Weierstraß-Institut
für Angewandte Analysis und Stochastik
(WIAS)

im Forschungsverbund Berlin e. V.

Jahresforschungsbericht 1999

Berlin 2001

ISSN 1437-7489

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

Fax: + 49 30 2044975
E-Mail: preprint@wias-berlin.de
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 1999 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 1999 wiederum erfolgreich. Wesentliche Zielsetzungen des *Forschungsprogramms 1997–1999* konnten abschließend behandelt und zusätzliche in die Forschungsthematik des Instituts aufgenommen werden. Es gelang dem Institut, in Zeiten knapper werdenden Geldes und wachsender Konkurrenz seine Stellung als führende Institution im Bereich der mathematischen Behandlung konkreter Problemstellungen aus komplexen Anwendungsfeldern nicht nur zu halten, sondern weiter auszubauen. 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 einerseits wider in der im Vergleich zum Vorjahr wiederum erheblich gesteigerten Drittmitteleinwerbung, wobei es dem Institut erfreulicherweise gelang, verstärkt Drittmittel aus der Wirtschaft einzuwerben; andererseits war die Anzahl der in referierten Fachzeitschriften erschienenen Publikationen und der eingeladenen Vorträge auf internationalen Tagungen erfreulich. Auch der im Jahre 1998 aufgrund einer Empfehlung des Wissenschaftsrats begonnene Aufbau einer neuen Arbeitsgruppe *Finanzmathematik* verlief im Berichtsjahr ausgesprochen erfolgreich, was sich am zunehmenden Interesse von Banken an Kooperationen mit dieser Gruppe manifestiert.

Besonders augenfällig wird der hohe Stellenwert, den die am WIAS geleistete Arbeit in der Scientific Community hat, im Bereich der Berufungen: Im Berichtsjahr 1999 wurden wiederum zwei Mitarbeiter des Instituts auf Professuren berufen, davon einer auf eine Full Professorship an der renommierten Cornell University; seit der Gründung des Instituts im Jahre 1992 sind damit nunmehr schon 17 Mitarbeiter des Instituts auf Professuren berufen worden (davon acht auf C4-Professuren und fünf 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 mathematischen Institutionen im Raum Berlin wurde weiter vertieft. Ein wichtiger Meilenstein war dabei die Gründung des *Berliner Netzwerks für Anwendungen der Mathematik (BerNAM)* anlässlich des Forschungspolitischen Dialoges *Angewandte Mathematik – die verborgene Schlüsseltechnologie* im April 1999. Dies geschah mit dem Ziel, ein Forum und eine Anlaufstelle zu schaffen, damit Wirtschaft, Politik und Wissenschaft zukünftig die im Raum Berlin gepoolte Kompetenz in Angewandter Mathematik besser wahrnehmen und sich zu Nutze machen.

Besonderes Augenmerk im Rahmen der Zusammenarbeit mit den Berliner Hochschulen galt im Berichtsjahr den Bemühungen, den mit der Freien Universität im vergangenen Jahr abgeschlossenen Kooperationsvertrag zur gemeinsamen Berufung des Leiters der Forschungsgruppe *Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen* auf eine C4-S-Professur an der FU umzusetzen. Inzwischen ist die Ruferteilung erfolgt und es besteht die Hoffnung, dass in diesem Jahr somit ein zentrales strukturelles Problem des WIAS endlich behoben werden kann.

Neben diesen Aktivitäten 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.

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. Zwar wird die Erfüllung dieser Aufgabe angesichts der Mittelknappheit in allen Bereichen immer schwieