS-98, Rom, Italien, 24. Juli.

——, *Classification based on adaptive distances,* International Congress of Mathematicians, Berlin, 22. August.

M. NUSSBAUM, *Likelihood approximation for a nonparametric birth process,* Workshop „Statistical Inference for Stochastic Processes", Paderborn, 24. April.

——, *Equivalence asymptotique des expériences statistiques: processus Gaussiens stationnaires et aspets constructives,* Université Paul Sabatier, Toulouse, Frankreich, 2. Juni.

——, *Minimax prediction of time varying volatility,* Klausurtagung, Sonderforschungsbereich 373 „Quantifikation und Simulation Ökonomischer Prozesse", Wulkow b. Berlin, 12. Juni.

——, *Constructive asymptotic equivalence of density estimation and Gaussian white noise,* Workshop „Statistique Asymptotique des Processus Stochastiques II", Le Mans, Frankreich, 8. Dezember.

M. PETZOLDT, *Error estimators for problems with varying coefficients: Considerations based on model problems*, Workshop „Adaptive Finite Element Methods and Optimization", Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 19. November.

J. POLZEHL, *Adaptive image denoising with applications to MRI,* Interface'98, 30th Symposium on the Interface, Minneapolis, USA, 15. Mai.

——, *Adaptive image denoising with applications to MRI,* Seminarvortrag, Iowa State University, USA, 8. Juni.

——, *Adaptive image denoising with applications to MRI,* Seminar Paris-Berlin, Garchy, Frankreich, 25. September.

——, *Adaptive image denoising with applications to MRI,* (25.09.98) Workshop des Sonderforschungsbereichs 386, Institut für Statistik, Universität München, 19. Oktober.

——, *Was ist, was kann Data-Mining?* ASTIN-Tagung, Wiesbaden, 23. Oktober.

——, *Adaptive weights smoothing with applications to MRI,* Seminarvortrag, Universität Kaiserslautern, 19. November.

A. RATHSFELD, *A hierarchical three-point basis and wavelet algorithms for boundary element methods*, Seminar Euler and Navier-Stokes Equations, Prag, Tschechische Republik, 27. Mai.

——, *Piecewise linear wavelet collocation for boundary element methods*, Workshop „Functional analysis and partial differential equations“, Han-Sur-Lesse, Belgien, 9. Juni.

——, *Piecewise linear wavelet collocation for boundary element methods*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 28. August.

——, *A hierarchical three-point basis and wavelet algorithms for boundary element methods*, Konferenz „Functional Analysis, Partial Differential Equations, and Applications“, Rostock, 31. August.

——, *Piecewise linear wavelet collocation for boundary element methods*, Seminarvortrag, Politecnico Turin, Italien, 7. Oktober.

——, *Waveletalgorithmen für Randelementmethoden*, Geodätische Woche in Kaiserslautern, 14. Oktober.

——, *Piecewise linear wavelet collocation for boundary element methods*, Seminarvortrag, Newark (Delaware), USA, 24. November.

J. REHBERG, *Spektrale Eigenschaften von kp-Schrödinger-Operatoren*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 4. November.

——, *Spektraltheorie von kp-Schrödinger-Operatoren*, Technische Universität Clausthal, 12. Dezember.

W. RÖPKE, *Lokale Gleichgewichte des Paardiffusionsmodells*, Seminar „Prozeßsimulation in der Halbleitertechnologie“, Hirschegg/Kleinwalsertal, 4. Februar.

K. SABELFELD, *Stochastic models and algorithms for solving Smoluchowski equation governing coagulation of particles in turbulent flows,* Seminar „Algorithms and Complexity for Continuous Problems“, Dagstuhl, 18. Mai.

——, *Stochastic Smoluchowski equation and coagulation of particles in a turbulent collision regime,* Symposium „Rarefied Gas Dynamics“, Marseille, Frankreich, 27. Juli.

——, *Coagulation of aerosol particles in turbulent flows,* Workshop on Nucleation and Coagulation of Aerosol Particles, Helsinki, Finnland, 10. August.

——, *Monte Carlo simulation of turbulent dispersion,* Workshop on Turbulence, Yale University, USA, 7. September.

——, *Stochastic models for numerical simulation of aggregation-disaggregation processes in turbulent flows*, Workshop European Commission, COST Mission, Dortmund, 4. November.

——, *Stochastic simulation of coagulation processes in turbulent flows*, Seminar „Stochastische Algorithmen“, WIAS, Berlin, 11. November.

——, *Stochastic Lagrangian models of turbulent dispersion in the atmospheric boundary layer,* Conference on Atmospheric Aerosol, Tomsk, Rußland, 25. November.

R. SCHLUNDT, *On the computation of systems of linear algebraic equations for monolithic microwave integrated circuits*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 19. August.

I. SCHMELZER, *Grid generation with contravariant geometry description*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 23. September.

G. SCHMIDT, *Representation of multidimensional potentials by approximate wavelets*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 20. August.

——, *Generalized FEM for Helmholtz equation*, WIAS-Workshop „Scientific Computing in Electrical Engineering“, Berlin, 30. September.

——, *Approximation of multidimensional potentials*, Konferenz „Functional Analysis, Partial Differential Equations, and Applications“, Rostock, 31. August.

J. ANDERS, O. SCHMIDTMANN, *Untersuchung lokaler und globaler Strömungsstabilitätsphänomene in axialen Verdichtern*, 17. AK-Sitzung des Teilverbundprojektes Turbotech (AG Turbo), DLR Köln, 12. März.

——, *Stabilitätsuntersuchungen in mehrstufigen Verdichtern*, WIAS-Kolloquium, Berlin, 6. April.

O. SCHMIDTMANN, *Stability problems in turbo compressors*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 19. August.

K. R. SCHNEIDER, *Decomposition and diagonalization in solving large systems*, Universidad de Santiago de Compostela, Spanien, 19. Februar.

——, *On the convergence of waveform-like iteration methods*, Technische Universität Gdansk, Polen, 24. April.

——, *Exchange of stabilities in singularly perturbed systems*, Tagung „Asymptotics of Ordinary Differential Equations and Applications“, Centre International de Rencontres Mathématiques, Luminy, Frankreich, 12. Juni.

——, *Iterative Verfahren in geordneten Banach-Räumen*, Forschungsseminar „Algebro-Differentialgleichungen“, Humboldt-Universität zu Berlin, 17. Juni.

——, *Exchange of stabilities in singularly perturbed systems*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 24. August.

——, *Approximate synchronization of DFB lasers*, Ukrainische Akademie der Wissenschaften, Kiew, Ukraine, 5. Oktober.

——, *A new approach of controlling chaotic behavior*, Ukrainische Akademie der Wissenschaften, Kiew, Ukraine, 7. Oktober.

——, *Stabilitätswechsel in Systemen mit mehreren Zeitskalen*, Technische Universität Chemnitz, 12. November.

——, *Exchange of stabilities in singularly perturbed systems*, Conference on Dynamical Systems and Evolutionary Equations, Lissabon, Portugal, 23. November.

J. SCHOENMAKERS, *LIBOR rate models, related derivatives and model calibration,* Konferenz „Quantitative Methods in Finance", Sydney, Australien, 15. Dezember.

J. SCHULT, *Numerische Verfahren mit Multiwavelets*, Technische Universität Chemnitz, 6. Februar.

——, *Stability condition for spline and multiwavelet collocation*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 21. August.

J. SIEBER, *Numerical simulation of self-pulsating semiconductor lasers*, WIAS-Workshop "Scientific Computing in Electrical Engineering", Berlin, 30. September.

V. SPOKOINY, *Nichtparametrische adaptive Glättung und ihre Anwendungen,* Seminarvortrag, Universität Mainz, 13. Januar.

——, *Adaptive Glättungsmethoden – Anwendungen auf Ökonometrie und fMRI,* Seminarvortrag, Universität Würzburg, 29. Januar.

——, *Testing a qualitative hypothesis,* Seminarvortrag, École Normale Supérieure, Paris, Frankreich, 1. Februar.

——, *On estimating a dynamic function of stochastic system with averaging,* „Münchener Stochastik Tage 1998", 24. März.

——, *On estimating a dynamic function of stochastic system with averaging,* Workshop „Statistical Inference for Stochastic Processes", Paderborn, 23. April.

——, *Bildverarbeitung mit Anwendungen auf MRI,* Mathematisches Kolloquium, Lübeck, 25. Mai.

——, *Adaptive estimation for stochastic systems with averaging,* Workshop „Statistical Inference for Stochastic Processes", Kopenhagen, Dänemark, 28. August.

——, *Local adaptive approach for estimation of complex statistical models,* Seminar Paris-Berlin, Garchy, Frankreich, 27. September.

——, *Adaptive methods in image denoising,* Seminarvortrag, École Normale Supérieure, Paris, Frankreich, 16. November.

J. SPREKELS, *Phasenfeldmodelle und Hysterese*, Kolloquium, Technische Universität München, 16. Januar.

——, *A hysteresis approach to phase-field systems*, ESF/FBP-Abschlußworkshop „Mathematical Treatment of Free Boundary Problems“, Madeira, Portugal, 25. Januar.

——, *Hysteresis in Partiellen Differentialgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 3. Februar.

——, *Hysteresis and phase transitions*, IFIP Conference on Optimal Control of Partial Differential Equations, Chemnitz, 21. April.

——, *Phasenfeldsysteme und Hystereseoperatoren*, Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig, 5. Mai.

——, *Hysterese in Phasenfeldmodellen*, Seminar „Partielle Differentialgleichungen“, Institut für Mathematik, Universität Potsdam, 10. Juni.

——, *Angewandte Mathematik – fundamentale Ressource der technologischen Innovation*, Institut für Angewandte Mathematik, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, 20. Juni.

——, *Hysteresis in phase field equations*, 6th International Conference on Evolution Equations and their Applications in Physical and Life Sciences, Bad Herrenalb, 14. September.

——, *Mathematik – grundlegende Ressource der technologischen Entwicklung*, Berlin-Kolleg, 120. Versammlung der Gesellschaft Deutscher Naturforscher und Ärzte, Berlin, 22. September.

——, *Mathematik – grundlegende Ressource der technologischen Entwicklung*, Tage der Mathematik und Naturwissenschaften, Bühring-Oberschule, Berlin, 23. September.

——, *Hysteresis in Phasenfeldsystemen*, Universität Freiburg, 30. Oktober.

——, *Hysteresis in phase field systems*, Workshop des SFB 438, Technische Universität München, 8. Dezember.

——, *Mathematische Modellbildung der Hysterese*, 3. Gemeinsames Kolloquium des Instituts für Mathematik und des Instituts für Biologie zum Thema Biologie und Mathematik, Humboldt-Universität zu Berlin, 14. Dezember.

D. TURAEV, *Branching of multiple homoclinic loops in Hamiltonian systems*, DFG-Workshop „Dynamik von Fronten und Pulsen“, Bad Oeynhausen, 15. Januar.

——, *Homokline Bifurkationen in Hamilton-Systemen*, 5. DFG-Kolloquium im Schwerpunkt „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“, Schwäbisches Bildungszentrum Irsee, 12. Mai.

——, *On infinitely degenerate dynamical systems*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 19. August.

——, *On infinitely degenerate dynamical systems*, Pontryagin Conference, Universität Moskau, Rußland, 31. August.

——, *On infinitely degenerate dynamical systems*, Workshop on Dynamical Systems, Triest, Italien, 15. September.

——, *Newhouse regions near a homoclinic tangency in conservative maps*, WIAS-Workshop "Stable periodic orbits and homoclinics in symplectic dynamical systems", Berlin, 21. Dezember.

M. UHLE, *Numerical simulation of induction hardening of steel*, 8th International IGTE Symposium, Workshop „Numerical Field Calculation in Electrical Engineering", Graz, Österreich, 23. September.

W. WAGNER, *Über ein stochastisches Verfahren zur Behandlung der Smoluchowski-Gleichung*, Seminar „Stochastische Algorithmen", WIAS, Berlin, 12. Februar.

——, *Stochastic particle systems and the Boltzmann equation*, Universität Heidelberg , 11. Mai.

——, *Approximation of the stationary Boltzmann equation by stochastic particle systems*, University of California at Los Angeles, USA, 10. Juni.

——, *Monte Carlo methods for nonlinear equations*, 3rd International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing, Claremont, USA, 26. Juni.

——, *Stochastic models for nonlinear kinetic equations*, 5th International Workshop on Mathematical Aspects of Fluid and Plasma Dynamics, Maui, USA, 3. Juli.

——, *Study of time counter effects in the direct simulation Monte Carlo method for rarefied gases*, 21st International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Marseille, Frankreich, 27 Juli.

——, *Stochastic particle systems approximating the stationary Boltzmann equation*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 20. August.

——, *Stochastische Partikelsysteme als numerische Verfahren für Probleme der Aerosoldynamik*, DFG-Schwerpunktkolloquium „Interagierende stochastische Systeme von hoher Komplexität", Berlin, 1. Dezember.

K. WILMAŃSKI, *Streuung von Schallwellen in komplexen Materialien*, Thermodynamisches Seminar, WIAS, Berlin, 3. Juni.

——, *Extended thermodynamics of porous materials*, STAMM-Tagung '98, Nizza, Frankreich, 29. Mai.

——, *On austenite-martensite patterns as manifestation of multidimensional deformation in tensite experiments on shape memory alloys*, Tagung „Phase Field Models and Surface Effects", Cortona, Italien, 15. September.

——, *Waves in porous and granular materials*, CISM Course (Vortragsreihe) „Kinetic and Continuum Thermodynamical Approaches to Granular and Porous Media“, Udine, Italien, 15. – 17. Juli.

K. WILMAŃSKI, B. ALBERS, *Macroscopic models of granular materials*, WIAS-Workshop „Dynamics of Granular Materials“, Berlin, 3. Dezember.

M. WOLFRUM, *Geometry of heteroclinic cascades in semilinear parabolic PDE*, Oberseminar „Nichtlineare Dynamik“, Freie Universität Berlin, 10. Februar.

——, *A geometrical description for the attractors of semilinear parabolic PDE*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 25. August.

——, *Geometry of heteroclinic cascades in semilinear parabolic PDE*, Conference on Dynamical Systems and Evolutionary Equations, Lissabon, Portugal, 27. November.

Poster

B. ALBERS, *On a stationary axisymmetric filtration problem under large deformations of the skeleton*, STAMM-Tagung ’98, Nizza, Frankreich, 25. – 29. Mai.

O. MAYROCK, H.-J. WÜNSCHE, F. HENNEBERGER, O. BRANDT, U. BANDELOW, H.-CHR. KAISER, *Calculation of localized multi-particle states in (Zn,Cd)Se and (In,Ga)N quantum wells*, International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS 24), Jerusalem, Israel, 6. August.

H.-J. WÜNSCHE, F. HENNEBERGER, O. BRANDT, U. BANDELOW, H.-CHR. KAISER, *Gain calculations for localized excitons and biexcitons: (In,Ga)N versus (Zn,Cd)Se quantum wells*, 16th International Semiconductor Laser Conference (ISCL), Nara, Japan, 6. Oktober.

W. DREYER, *Reflections of Eulerian shock waves at moving adiabatic boundaries*, STAMM-Tagung ’98, Nizza, Frankreich, 25. Mai.

W. DREYER, M. KUNIK, *Evolution of shock structures in gases and solids*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 19. August.

J. FUHRMANN, D. HÖMBERG, M. UHLE, *Numerical simulation of induction hardening of steel*, WIAS-Workshop „Scientific Computing in Electrical Engineering“, Berlin, 30. September – 2. Oktober.

J. FUHRMANN, H. LANGMACH, TH. KOPRUCKI, I. SCHMELZER, *pdelib – eine Toolbox für die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen*, WGL-Tagung „Biodiversität“, Berlin, 17. – 19. November.

O. SCHENK, K. GÄRTNER, W. FICHTNER, *Parallel sparse LU factorization in a shared memory computing environment*, The International FORTWIHR Conference „High Performance Scientific and Engineering Computing“, Siemens München-Perlach, 16. – 18. März.

F. GUYARD, R. LAUTERBACH, *Numerical simulation and analytical methods for the Boussinesq convection in a spherical domain*, 5. DFG-Kolloquium im Schwerpunkt „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme", Schwäbisches Bildungszentrum Irsee, 12. Mai.

——, *Forced symmetry breaking in numerical computations*, 5. DFG-Kolloquium im Schwerpunkt „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme", Schwäbisches Bildungszentrum Irsee, 12. Mai.

R. HÜNLICH, A. GLITZKY, W. RÖPKE, *Modelling and simulation in the technology of power devices*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 19. August.

H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, *Modeling of QW-lasers including Schrödinger-Poisson systems*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 19. August.

F. MAUSS, M. BALTHASAR, M. KRAFT, C. PROCACCINI, A. F. SAROFIM, J. P. LONGWELL, K. A. SMITH, *Influence of microscale mixing on soot and NOx formation*, 27th International Symposium on Combustion, Boulder (Colorado), USA, 7. August.

A. LIEMANT, *Hopping transport of charge carriers on a disordered lattice*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 22. August.

J. REHBERG, H.-CHR. KAISER, *A hybrid semiconductor device model including nanostructures*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 24. August.

G. REINHARDT, *Schnelle Algorithmen zum Clustern großer Datenmengen*, International Congress of Mathematicians, Berlin, 22. August.

R. SCHLUNDT, *On the computation of systems of linear algebraic equations for monolithic microwave integrated circuits*, WIAS-Workshop „Scientific Computing in Electrical Engineering", Berlin, 30. September – 2. Oktober.

O. SCHMIDTMANN, *Efficiency of nonlinear Galerkin methods for MHD equations*, Workshop „Dimension like Characteristics of Dynamical Systems", Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Dresden, 12. – 15. Juli.

K. R. SCHNEIDER, D. V. TURAEV, *Homokline Bifurkationen in Hamiltonschen Systemen*, 5. DFG-Kolloquium im Schwerpunkt „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme", Schwäbisches Bildungszentrum Irsee, 11. – 13. Mai.

K. WILMAŃSKI, *Dynamics singularities in porous and granular materials*, Intarenational Congress of Mathematicians, Berlin, 19. August.

6.4.1 Arbeitsaufenthalte von Mitarbeitern

J. BORCHARDT, Bayer AG, Leverkusen, 24. – 27. Februar.

A. BOVIER, CPT Marseille, Frankreich, 15. Februar – 7. März.

——, Universität Paris 7, Mathematisches Institut, Frankreich, 1. April – 8. Mai und 27. – 30. Juni.

W. DREYER, Heriot-Watt University Edinburgh, Department of Mechanical and Chemical Engineering, Großbritannien, 3. – 9. Juni.

K. EHRHARDT, Bayer AG, Leverkusen, 19. – 22. Oktober.

A. EIBECK, Technische Universität Ilmenau, 2. – 6. März.

J. ELSCHNER, Universität Linköping, Mathematisches Institut, Linköping, Schweden, 26. Oktober – 1. November.

K. FLEISCHMANN, University of Alberta, Edmonton, Kanada, und The Fields Institute, Toronto, Kanada, 15. Februar – 28. März.

J. FUHRMANN, Université Paris Sud, Orsay, Frankreich, 9. – 16. Februar.

——, Université de Nancy I, Institut Elie Cartan, Vandœuvre-les-Nancy, Frankreich, 16. – 19. Februar.

——, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Institut für Angewandte Mathematik, Bonn, 29. Juni – 1. Juli.

H. GAJEWSKI, Eötvös Loránd Universität Budapest, Ungarn, 10. – 13. November.

A. GLITZKY, Technische Universität München, 22. – 25. Juni.

D. HÖMBERG, Université de Nancy I, Institut Elie Cartan, Vandœuvre-les-Nancy, Frankreich, 22. Juni – 4. Juli.

D. HORN, Bayer AG, Leverkusen, 24. – 27. Februar.

O. HRYNIV, Imperial College, London, Großbritannien, 28. Mai – 18. Juni.

D. IOFFE, Technion, Department of Industrial Engineering, Haifa, Israel, 15. März – 1. April und 16. – 28. Mai.

——, Institut Henri Poincaré, Centre Emile Borel, Paris, Frankreich, 28. Mai – 7. Juni.

——, Universität Bologna, Italien, 16. – 30. September.

O. KLEIN, Università di Pavia, Dipartimento di Matematica, Pavia, Italien, 13. Januar – 28. Februar.

M. KRAFT, Universität Kaiserslautern, Fachbereich Mathematik, 9. – 21. April.

——, Lund Technical University, Department of Combustion Physics, Lund, Schweden, 1. Juni – 30. Juli.

——, University of Utah, Chemical Engineering Department, USA, und Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, USA, 1. August – 30. September.

——, Universität Stuttgart, ITV, 26. November – 1. Dezember.

——, Lund Technical University, Department of Combustion Physics, Lund, Schweden, 16. – 23. Dezember.

P. KREJČÍ, Institut National de la Recherche en Informatique et Automatique (INRIA), Rocquencourt, Frankreich, 28. Oktober – 27. November.

CH. KÜLSKE, Karls-Universität Prag, Tschechische Republik, 19. Februar – 4. März.

R. LAUTERBACH, University of Southampton, Department of Mathematics, Großbritannien, 11. – 16. Januar.

——, University of California, Department of Mathematics, Santa Cruz, USA, 4. – 8. Mai.

——, University of Minnesota, Institute for Mathematics and its Applications (IMA), Minneapolis, USA, 18. – 22. Mai.

J. NIEBSCH, Universität Linköping, Schweden, 15. – 27. Juni.

——, University of Utah, Salt Lake City, USA, 29. September – 28. November.

M. NUSSBAUM, Université Paul Sabatier, Toulouse, Frankreich, 25. Mai – 5. Juni und 25. September – 2. Oktober.

J. POLZEHL, University of Minnesota, School of Statistics, St. Paul, USA, 11. Mai – 12. Juni.

—— Iowa State University, Statistical Laboratory, Ames, USA, 7. – 10. Juni.

A. RATHSFELD, Politecnico Turin, Italien, 5. – 9. Oktober.

——, University of Delaware, Newark, USA, 16. – 27. November.

K. SABELFELD, Universität Karlsruhe, Fakultät für Mathematik, 18. – 25. Februar und 10. – 16. Mai.

—— Universität Helsinki, Finnland, 5. August – 5. September.

—— Yale Universität, USA, 6. September – 5. Oktober.

G. SCHMIDT, Universität Linköping, Schweden, 15. – 27. Juni und 30. November – 12. Dezember.

K. R. SCHNEIDER, Universität Santiago di Compostela, Fachbereich Mathematik, Spanien, 17. – 21. Februar.

——, Technische Universität Gdansk, Fachbereich Mathematik, Gdansk, Polen, 23. – 28. April.

——, Ukrainische Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, Kiew, Ukraine, 3. – 9. Oktober.

J. SCHOENMAKERS, Technische Universität Sydney, Australien, 7. – 22. Dezember.

V. SPOKOINY, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau, Rußland, 5. – 11. April.

D. TURAEV, Université de Paris VI, Frankreich, 26. Februar – 1. März.

——, Weizmann Institute of Science, Department of Applied Mathematics, Rehovot, Israel, 20. März – 5. Mai.

W. WAGNER, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, RiP-Programm, 22. Februar – 21. März.

——, Universität Heidelberg, Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen, 10. – 15. Mai.

——, University of California at Los Angeles, USA, 8. – 19. Juni.

——, Universität Saarbrücken, Fachbereich Mathematik, 30. August – 4. September.

6.5 Vorlesungen und Seminare

A. BOVIER, Vorlesung *Statistische Mechanik neuronaler Netze*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1997/98.

——, Vorlesung *Extreme stochastischer Folgen und Prozesse*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99.

I. BREMER, Übung *Übungen zu Grundlagen der EDV I*, Technische Fachhochschule Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1998/99.

W. DREYER, Vorlesung *Industrierelevante mathematische Probleme*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1997/98.

——, Vorlesung *Statistische Mechanik*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1998 und Wintersemester 1998/99.

W. Dreyer, K. Wilmański, Vorlesung *Kontinuumsthermodynamik*, WIAS, 2 SWS, Wintersemester 1997/98.

H. GAJEWSKI, Vorlesung *Nichtlineare partielle Differentialgleichungen*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1998 und Wintersemester 1998/99.

R. HENRION, Vorlesung *Stochastische Optimierung I*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99.

D. HÖMBERG, Vorlesung *Numerik partieller Differentialgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1998/99.

O. KLEIN, Übung *Funktionalanalysis*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99.

R. LAUTERBACH, Vorlesung *Spezielle Kapitel aus der Theorie dynamischer Systeme*, Freie Universität Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1997/98.

M. NUSSBAUM, Vorlesung *Grundprinzipien der Asymptotischen Statistik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1997/98.

——, Vorlesung *Asymptotische Verfahren*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1998.

——, Vorlesung *Risikotheorie (Schadenversicherungen)*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99.

——, Seminar *Mathematische Statistik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1997/98, Sommersemester 1998 und Wintersemester 1998/99.

J. POLZEHL, Vorlesung *Statistical Consulting*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1997/98.

A. RATHSFELD, Vorlesung *Einführung in die Theorie der Wavelets*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1998.

K. R. SCHNEIDER, Seminar *Halbleiterlaser* (gemeinsam mit L. Recke und H.-J. Wünsche, Humboldt-Universität), Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1997/98, Sommersemester 1998, Wintersemester 1998/99.

——, Seminar *Nichtlineare Dynamik* (gemeinsam mit B. Fiedler, Freie Universität Berlin), Wintersemester 1997/98 und 1998/99 an der Freien Universität Berlin, Sommersemester 1998 am WIAS, einmal wöchentlich mit 1-2 Gastvorträgen.

——, Vorlesung *Singulär gestörte Systeme*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1998.

——, Vorlesung *Qualitative Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99.

J. SPREKELS, Vorlesung *Analysis III*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1997/98.

——, Vorlesung *Analysis IV*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Sommersemester 1998.

——, Vorlesung *Funktionalanalysis*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1998/99.

G. TELSCHOW, Vorlesung *Einführung in die Datenverarbeitung*, Technische Fachhochschule Berlin, 6 SWS, Wintersemester 1998/99.

W. WAGNER, Vorlesung *Grundlagen der Monte-Carlo-Methode*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99.

K. WILMAŃSKI, Vorlesung *Kontinuumsmechanik*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99.

——, Seminar *Thermodynamisches Seminar* (gemeinsam mit I. Müller, Technische Universität Berlin), WIAS/Technische Universität, 2 SWS, Wintersemester 1997/98, Sommersemester 1998 und Wintersemester 1998/99.

6.6 Dissertationen, Habilitationen und Rufe

Dissertationen

A. AKUTOWICZ, Dissertationsschrift: *Periodic feedback for linear systems and optimal control of bilinear systems*, Humboldt-Universität zu Berlin, Betreuer: Dr. Klaus R. Schneider, 30. Juni 1998.

J. SCHULT, Dissertationschrift: *Multiwavelet-Approximationsmethoden für periodische Pseudodifferentialgleichungen*, Technische Universität Chemnitz, Betreuer: Prof. Siegfried Prößdorf†, 17. Juli 1998.

M. WOLFRUM, Dissertationsschrift: *Geometry of heteroclinic cascades in scalar parabolic differential equations*, Freie Universität Berlin, Betreuer: Prof. Bernold Fiedler, 8. Juli 1998.

Habilitationen

R. HENRION, Habilitationsschrift: *The approximate subdifferential and parametric optimization*, Humboldt-Universität zu Berlin, 30. Januar 1998.

Rufe

R. LAUTERBACH, C4-Professur an der Universität Hamburg, zum 1. Oktober 1998.

V. SPOKOINY, C4-Professur an der Universität Würzburg, zum 1. April 1999.

6.7 Eigene Tagungen und Veranstaltungen des WIAS

1. KOLLOQUIUM DES SCHWERPUNKTPROGRAMMS „INTERAGIERENDE STOCHASTISCHE SYSTEME VON HOHER KOMPLEXITÄT“
Berlin, 8. – 11. Februar
Organisation: DFG-Schwerpunkt, Technische Universität Berlin, Universität Erlangen, WIAS (FG 5)
Sponsoring: DFG

Das WIAS war Austragungsort des ersten wissenschaftlichen Kolloquiums des Schwerpunktprogramms „Interagierende stochastische Systeme von hoher Komplexität“, in dem die FG 5 intensiv mitarbeitet. In 17 Vorträgen wurde den 52 Teilnehmern ein Überblick über das vielfältige Spektrum der in diesem Programm behandelten Fragestellungen geboten. Dabei zeigten sich die vielseitigen Anwendungsgebiete stochastischer Methoden, von stochastischer Optimierung, statistischer Physik, Biologie bis zur Finanzmathematik.

VORTRAGSREIHE „MATHEMATIK UND RISIKOMANAGEMENT IN BANKEN“
Berlin, 15. – 18. Juni
Organisation: WIAS (FG 6)
Sponsoring: WIAS

Die Veranstaltung hatte das Ziel, für das WIAS ein mögliches neues Tätigkeitsfeld in der Stochastik der Finanzmärkte zu erkunden. Insbesondere sollte geprüft werden, ob es aussichtsreich wäre, zwischen der entwickelten, von stochastischer Analysis dominierten Theorie und den Bedürfnissen der Praxis eine Mittlerrolle im Technologietransfer anzustreben, insbesondere im Hinblick auf offene Probleme in Numerik und Statistik. Dem entsprach das Vortragsprogramm: Dr. L. Overbeck, Deutsche Bank Frankfurt (Kreditrisiken); G. Stahl, Bundesaufsichtsamt für das Kreditwesen (Backtesting based on exceedances over thresholds), P. Schmidt, Bankgesellschaft Berlin, Research (Ein Konzept zur dynamischen Portfolio-Optimierung), J. Bierbaum, Dr. C. März, Dr. J. Kremer, Bankgesellschaft Berlin, Aktien/Aktienderivate (Methoden der Risikobewertung für Portfolios). Drei der vier Vorträge berührten die derzeit in der Industrie sehr aktuelle Thematik des Value-at-Risk. Die Fragestellung im Hinblick auf die Orientierung des WIAS konnte positiv beantwortet werden, und in der Folge wurde in der FG 6 die Basis für entsprechende anwendungsorientierte Forschungen aufgebaut.

WORKSHOP „EMPIRICAL PROCESSES IN NON- AND SEMIPARAMETRIC STATISTICS“
Berlin, 31. August – 3. September
Organisation: Universität Heidelberg, WIAS (FG 6)
Sponsoring: DFG, WIAS

Gegenstand des Workshops waren neuere Anwendungen der Empirischen Prozeßtheorie in der Mathematischen Statistik. Die Konzeption der Tagung beinhaltete folgende Schwerpunkte: Anwendungen in der Nicht- und Semiparametrik, Starke Approximationen mit Anwendungen auf Vergleich, Abhängige Daten, Bootstrap und Resamplingverfahren. Eine Übersicht über den aktuellen Forschungsstand gab J. Wellner in seinem Eröffnungsvortrag. Gegenstand dreier Vorträge (R. Dudley, A. van der Vaart, X. Shen) war die asymptotische Diskussion nicht- und semiparametrischer Bayesverfahren. P. Massart und andere behandelten den Problemkreis der statistischen Modellwahl; neue starke Approximationstechniken für lokale empirische Prozesse wurden von U. Einmahl und D. Mason vorgestellt. In den Vorträgen von I. Grama und

M. Jähnisch wurden neue starke Approximationen zum asymptotischen Vergleich statistischer Experimente herangezogen (hier der Vergleich von Gaußexperimenten mit Experimenten von Regressionsdaten bzw. von unabhängigen, nicht identisch verteilten Beobachtungen). Weitere Vorträge betrafen interessante statistische Anwendungen der empirischen Prozeßtheorie, wie z. B. nichtparametrische statistische Schätzprobleme für stochastische partielle Differentialgleichungen (R. Khasminskii). E. Giné und M. Ledoux gaben eine Übersicht über den gegenwärtigen Stand probabilistischer Forschung in der empirischen Prozeßtheorie. Der Workshop war mit 55 Teilnehmern gut besucht. Anzumerken ist, daß unter den Teilnehmern 12 aus Übersee und 15 aus dem europäischen Ausland stammten, die Tagung also einen sehr internationalen Charakter hatte. Bei den Einladungen gab es kaum Absagen, sodaß davon ausgegangen werden kann, daß das inhaltliche Konzept des Workshops als sehr stimmig angesehen wurde. Die Diskussionsatmosphäre auf dem Workshop war recht lebhaft und produktiv. Es wurde sichtbar, daß die Thematik ein sehr aktives Gebiet der mathematischen Statistik betrifft. Einige neue Entwicklungen zeichneten sich hier insbesondere ab für Anwendungen in der statistischen Modellwahl, für den asymptotischen Vergleich statistischer Experimente sowie für das Studium von abhängigen Beobachtungen und von nicht- und semiparametrischen Bayesverfahren. Nach unserer Meinung ist es gelungen, in diesem Workshop einen großen Teil der international renommiertesten Statistiker zu versammeln, die auf dem Gebiet statistischer Anwendungen der empirischen Prozeßtheorie arbeiten.

WORKSHOP „SCIENTIFIC COMPUTING IN ELECTRICAL ENGINEERING“
Berlin, 30. September – 2. Oktober
Organisation: Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Fachgruppe „Scientific Computing“ der Deutschen Mathematiker-Vereinigung, WIAS (FG 3)
Sponsoring: Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, WIAS

Der Workshop "Scientific Computing in Electrical Engineering“ (SCEE98) (WIAS-Report No. 16) führte Mathematiker, Physiker und Ingenieure aus Forschungsinstituten, Universitäten und der Industrie zusammen. Im Mittelpunkt der Tagung standen Fragen der Modellierung und der numerischen Simulation elektromagnetischer Phänomene und der Elektronik. Das Programm umfaßte die Gebiete Mikrowellenschaltungen, Integrierte Optik, Optoelektronik, Elektromagnetische Verträglichkeit und Quasistationäre elektromagnetische Felder. Das Tagungsprogramm bestand aus elf 45minütigen eingeladenen Vorträgen führender Vertreter der einzelnen Fächer, 14 Kurzvorträgen (30 Minuten) und 6 Posterbeiträgen. An dem Workshop nahmen 67 Wissenschaftler aus 7 europäischen Ländern, den USA und Brasilien teil. Die Organisatoren der Tagung kamen überein, den nächsten Workshop zu diesem Thema im Jahre 2000 in Rostock durchzuführen.
(P. DEUFLHARD, H. GAJEWSKI, G. HEBERMEHL, W. HEINRICH, A. KOST, U. LANGER, T. WEILAND, *SCEE-Workshop „Scientific Computing in Electrical Engineering*“, WIAS-Report No. 16, 1998.)

WORKSHOP „DYNAMICS OF GRANULAR MATERIALS“
Berlin, 3. – 4. Dezember
Organisation: WIAS (FG 7)
Sponsoring: WIAS

Gegenstand des Workshops war die Modellbildung für granulare und poröse Stoffe in Verbindung mit mathematischer und numerischer Untersuchung der Feldgleichungen. Schwerpunktmäßig wurde ein Modell für Sedimentation von Suspensionen erörtert. Es wurden 9 Vorträge gehalten. Führende deutsche Wissenschaftler aus dem Gebiet der mathematischen Theorie granularer und poröser Materialien haben ihre neuesten Ergebnisse vorgestellt. Die behandelten Themen umfaßten folgende Problemstellungen

- Sedimentation von Suspensionen,
- Randwertaufgaben für granulare und poröse Stoffe mit Massenaustausch,
- Musterentstehung und Separation im mehrkomponentigen Körper,
- numerische Simulation granularer Stoffe,
- stochastische Aspekte der Sedimentation in Flüssigkeiten.

WORKSHOP „STABLE PERIODIC ORBITS AND HOMOCLINICS IN SYMPLECTIC DYNAMICAL SYSTEMS“
Berlin, 14. – 22. Dezember
Organisation: K. R. Schneider, D. Turaev (FG 2)
Sponsoring: WIAS

Das wesentliche Ziel des Workshops bestand darin, mögliche Mechanismen für das Auftreten stabiler periodischer Lösungen in Hamiltonschen Systemen mit zwei und mehr Freiheitsgraden zu erforschen. Dabei wurde der Existenz von sogenannten Newhouse-Gebieten besondere Aufmerksamkeit gewidmet. Newhouse-Gebiete sind Teilmengen im Raum der dynamischen Systeme, in denen die Menge aller Punkte, die dynamischen Systemen mit sich tangierenden homoklinen Orbits entsprechen, dicht liegen.
Der Workshop bestand aus informellen Diskussionsrunden, individuellen Forschungsarbeiten und einer ganztägigen Präsentation sowohl der erzielten Resultate als auch noch offener Fragestellungen. Als Ergebnis des Workshops wurden folgende Resultate erhalten:

1. Existenz nichtlokaler symplektischer Zentrumsmannigfaltigkeiten in der Nähe homokliner Orbits bei Hamiltonschen Systemen (Lerman, Turaev),
2. Existenz von Newhouse-Gebieten in einer beliebigen generischen Entfaltung einer homoklinen Tangierung einer konservativen Abbildung (Gelfreich, Duarte),
3. Existenz von Newhouse-Gebieten in der Nähe einer homoklinen Tangierung mehrdimensionaler symplektischer Diffeomorphismen.

Die Teilnehmer des Workshops kamen aus Portugal, Rußland und Deutschland.

6.8 Gastaufenthalte am WIAS

K. ALEXANDER, University of South Carolina, Department of Mathematics, USA, 12. – 25. Juli.

V. ARNĂUTU, University Al. J. Cuza, Department of Mathematics, Iaşi, Rumänien, 1. – 31. Mai.

V. BENING, Staatliche Universität Moskau, Fachbereich für Mathematik und Kybernetik, Moskau, Rußland, 1. – 31. Oktober.

O. BIRÓ, Technische Universität Graz, Institut für Grundlagen und Theorie der Elektrotechnik, Graz, Österreich, 26. September – 2. Oktober.

T. BLASENBREY, Universität Stuttgart, Institut für Technische Verbrennungen, 13. – 16. Dezember.

TH. BODINEAU, Universität Paris VII, Mathematisches Institut, Frankreich, 10. – 16. August.

M. BROKATE, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Mathematisches Seminar, 1. – 31. März und 22. September – 8. Oktober.

V. BUTUZOV, Staatliche Universität Moskau, Fakultät für Physik, Rußland, 4. – 30. Mai.

M. CAMPANINO, Universität Bologna, Institut für Mathematik, Italien, 11. – 18. Juli.

P. ČAPEK, Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik, Institut für theoretische Grundlagen der chemischen Technik, Prag, Tschechische Republik, 16. November – 14. Dezember.

J. CHENG, Fudan-Universität, Institut für Mathematik, Shanghai, z. Zt. Universität Tokio, Japan, 23. November – 20. Dezember.

D. CHIBISOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Steklov-Institut für Mathematik, Moskau, Rußland, 1. – 31. Oktober.

P. CHOSSAT, Institut Non Linéaire de Nice, Valbonne, Frankreich, 15. – 22. September.

P. COLLI, Università di Pavia, Dipartimento di Matematica, Pavia, Italien, 17. – 22. November.

D. A. DAWSON, The Fields Institute, Ottawa, Kanada, 17. – 27. August.

P. DUARTE, Technische Universität Lissabon, Portugal, 19. – 23. Dezember.

J. ENGLÄNDER, Technion Haifa, Israel, 28. März – 3. April.

M. ERMAKOV, Institut für Probleme des Maschinenbaus, St. Petersburg, Rußland, 1. – 30. September.

S. M. ERMAKOV, Universität St. Petersburg, Fakultät für Mathematik und Mechanik, Rußland, 1. – 30. November.

A. M. ETHERIDGE, University of Oxford, Department of Statistics, Großbritannien, 30. März – 25. April.

C. FACIU, Rumänische Akademie der Wissenschaften, Mathematisches Institut, Bukarest, Rumänien, 27. Februar – 31. März.

V. GAIKO, Belarus State University of Informatics and Radioelectronics, Department of Mathematics, Minsk, Belorußland, 18. – 28. August.

V. GAYRARD, Centre de Physique, CNRS, Marseille, Frankreich, 15. Mai – 17. Juni und 1. November – 20. Dezember.

G. GILARDI, Università di Pavia, Dipartimento di Matematica, Pavia, Italien, 20. – 27. Juni.

F. GODTLIEBSEN, Institute of Mathematical and Physical Sciences, Tromsø, Norwegen, 7. – 14. März.

V. GOLDSHTEIN, Ben Gurion University of the Negev, Beer Sheva, Israel, 2. – 6. Februar.

S. GONCHENKO, Institut für Angewandte Mathematik und Kybernetik, Nizhny Novgorod, Rußland, 20. Mai – 20. Juni und 11. – 23. Dezember.

I. GRAMA, z. Zt. Justus-Liebig-Universität Gießen, Mathematisches Institut, 1. – 23. Dezember.

F. GUIAS, Universität Heidelberg, Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen, 7. – 10. Dezember.

A. GUSHCHIN, Russische Akademie der Wissenschaften, Steklov-Institut für Mathematik, Moskau, Rußland, 1. November – 31. Dezember.

S. HANDROCK-MEYER, Technische Universität Chemnitz, Fachbereich Mathematik, 9. – 20. März.

W. HORN, California State University, Department of Mathematics, Northridge, USA, 21. – 26. Juni.

M. HRISTACHE, ENSAI, Bruz, Frankreich, 1. – 10. Januar.

G. C. HSIAO, Universität Delaware, Institut für Mathematik, Delaware, USA, 27. Juli – 20. August und 26. – 31. August.

Y. INGSTER, Universität für Transport, Fachbereich für Angewandte Mathematik, St. Petersburg, Rußland, 1. Juni – 10. August.

A. JUDITSKY, Institut de Recherche en Informatique, INRIA, Rhône-Alpes, Frankreich, 24. August – 23. September.

J. KACZMAREK, Polnische Akademie der Wissenschaften, Institute Fluid-Flow Machines, Gdansk, Polen, 1. – 31. Oktober.

J. KASHTANOV, Universität St. Petersburg, Fachbereich für Mathematik, St. Petersburg, Rußland, 19. September – 18. Oktober.

R. KHASMINSKI, Wayne State University, Department of Mathematics, Detroit, USA, 23. August – 5. September.

A. KLENKE, Universität Erlangen, Mathematisches Institut, 14. – 20. Januar und 27. September – 9. Oktober.

A. A. KOLODKO, Russische Akademie der Wissenschaften, Rechenzentrum, Novosibirsk, Rußland, 22. Januar – 21. Februar und 2. – 23. Juli.

V. KONAKOV, Zentrales Ökonomisches und Mathematisches Institut, Moskau, Rußland, 16. März – 15. April.

A. I. KOSHELEV, State Maritime Academy, St. Petersburg, Rußland, 1. – 31. Januar.

S. KOSTADINOV, Universität Plovdiv, Institut für Mathematik, Plovdiv, Bulgarien, 7. – 20. Dezember.

M. A. KOURITZIN, University of Alberta, Department of Mathematical Science, Edmonton, Kanada, 23. Juni – 13. Juli.

M. KUČERA, Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik, Mathematisches Institut Prag, Tschechische Republik, 7. – 13. Dezember.

O. KURBANMURADOV, Wissenschaftliches Zentrum „Climate“, Turkmenische Akademie der Wissenschaften, Aschchabad, Turkmenistan, 19. April – 18. Juli.

PH. LAURENÇOT, Université de Nancy I, Laboratoire de Mathématiques, Institut Élie Cartan, Vandoeuvre-les-Nancy, Frankreich, 1. Februar – 31. Juli und 9. – 13. Dezember.

R. B. LEHOUCQ, Sandia National Laboratories, Albuquerque, New Mexico, USA, 17. – 21. Juni.

L. LERMAN, Institut für Angewandte Mathematik und Kybernetik, Nizhny Novgorod, Rußland, 14. – 23. Dezember.

A. LEVYKIN, Russische Akademie der Wissenschaften, Rechenzentrum, Novosibirsk, Rußland, 9. – 23. November.

R. LIPTSER, Tel Aviv University, Department of Electrical Engineering-Systems, Tel Aviv, Israel, 25. August – 24. Oktober.

M. LÖWE, EURANDOM, Eindhoven, Niederlande, 23. – 27. November.

E. LOGAK, Université de Cergy-Pontoise, Département de Mathématiques, Frankreich, 27. – 31. Mai.

V. MAZ'YA, Universität Linköping, Institut für Mathematik, Linköping, Schweden, 7. – 12. Februar und 29. Juli – 2. August.

C. MUELLER, University of Rochester, Department of Mathematics, USA, 8. – 18. Juli.

W. MÜLLER, Heriot-Watt University, Department of Mechanical and Chemical Engineering, Edinburgh, Großbritannien, 10. – 16. Juni.

S. A. NAZAROV, State Maritime Academy, St. Petersburg, Rußland, 1. – 30. November.

N. NEFEDOV, Staatliche Universität Moskau, Fakultät für Physik, Rußland, 4. – 30. Mai.

CH. NEWMAN, New York University, Courant Institute of Mathematics, USA, 1. – 26. August.

S. PERGAMENSHCHIKOV, Universität Tomsk, Mathematisches Institut, Tomsk, Rußland, 28. April – 27. Juni.

S. PEREVERSEV, Ukrainische Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, Kiew, Ukraine, 28. August – 27. November.

V. PITERBARG, Moscow State University, Laboratory of Probability, Moskau, Rußland, 1. – 30. November.

V. RADVOGIN, Russische Akademie der Wissenschaften, Keldysh-Institut für Angewandte Mathematik, Moskau, Rußland, 30. März – 5. April.

R. C. ROGERS, Virginia Tech, Department of Mathematics, Blacksburg, USA, 5. – 13. Juli.

A. SAMOILENKO, Nationale Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Institut für Mathematik, Kiew, Ukraine, 29. August – 11. September.

O. SCHENK, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Institut für Integrierte Systeme, Zürich, Schweiz, 19. – 25. Oktober.

U. SCHMOCK, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Schweiz, 15. – 18. Juni.

R. H. SCHONMANN, University of California at Los Angeles, Department of Mathematics, USA, 16. – 19. September.

H. SCHURZ, La Universidad de los Andes, Departamento Matematicas, Bogota, Kolumbien, 15. Juni – 10. Juli.

G. SEBASTIANI, Consiglio Nazionale delle Richerche, Instituto per le Applicazione del Calcolo, Rom, Italien, 1. – 15. November.

I. SHALIMOVA, Russische Akademie der Wissenschaften, Rechenzentrum, Novosibirsk, Rußland, 1. – 15. November.

M. ŠILHAVÝ, Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik, Mathematisches Institut, Prag, Tschechische Republik, 11. Januar – 8. Februar.

N. SIMONOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Angewandte Mathematik und Geophysik, Novosibirsk, Rußland, 28. März – 11. April und 4. – 19. Juni.

V. SOBOLEV, Staatliche Universität Samara, Abteilung Differentialgleichungen und Steuerungstheorie, Samara, Rußland, 11. Januar – 7. Februar.

J. SOKOŁOWSKI, Université de Nancy I, Laboratoire de Mathématiques, Institut Elie Cartan, Vandœuvre-les-Nancy, Frankreich, 17. – 27. August und 1. – 30. September.

V. STRYGIN, Staatliche Universität Voronesh, Fachbereich Angewandte Mathematik, Voronesh, Rußland, 26. Oktober – 13. November.

CH. STUART, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Département de Mathématiques, Lausanne, Schweiz, 10. – 17. Mai.

M. TALAGRAND, Universität Paris VI, Frankreich, 28. August – 1. September.

D. TIBA, Rumänische Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, Bukarest, Rumänien, 25. April – 25. Mai.

E. S. TITI, University of California, Department of Mathematics and Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Irvine, USA, 15. – 20. Juli.

A. TOSELLI, New York University, Courant Institute of Mathematical Science, USA, 29. September – 3. Oktober.

V. A. VATUTIN, Steklov-Institut für Mathematik, Moskau, Rußland, 25. Oktober – 28. November.

A. VERETENNIKOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau, Rußland, 8. Oktober – 7. November.

M. I. VISHIK, Staatliche Universität Moskau, Fakultät für Mathematik und Mechanik, Moskau, Rußland, 18. – 30. August und 5. – 10. September.

A. VISINTIN, Università degli Studi di Trento, Dipartimento di Matematica, Trento, Italien, 23. – 28. Juni.

A. VOITISHEK, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, Novosibirsk, Rußland, 28. Januar – 2. Februar.

J. WELLNER, University of Washington, Department of Statistics, Washington, USA, 24. – 30. August.

M. YAMAMOTO, Universität Tokio, Institut für Mathematik, Tokio, Japan, 10. September – 10. Oktober.

M. ZAHRADNÍK, Karls-Universität Prag, Fakultät für Mathematik und Physik, Prag, Tschechische Republik, 6. Oktober – 15. November.

S. V. ZELICK, Staatliche Universität Moskau, Fachbereich Mathematik und Mechanik, Moskau, Rußland, 30. August – 13. September.

Stipendiaten

R. KOLTSCHINSKI, Wayne State University, Department of Mathematics, Detroit, USA, 23. August – 5. September (Alexander von Humboldt-Stipendium).

M. TRETYAKOV, Ural State University, Department of Mathematics, Ekaterinburg, Rußland, 1. Januar – 30. Juni (Alexander von Humboldt-Stipendium).

Am WIAS betreute Doktoranden und Postdoktoranden

J. ENGLÄNDER, Postdoktorand, HCM-Programm „Stochastic Analysis“, Humboldt-Universität zu Berlin, 1. September – 31. Dezember.

O. HRYNIV, Postdoktorand, Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Technische Universität Berlin, 1. Januar – 31. Dezember.

M. JÄHNISCH, Doktorand, Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Technische Universität Berlin, 1. Januar – 31. Dezember.

P. MÖRTERS, Postdoktorand, Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Technische Universität Berlin, 1. Oktober – 31. Dezember.

B. NIEDERHAUSER, Doktorand, Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Technische Universität Berlin, 1. Oktober – 31. Dezember.

6.9 Gastvorträge

H. B. ABEL, Robert-Bosch GmbH, Reutlingen, *Computergestützte Netzwerkanalyse auf der Grundlage analoger Hardwarebeschreibungssprachen – Entwicklungstendenzen und Implementierungsfragen*, 26. Oktober.

K. ALEXANDER, University of Southern California, Los Angeles, USA, *The Potts lattice gas with small interaction and other applications of the asymmetric random cluster model*, 22. Juli.

J. ANDERS, BMW-RollsRoyce GmbH, Dahlewitz, O. SCHMIDTMANN, WIAS, Berlin, *Stabilitätsuntersuchungen in mehrstufigen Verdichtern*, 6. April.

V. ANH, Queensland University of Technology, Brisbane, Australien, *Fractional random fields and applications*, 26. Januar.

V. ARNĂUTU, University Al. J. Cuza, Iaşi, Rumänien, *Discretization estimates for an elliptic control problem*, 27. Mai.

E. AVRUTIN, Universität Glasgow, Großbritannien, *Locking properties of semiconductor lasers*, 22. Januar.

O. BARNDORFF-NIELSEN, Aarhus University, Dänemark, *Some aspects of long range dependence, self-similarity and scaling*, 14. Januar.

K. U. BARTHEL, LuRaTech GmbH, Berlin, *Waveletbasierte Bilddatenkompression – Anforderungen der Praxis und deren algorithmische Umsetzung*, 14. Dezember.

P. BASTIAN, Universität Stuttgart, *Voll gekoppelte Lösungsverfahren für die Mehrphasenströmung in porösen Medien*, 27. November.

N. BERGLUND, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Schweiz, *Adiabatic dynamical systems: Singular perturbations, hysteresis and scaling laws*, 15. Mai.

J. BERTOIN, Université Paris VI, Frankreich, *Structure of shocks in Burgers turbulence with stable noise initial data*, 11. November.

A. BERTRAM, Technische Universität Magdeburg, *Thermoplastizität*, 13. Mai.

O. BIRÓ, Technische Universität Graz, Österreich, *Edge finite elements in solving eddy current problems*, 2. Oktober.

P. A. BLIMAN, INRIA Rocquencourt, Frankreich, *Nonlinear oscillations in systems with delay*, 2. Oktober.

H. C. BOHLMANN, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, *Widerstandsschweißen – Anwendung und Simulation am Beispiel des Punkt- und Kondensator-Impulsschweißens*, 23. November.

F. BORNEMANN, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, *Weak convergence methods and adiabaticity in quantum dynamics*, 6. Januar.

T. BOROWSKI, Technische Universität Berlin, *Wärmeleitung in einem rotierenden Zylinder*, 24. Juni.

D. BOSQ, Université Pierre et Marie Curie, Paris, Frankreich, *Autoregressive processes in Banach spaces: Application to statistics of continuous time processes,* 18. Februar.

A. BOSSAVIT, Electricité de France, Clamart, Frankreich, *On the 'Lorenz gauge"*, 1. Oktober.

M. BROKATE, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, *Directional derivative of the stop operator*, 11. März.

M. BÜGER, Universität Göttingen, *Periodische Lösungen von Reaktions-Diffusions-Gleichungen*, 16. Juli.

R. BÜRGER, Universität Stuttgart, *Analysis of the mathematical model and simulation of sedimentation*, 3. Dezember.

C. BUTUCEA, SFB 273, Humboldt-Universität zu Berlin, *Adaptive pointwise density estimation,* 4. November.

P. ČAPEK, Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik, Prag, Tschechische Republik *The Stefan-Maxwell approach to mass transport of gases in porous solids*, 26. November.

S. CHELKAK, Universität St. Petersburg, Rußland, *Numerical solution of the Navier-Stokes system in cylindrical domains*, 28. Januar.

J. CHENG, z. Zt. Universität Tokio, Japan, *Determination of convection coefficients in an elliptic equation from boundary measurements*, 3. Dezember.

I. CHUESHOV, Universität Kharkov, Ukraine, *Theory of determining functionals for infinite-dimensional dynamical systems*, 30. Juni.

M. CLEMENS, Technische Universität Darmstadt, *Numerical calculation of slowly varying electromagnetic fields using the finite integration technique*, 1. Oktober.

P. COLLI, Università di Pavia, Italien, *On some doubly nonlinear evolution equations with memory*, 18. November.

M. CRANSTON, University of Rochester, USA, *On applications of coupling*, 3. Juni.

H. CRAUEL, Technische Universität Berlin, *Zufällige dynamische Systeme*, 13. Mai.

M. DELGADO, Universidad Carlos III., Madrid, Spanien, *Consistence specification testing of nonlinear in variables economic models,* 11. Februar.

H. DETTE, Ruhr-Universität Bochum, *Optimale Versuchspläne und Extremalprobleme für Polynome,* 21. Januar.

CH. DIACK, Universität Toulouse, Frankreich, *A nonparametric test of convexity of regression,* 13. Mai.

P. DUARTE, Technische Universität Lissabon, Portugal, *Persistent homoclinic tangencies and elliptic islands in conservative systems*, 21. Dezember.

M. EHRHARDT, Technische Universität Berlin, *Discrete transparent boundary conditions for general Schrödinger-type equations*, 30. September.

D. ELWORTHY, University of Warwick, Großbritannien, *The supression and use of redundant noise in S.D.E.*, 16. Dezember.

J. ENGLÄNDER, z. Zt. WIAS, Berlin, *The future of stochastic analysis*, Royal Institute of Technology, Stockholm, Schweden, 7. Oktober.

——, *Support behaviour for a class of measure-valued diffusions – Applications to super-Brownian motions*, Berliner Kolloquium Wahrscheinlichkeitstheorie, 28. Oktober.

——, *Support properties for a class of measure-valued diffusions*, ETH Zürich, Schweiz, 10. Dezember.

S. M. ERMAKOV, Universität St. Petersburg, Rußland, *A difficult method for solving a simple equation*, 18. November.

A. M. ETHERIDGE, Universität Oxford, Großbritannien, *A probabilistic approach to some explosive semilinear heat equations*, 15. April.

C. FACIU, Rumänische Akademie, Institut für Mathematik, Bukarest, Rumänien, *A non-local viscoplastic approach compatible with the Clausius-Duhem inequality (Applications to Portevin-Le Chatelier effect)*, 13. März.

A. DE FALGUEROLLES, Universität Toulouse, Frankreich, *Generalized bilinear models with special attention to square tables,* 24. Juni.

E. FEIREISL, Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik, Prag, Tschechische Republik, *Long-time behaviour of evolution equations in unbounded domains*, 1. Dezember.

——, *On the qualitative properties of solutions to the Navier-Stokes equations of compressible flow*, 2. Dezember.

A. FÖRSTER, Humboldt-Universität zu Berlin, *Kinetik der Ionisation in dichten Plasmen*, 9. Juli.

H. FREISTÜHLER, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, *Existenz und Stabilität von Viskositätsprofilen nichtklassischer Schockwellen am Beispiel der Magnetohydrodynamik*, 5. Mai.

N. GANTERT, Technische Universität Berlin, *Tail estimates for random walk in random environment*, 7. Januar.

B. GASCHLER-MARKEFSKI, Institut für Neurobiologie, Magdeburg, *Funktionell bildgebende Verfahren in der Neurobiologie: Anforderungen an die Statistik*, 20. April.

V. GELFREICH, Freie Universität Berlin, *Splitting of separatrices under fast quasi-periodic perturbations*, 21. April.

——, *Splitting of a separatrix loop near a saddle-center bifurcation in area-preserving maps*, 21. Dezember.

G. GILARDI, Università di Pavia, Italien, *A generalized Stefan problem with memory*, 24. Juni.

L. GIRAITIS, School of Economics, London, Großbritannien, *Stationary ARCH type models with moderate and long memory dependence structure,* 9. Dezember.

F. GODTLIEBSEN, University of Tromsø, Norwegen, *Statistical methods applied in medical imaging*, 9. März.

V. GOLDSHTEIN, Ben Gurion University, Israel, *Thermal runaway in multiphase media*, 3. Februar.

S. GONCHENKO, Institut für Angewandte Mathematik und Kybernetik, Nizhny Novgorod, Rußland, *Bifurcations of homoclinic tangencies in four-dimensional symplectic maps*, 21. Dezember.

CH. GOURIEROUX, CREST, Frankreich, *Truncated maximum likelihood, goodness of fit tests and tail analysis,* 15. April.

M. GÜNTHER, Technische Universität Darmstadt, *Differential-algebraic equations in electric circuit simulation*, 1. Oktober.

F. GUIAS, Universität Heidelberg, *Stochastic and deterministic models for coagulation-fragmentation processes*, 9. Dezember.

A. GUSHCHIN, Steklov-Institut für Mathematik, Moskau, Rußland, *Exponential families as limit statistical models,* 19. November.

C. HÄCKER, W. Dyckerhoff Institut für Baustofftechnologie, Wiesbaden, *Vorausberechnung der Normdruckfestigkeit von Portlandzement*, 23. Februar.

W. HÄRDLE, SFB 273, Humboldt-Universität zu Berlin, *Web based statistics teaching,* 2. Dezember.

K. HAMEYER, Katholieke Universiteit Leuven, Belgien, *Computation of quasi-static electromagnetic fields*, 2. Oktober.

M. HARAGUS, Universität Stuttgart, *Stabilität nichtlinearer Wellen und invariante Mengen im Phasenraum*, 20. Januar.

W. HEINRICH, Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik Berlin, *The finite-difference method in frequency domain – An indispensable tool for the electromagnetic analysis of microwave integrated circuits and multi-chip modules*, 1. Oktober.

F. HENGERER, SKF GmbH, Schweinfurt, *Beurteilung der Werkstoffermüdung mittels Röntgenfeinstrukturuntersuchungen am Beispiel von Wälzlagern*, 18. Mai.

N. HERBOTH, Technische Universität Berlin, *Photosynthese von Wasserpflanzen – Thermodynamische Untersuchung*, 21. Januar.

CH. HESSE, Universität Stuttgart, *Measure-valued stochastic processes for modelling particle sedimentation in fluids*, 4. Dezember.

R. HIPTMAIR, Universität Augsburg, *Multigrid method for eddy current problems*, 2. Oktober.

R. H. W. HOPPE, Universität Augsburg, *Numerical solution for interior and exterior domain problems in electromagnetic field computation*, 2. Oktober.

W. HORN, California State University, Northridge, USA, *Modelling of an elementary adaptive structure*, 23. Juni.

G. C. HSIAO, University of Delaware, USA, *Variational methods for boundary integral equations and their applications to the fluid-solid interaction problem*, 6. August.

——, *Mathematical foundations for the boundary-field methods in acoustic and electromagnetic scattering*, 28. August.

K. HUTTER, Technische Universität Darmstadt, *Globale Eisschubdynamik, ihre kontinuumsmechanische Modellierung und rechnerische Behandlung im Lichte von Global Change*, 20. März.

A. ILCHMANN, University of Exeter, Großbritannien, *Behavioural approach for timevariant systems*, 19. November.

——, *Modellierung und adaptive Regelung*, 20. November.

V. JOHN, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, *Eine numerische Studie über a posteriori Fehlerschätzer für Konvektions-Diffusions-Gleichungen*, 10. Dezember.

O. JOHNSON, University of Cambridge, Großbritannien, *Topics in entropy and limit theorems*, 18. November.

W. KELLER, Universität Stuttgart, *CHAMP und GRACE – die Herausforderung zweier deutscher Kleinsatellitenmissionen*, 23. März.

B. N. KHOROMSKIJ, z. Zt. Universität Stuttgart, *Sparse approximation to the elliptic Poincaré-Steklov operators for the Stokes and Lamé equations*, 16. Februar.

H. KIELHÖFER, Universität Augsburg, *Nichtlineare stehende und rotierende Wellen auf der Sphäre*, 5. Juni.

CH. KLINGENBERG, Universität Würzburg, *Two-phase flows through porous media*, 4. Dezember.

F. H. KOENEMANN, Aachen, *Ein neuer Ansatz zur Spannungstheorie*, 19. Februar.

N. KOKSCH, Technische Universität Dresden, *Fast-scharfe Gap conditions für die Existenz glatter inertialer Mannigfaltigkeiten*, 2. Juni.

A. I. KOSHELEV, State Maritime Academy, St. Petersburg, Rußland, *Some estimates for multidimensional singular operators*, 12. Januar.

——, *Regular solutions of the Stokes system*, 26. Januar.

A. KOST, Brandenburgische Technische Universität Cottbus, *Electromagnetic field computation for linear and nonlinear shielding by thin magnetic layers in EMC*, 1. Oktober.

S. KOSTADINOV, Universität Plovdiv, Bulgarien, *L_p-Äquivalenz zwischen partiellen Impulsdifferentialgleichungen*, 17. Dezember.

M. A. KOURITZIN, University of Alberta, Edmonton, Kanada, *Introduction to infinite dimensional exact filters*, 24. Juni.

M. KŘÍŽEK, Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik, Prag, Tschechische Republik, *Finite element approximation of nonlinear temperature and magnetic fields in electrical devices*, 2. Oktober.

A. KRÖNER, Linde AG, Höllriegelskreuth, München, *Modellierung und Simulation dynamischer Vorgänge in der Verfahrenstechnik*, 12. März.

M. KUČERA, Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik, Prag, Tschechische Republik, *Bifurcation of periodic solutions to evolution-variational inequalities*, 11. Dezember.

T. KÜPPER, Universität Köln, *Solitäre Wellen in der nichtlinearen Optik*, 13. Oktober.

A. KUFNER, Akademie der Wissenschaft der Tschechischen Republik, Prag, Tschechische Republik, *Nichtlineare ausgeartete elliptische Randwertaufgaben und gewichtete Sobolev-Räume*, 18. November.

M. KUHN, Johannes Kepler Universität Linz, Österreich, *Concepts for the formulation of 3d magnetic field problems*, 2. Oktober.

K. KUHNEN, Universität des Saarlandes, Saarbrücken, *Anwendung von Kriech- und Hystereseoperatoren zur inversen Steuerung piezoelektrischer Aktoren in Echtzeit*, 7. Oktober.

O. KURBANMURADOV, Turkmenische Akademie der Wissenschaften, Aschchabad, Turkmenistan, *Existence of sample solutions and their statistic characteristics to random OEDs*, 15. April.

G. LAST, Technische Universität Braunschweig, *Einige Eigenschaften von Kontaktverteilungen in der stochastischen Geometrie*, 20. Mai.

PH. LAURENÇOT, Université de Nancy I, Vandœuvre-les-Nancy, Frankreich, *Coagulation-fragmentation models*, 18. März.

——, *Long-time behaviour for degenerate convection-diffusion equations in R^N*, 20. Mai.

R. B. LEHOUCQ, Sandia National Laboratories, New Mexico, USA, *The numerical solution of the large scale eigenvalue problem with orthogonal projection methods*, 18. Juni.

——, *Linear stability analysis with P_ARPACK for fluid flow modeled by MPSalsa*, 19. Juni.

L. LERMAN, Institut für Angewandte Mathematik und Kybernetik, Nizhny Novgorod, Rußland, *Hyperbolic and elliptic behavior near a homoclinic orbit to a multidimensional center-saddle and center-saddle-focus*, 21. Dezember.

H. LIANG, SFB 273, Humboldt-Universität zu Berlin, *Asymptotics in partially linear models,* 29. April.

R. LIPTSER, Tel Aviv University, Israel, *Moderate deviations for integral functionals,* 22. Oktober.

S. LUDING, Universität Stuttgart, *Numerical simulation for granular materials*, 4. Dezember.

G. LUNTER, Universität Groningen, Niederlande, *Computing versal deformations of Hamiltonian systems using Groebner bases*, 7. Juli.

R. MÄRZ, Siemens AG, München, *Design and modeling for integrated optics*, 30. September.

ST. MARRON, University of North Carolina at Chapel Hill, USA, *When is a feature really there? The SIZer approach,* 10. Juni.

V. G. MAZ'YA, Universität Linköping, Schweden, *On the positivity of the Schrödinger operator and its zeros*, 10. Februar.

R. MENNICKEN, Universität Regensburg, *Systeme von Differentialoperatoren gemischter Ordnung und Anwendung*, 29. Januar.

A. MIELKE, Universität Hannover, *Kaskaden von Multipulslösungen in der dreidimensionalen Navier-Stokes-Gleichung*, 30. Juni.

P. MÖRTERS, z. Zt. WIAS, Berlin, *Statistische Selbstähnlichkeit und Tangentialmaßverteilungen*, Berliner Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Berlin, 26. Oktober.

K.-D. MOHL, Universität Stuttgart, *DIVA – Ein Werkzeug zur Simulation, Analyse und Optimierung verfahrenstechnischer Anlagen*, 19. März.

ST. MOLCHANOV, University of North Carolina at Charlotte, USA, *Localization and delocalization for quasi one-dimensional random Hamiltonians*, 5. August.

V. MONIKOTI, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung Berlin, *Schallstreuung in heterogenen Materialien*, 2. Dezember.

C. MUELLER, University of Rochester, USA, *The critical exponent for blow-up of an SPDE*, 15. Juli.

W. MÜLLER, Universität-Gesamthochschule Paderborn, *Komplexe Funktionentheorie zur Bereitstellung neuer Testverfahren in der Bruchmechanik*, 16. Februar.

S. A. NAZAROV, State Maritime Academy, St. Petersburg, Rußland, *Trapped modes and Wood's anomalies for scattering on rigid periodic surfaces*, 12. November.

N. NEFEDOV, Staatliche Universität Moskau, Rußland, *Singularly perturbed problems in case of exchange of stabilities*, 19. Mai.

H. NEIDHARDT, Universität Potsdam, *Bemerkungen zu einem dissipativen Schrödinger-Poisson-System, Teil I*, 9. Dezember.

——, *Bemerkungen zu einem dissipativen Schrödinger-Poisson-System, Teil II*, 16. Dezember.

B. NESTLER, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, *Modellierung von mehrphasiger Erstarrung und Kornwachstum mit einem neuen Phasenfeldkonzept*, 7. Dezember.

B. NIEDERHAUSER, z. Zt. WIAS, Berlin, *Hopfield-Modelle*, Berliner Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Berlin, 21. Januar.

——, *Zufällige Symmetrieberechnung in einer Variante des Hopfield- Modells*, Berichtskolloquium im Rahmen des Berliner Graduiertenkollegs „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Berlin, 25. Juni.

——, *Das p-spin Sherrington-Kirckpatrick-Modell*, Berliner Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Berlin, 15. Juli.

Y. NISHIURA, Hokkaido University, Sapporo, Japan, *A skeleton dynamics of self replicating patterns*, 16. Juni.

——, *A skeleton dynamics of reaction-diffusion systems*, 17. Juni.

P. NÜESCH, Ecole Polytechnique Fédérale, Lousanne, Frankreich, *Singular Value Decomposition und Multivariate Statistic – Rückblick und Ausblick,* 20. Mai.

N. PAPENFUSS, Technische Universität Berlin, *Modelle für Formgedächtnislegierungen*, 4. Februar.

——, *Dynamische Eigenschaften von Formgedächtnislegierungen*, 16. Dezember.

S. V. PEREVERZEV, Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Kiew, Ukraine, *Error estimates for band-limited spherical regularization wavelets in some inverse problems of satellite geodesy*, 28. September.

K. PFLÜGER, Freie Universität Berlin, *Travelling-Wave-Lösungen der verallgemeinerten Kadomtsev-Petviashvili-Gleichung*, 20. Oktober.

M. PIERRE, Ecole Normale Supérieure de Cachan, Antenne de Bretagne, Rennes, Frankreich, *Global existence for reaction-diffusion systems with control of mass*, 6. Mai.

I. PIGEOT, Ludwig-Maximilians-Universität München, *Grafische Modelle – Einführung und Ausblick,* 4. Februar.

A. PIKOVSKY, Universität Potsdam, *Strange nonchaotic attractors*, 26. Mai.

J. PÖSCHEL, Universität Stuttgart, *Gestörte KdV-Gleichungen, Birkhoff Normalform und KAM Theorie*, 27. Januar.

Z. PRÁSKOVÁ, Karls-Universität Prag, Tschechische Republik, *Consistency and efficiency of bootstrap procedures in time series models,* 7. Januar.

V. S. RABINOVICH, Universität Rostov, Rußland, *Mellin pseudodifferential operator approach to singular integral operators on Carleson curves*, 9. Februar.

Y. RADVOGIN, Keldysh-Institut für Angewandte Mathematik, Moskau, Rußland, *Minimal stencil based schemes for solving multidimensional time-dependent Euler equations*, 2. April.

S. REICH, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, *Highly oscillatory mechanical systems and normal form theory*, 13. Januar.

D. REITEBUCH, Technische Universität Berlin, *Scherströmungen in der Erweiterten Thermodynamik*, 29. April.

R. T. ROCKAFELLAR, University of Washington, Seattle, USA, *Subgradients of cost-to-go functions in optimal control*, 29. Januar.

M. RÖCKNER, Universität Bielefeld, *Invariant measures and semigroups in* L^1, 9. Dezember.

R. C. ROGERS, Virginia Tech, Blacksburg, USA, *Identifying and compensating for hysteresis*, 8. Juli.

S. ROHDE, Technische Universität Berlin, *Geometrie und Dimension von Julia-Mengen*, 9. Juni.

B. ROYNETTE, Universität Nancy, Frankreich, *Functionals of the local time of Bessel processes*, 18. Februar.

T. RUGGERI, Universität Bologna, Fachbereich für Angewandte Mathematik, Italien, *On the shock structure problem for hyperbolic systems of balance laws and convex entropy*, 23. Januar.

R. SCHATZ, KTH Stockholm, Schweden, *Tunable and high-speed semiconductor lasers*, 5. Februar.

A. SCHEEL, Freie Universität Berlin, *Dynamik von Pulsen, Fronten und Turingpatterns*, 27. Oktober.

O. SCHENK, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Schweiz, *Effiziente, parallele Algorithmen zur direkten Lösung großer dünnbesetzter Gleichungssysteme auf SMP-Architekturen*, 25. Juni.

F. SCHMIDT, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, *Transparent boundary conditions for the numerical solution of scattering problems in integrated optics*, 30. September.

P. SCHMIDT, Bankgesellschaft Berlin, Forschungsabteilung, *Ein Konzept zur dynamischen Portfolio-Optimierung,* 16. Juni.

TH. SCHNELLE, Humboldt-Universität zu Berlin, *High frequency electric fields in microstructures – Simulation and biological applications*, 1. Oktober.

D. SCHÖN, Robert-Koch-Institut, Berlin, *Regionale Unterschiede in der Krebsinzidenz und Erklärungsansätze*, 4. Mai.

L. SCHULTZ, Institut für Festkörper- und Werkstofforschung Dresden, *Hochtemperatursupraleiter – von der Physik zu neuen Werkstoffen*, 22. Juni.

V. SCHULZ, Universität Heidelberg, *Optimierung diskretisierter Modelle*, 10. November.

G. SEBASTIANI, Consiglio Nazionale delle Richerche, Rom, Italien, *Over-relaxation methods and coupled Metropolis-Hastings Markov chains for Monte Carlo simulation,* 11. November.

A. SEIDEL-MORGENSTERN, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, *Prozesse und Modelle in der Chemischen Verfahrenstechnik*, 11. Juni.

K. SIEBERT, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, *Adaptive Finite-Elemente-Methoden für Phasenübergänge mit Strömung*, 15. Dezember.

M. ŠILHAVÝ, Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik, Prag, Tschechische Republik, *Convexity conditions for orthogonally invariant stored energies*, 2. Februar.

N. SIMONOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Novosibirsk, Rußland, *Random walk methods for solving parabolic equations*, 1. April.

D. N. E. SKOOGH, Chalmers University of Technology, Göteborg, Schweden, *Model reduction by the rational Krylov method*, 1. Oktober.

TH. SLAWIG, Technische Universität Berlin, *Gebietsoptimierung für Navier-Stokes Gleichungen*, 27. Mai.

——, *Gebietsoptimierung – Theorie und Anwendung*, 20. November.

V. SOBOLEV, Staatliche Universität Samara, Rußland, *Black swans and canards*, 3. Februar.

G. STARKE, Universität-Gesamthochschule Essen, *Finite-Element-Ausgleichsprobleme zur numerischen Berechnung von Wassertransportvorgängen*, 29. Januar.

F. STENGER, University of Utah, USA, *A unified approach to the approximate solution of PDE*, 10. Dezember.

D. W. STROOCK, MIT, Cambridge, USA, *Approximation of symmetric diffusions by Markov chains*, 1. April.

V. STRYGIN, Universität Voronesh, Rußland, *Singularly perturbed vibrational systems*, 5. November.

CH. STUART, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Schweiz, *Nonlinear eigenvalue problems arising in optics*, 13. Mai.

M. SUGIYAMA, Universität Nagoya, Japan, *Acceleration waves in solids*, 1. Juli.

J. SYMANZIK, George Mason University, Fairfax (Virginia), USA, *Current internet technology and statistics – Blessing or curse?,* 16. Dezember.

A.-S. SZNITMAN, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, *Clustering process and abstract cavity method*, 21. Januar.

——, *Clustering process and abstract cavity method: Part 2*, 22. Januar.

G. TEYSSIERE, University of London, Großbritannien, *Long memory volatility models,* 22. April.

——, SFB 273, Humboldt-Universität zu Berlin, *Microeconomic long-memory models,* 28. Oktober.

L. THIBAULT, Université de Montpellier II, Frankreich, *On convex composite functions*, 29. Januar.

D. TIBA, Rumänische Akademie der Wissenschaften, Bukarest, Rumänien, *Generalized bang-bang properties in the optimization of plates*, 13. Mai.

E. S. TITI, University of California, Irvine, USA, *On the question of global regularity for three-dimensional flows*, 16. Juli.

——, *Postprocessing the Galerkin method: A novel approach to approximate inertial manifolds*, 17. Juli.

A. TOSELLI, New York University, USA, *Schwarz methods for Maxwell's equations in conductive media*, 2. Oktober.

G. TRENKLER, Universität Dortmund, *Starke und schwache Kovarianz-Adjustierung,* 8. Juli.

M. TRETYAKOV, z. Zt. WIAS, Berlin, *Numerical solution of nonlinear parabolic equations with small parameter*, 13. Mai.

S. VERDUYN-LUNEL, Freie Universität Amsterdam, Niederlande, *Effects of small time delays on the dynamics of evolutionary systems*, 23. Juni.

A. VANDERBAUWHEDE, Universität Gent, Belgien, *An example of symmetry reduction in Hamiltonian systems*, 23. Juni.

V. A.VATUTIN, Steklov-Institut für Mathematik, Moskau, Rußland, *Spatial branching populations with long individual lifetimes*, 4. November.

M. I. VISHIK, Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau, Rußland, *Trajectory attractors for partial differential equations*, 7. September.

A. VOITISHEK, Russische Akademie der Wissenschaften, Novosibirsk, Rußland, *Optimization of discrete-continuous stochastic algorithms*, 29. Januar.

G. K. M. WACHUTKA, Technische Universität München, *Numerical analysis of distributed inductive parasitics in high power bus bars*, 1. Oktober.

TH. WEILAND, Technische Universität Darmstadt, *Maxwell's grid equations as basis for EMC computations in time and frequency domain*, 1. Oktober.

C. M WEINERT, Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin, *Numerical simulation of optical transmitters and optoelectronic transponders in optical networks*, 30. September.

H. v. WEIZSÄCKER, Universität Kaiserslautern, *Transformationen unendlich-dimensionaler Verteilungen*, 29. Januar.

H.-O. WALTHER, Universität Giessen, *Die Singularitäten des Attraktors einer Nervengleichung*, 15. Dezember.

M. WEBER, Technische Universität Dresden, *Random perturbations of nonlinear oscillators*, 4. Februar.

W. WEISS, Technische Universität Berlin, *Erweiterte Thermodynamik und Turbulenz*, 10. Juni.

W. L. WENDLAND, Universität Stuttgart, *Phenomenological formulation of the mathematical model of sedimentation of suspension*, 3. Dezember.

M. YAMAMOTO, Universität Tokio, Japan, *Stability in an inverse parabolic problem*, 21. September.

——, *Unique continuation on the line and inverse corrosion problems*, 29. September.

L. YANG, Michigan State University, USA, *Multivariate bandwidth selection for local linear regression,* 1. Juli.

S. ZELICK, Staatliche Universität Moskau, Rußland, *Nonlinear elliptic systems in unbounded domains and their attractors*, 10. September.

6.10 Mitveranstaltung auswärtiger Tagungen

H. GAJEWSKI, Mitglied des Organisationskomitees, *Workshop „Scientific Computing in Electrical Engineering“*, Berlin, 30. September – 2. Oktober.

M. NUSSBAUM, Organisator einer Sektion, *„Stochastik–Tage 1998“*, München, 24. – 27. März.

——, Mitglied des Local Scientific Committee, *International Congress of Mathematicians*, Berlin, 18. – 27. August.

S. PRÖSSDORF†, Mitglied des Organisationskommitees, *Konferenz „Functional Analysis, Partial Differential Equations, and Applications“*, Rostock, 31. August – 4. September.

K. SABELFELD, Organisator einer Sektion, *Symposium „Ramefied Gas Dynamics“*, Marseille, Frankreich, 26. – 31. Juli.

J. SPREKELS, Mitglied des Organisationskomitees, *International Congress of Mathematicians*, Berlin, 18. – 27. August.

K. WILMAŃSKI, *CISM Course „Kinetic and Continuum Thermodynamical Approaches to Granular and Porous Media“*, International Centre for Mechanical Sciences (CISM), Udine, Italien, 13. – 17. Juli.

6.11 Produkte

`Tosca98`®

`Tosca98`® (two dimensional semi-conductor analysis package) ist ein Programmsystem zur numerischen Simulation von Ladungstransportvorgängen in Halbleiterstrukturen. Es basiert auf dem Drift-Diffusionsmodell und berücksichtigt eine Vielzahl zusätzlicher physikalischer Effekte, wie magnetische Felder, optische Strahlung, Temperatureinflüsse und die Kinetik tiefer Störstellen. Seine Leistungsfähigkeit beruht auf dem analytischen Studium des stark nichtlinearen Systems partieller Differentialgleichungen (van Roosbroeck), das die Elektronen- und Löcherströme beschreibt.
In `Tosca98`® sind sowohl für den stationären als auch den zeitabhängigen Fall sehr effiziente numerische Verfahren implementiert. Die Finite-Elemente-Methode gestattet, weitgehend beliebige räumlich zweidimensionale Strukturen zu behandeln.
`Tosca98`® wird erfolgreich in der halbleiterphysikalischen Forschung und in der Mikroelektronik bei der Entwicklung von Transistoren, Dioden, Sensoren, Detektoren und Lasern eingesetzt.
Der Bauelementesimulator arbeitet in einer UNIX-Umgebung auf Workstations und ist für verschiedenste Rechnerarchitekturen verfügbar (SUN SPARC, IBM RS 6000, HP 9000/700, DEC Alpha/OSF1, SGI, Linux 486 PC).

ClusCorr – Statistiksoftware zur Clusteranalyse und multivariaten grafischen Darstellung

Die Software ClusCorr kann zur Klassifikation, Clusteranalyse und multivariaten grafischen Darstellung umfangreicher und hochdimensionaler Datenmengen eingesetzt werden. Sie erkennt Strukturen in den Daten. Hierzu werden neue adaptive statistische Techniken sowie aus der Literatur bekannte und in der praktischen Anwendung bewährte Methoden eingesetzt. Mit ClusCorr waren Einnahmen verbunden.

COG

COG ist ein Paket zur Generierung von Geometriebeschreibungen und Gittern. Der Gittergenerator erlaubt die vollautomatische Erzeugung von Delaunay-Gittern in 1D, 2D und 3D. Er erlaubt es, die Gitterdichte lokal und richtungsabhängig zu steuern. COG erlaubt eine einfache Erzeugung und Veränderung auch sehr komplizierter Geometrien.
COG ist eine Neuimplementierung und Weiterentwicklung des Gittergenerators IBG.

DIPOG, Direkte und inverse Probleme bei optischen Gittern

Das System dient zur Simulation und Optimierung von periodischen Beugungsgittern. Beim direkten Problem werden die Beugungseffizienzen von vorgegebenen periodischen diffraktiven Strukturen berechnet. Beim inversen Problem geht es um den optimalen Entwurf von Beugungsgittern, die vorgegebene Funktionen, z. B. Effektivitätsverläufe oder Phasenverschiebungen, realisieren. Dabei wird ein Zielfunktional konstruiert, für das über einer Klasse von zulässigen Gittergeometrien ein Minimum mittels Gradientenabstiegsverfahren gesucht wird. Mit der implementierten Software lassen sich binäre periodische Strukturen in Dünnschichtsystemen bei beliebigen Einfallswinkeln des Lichtstrahls modellieren und optimieren.

gltools

Die modulare, im UNIX/X-Windows-Bereich portable, OpenGL-basierte Online-Graphik-Toolbox *gltools* wurde entwickelt, um dem Numeriker den unproblematischen Zugriff zu moderner Graphikhardware ohne Zwischenschritte zu ermöglichen. Er kann vorbereitete Routinen für die

Visualisierung stückweise linearer Finite-Elemente-Daten in zwei und drei Raumdimensionen benutzen. Diese Routinen sind in der Lage, Funktionengebirge beziehungsweise Isolinien auf Schnittebenen oder aber Isoflächen (im dreidimensionalen Fall) darzustellen. Der Nutzer kann aber auch seine eigenen Visualisierungsideen auf der Basis von OpenGL-Befehlen umsetzen und dabei auf eine Umgebung zurückgreifen, die ihm die Programmierung von Window-System-Anschlüssen, Maus- und Tastaturinteraktionen, Aufzeichnungsmöglichkeiten im ppm- und MPEG-Format und vieles andere mehr abnimmt.

NUMATH

Das Programmpaket NUMATH umfaßt Verfahren der numerischen Mathematik für die Aufgabenklassen Lineare Gleichungssysteme, Lineare Ausgleichsrechnung, Eigenwertaufgaben, Polynom-, Spline- und trigonometrische Interpolation, Numerische Berechnung einfacher und mehrfacher Integrale, Nichtlineare Gleichungen in einer Variablen, Nichtlineare und überbestimmte nichtlineare Gleichungssysteme, Minimierung einer Funktion in einer oder mehreren Variablen, Nichtlineare, quadratische und lineare Optimierung, Gewöhnliche Differentialgleichungen (Anfangs- und Randwertaufgaben), Volterrasche und Fredholmsche Integralgleichungen, Elementare und spezielle Funktionen, Partielle Differentialgleichungen.
Die hierarchische Struktur des in FORTRAN implementierten Programmpaketes besteht aus Solvern, Basismoduln sowie Elementarmoduln und Moduln zur Matrixmanipulation.

pdelib

Pdelib[3] ist eine offene modulare Toolbox für die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen. Mit Hilfe von *pdelib* ist es möglich, komplexe Simulationsumgebungen zu erstellen. Die so entstandenen Modelle lassen sich als selbständige Software benutzen oder können in bestehende Simulationsumgebungen einbezogen werden. Die Offenheit des Systems, welche unter anderem die Integration von Standardsoftware ermöglicht, wird durch einen konsequent schnittstellenorientierten Entwurf mit objektorientierten Eigenschaften erreicht.

[3]http://www.wias-berlin.de/pdelib

6.12 Drittmittelprojekte

Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (BMBF)

- **http://www.wias-berlin.de/WIAS/projects/BMBF/MVPIW**[4]

  „Modellierung und Simulation von hochsperrenden Bauelementen für Schaltkreise der angesteuerten Leistungselektronik“

  „Modellierung und Simulation verspannter Quantenschichten in Halbleiterlasern“

  „Entwicklung von adaptiven Lösungsstrategien und effizienten Auflösungsverfahren für die numerische Simulation unterirdischer Strömungs- und Transportprozesse in räumlich dreidimensionalen Gebieten“

  „Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen“

  „Analytische und numerische Behandlung direkter und inverser Probleme für diffraktive Strukturen“

  „Entwicklung der mathematischen Grundlagen für ein neues Ultraschallpulsmeßverfahren“

  „Optimale Steuerung der Sublimationszüchtung von SiC-Kristallen“

  „3D-Simulation von Halbleiterdetektoren“

  „Modellierung, Analyse und Simulation des Widerstands-Impulsschweißens“

- mit BMW Rolls-Royce GmbH, Dahlewitz: „Theoretische Untersuchungen zum Stabilitätsverhalten“ (HTGT-Turbotech II)

DAAD

- PROCOPE (FG 2)
- Wissenschaftleraustausch mit Schweden
- VIGONI

Deutsche Forschungsgemeinschaft, Bonn

- „Numerische Verfahren für Schrödinger-Poisson-Systeme zur Modellierung von Halbleitern“
- „Adaptive Multiskalenmethoden zur Lösung von Randintegralgleichungen“
- „Analytische Untersuchungen von Elektro-Reaktions-Diffusionsgleichungen mit nichtglatten Daten“
- „Halbleiterbauelemente hoher Leistung“
- Schwerpunktprogramm: „Interagierende stochastische Systeme von hoher Komplexität“

[4] Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft

- Schwerpunktprogramm: „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“
- Schwerpunktprogramm: „Echtzeitoptimierung großer Systeme“
- deutsch-ukrainische Zusammenarbeit: „Quasiperiodische Störungen“
- Kooperationsprojekt zum Thema „Singulär gestörte Systeme und Stabilitätswechsel“ deutscher und russischer Wissenschaftler im Rahmen des Memorandum of Understanding zwischen DFG und RFFI
- Kooperationsprojekt zum Thema „Statistik in Funktionenräumen: asymptotische Theorie“ deutscher und russischer Wissenschaftler im Rahmen des Memorandum of Understanding zwischen DFG und RFFI (Projektkoordination)
- Sonderforschungsbereich 373, Humboldt-Universität zu Berlin, „Quantifikation und Simulation ökonomischer Prozesse“ Sonderforschungsbereich 555, Humboldt-Universität zu Berlin, „Komplexe Nichtlineare Prozesse“
- Graduiertenkolleg Technische Universität Berlin, „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“
- Wissenschaftleraustausch mit der Ukraine
- Wissenschaftleraustausch mit Turkmenistan

Europäische Union

- **(HCM)** „Nonlinear Boundary Value Problems“
- **(HCM)** „Statistics of stochastic processes“
- **(HCM)** „Stochastic Analysis“
- **(INTAS)** „Nonlinear and singular partial differential equations and their applications“
- **(TMR)** „Breakthrough in the control of nonlinear systems“

Alexander von Humboldt-Stiftung

- zwei Stipendiaten

BMW Rolls-Royce GmbH, Dahlewitz

- „Untersuchung lokaler und globaler Strömungsstabilitätsphänomene in Turboverdichtern“

Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik, Berlin

- „Simulation von monolithisch integrierten Mikrowellenschaltungen und Multi-Chip-Moduln"

GeoForschungsZentrum Potsdam

- „Simulation des gekoppelten Fluid- und Energietransports im Untergrund auf der Basis der Methode der finiten Volumina"

Reaction Engineering International, Salt Lake City, USA

- „Test eines reduzierten chemischen Mechanismuses fuer die Verbrennung von Turbinenbrennstoffen unter turbulenten Bedingungen"

6.13 Auszeichnungen

K. GRÖGER erhielt den Berliner Landesorden.

M. NUSSBAUM, Wahl zum Fellow des Institute of Mathematical Statistics, USA.

Index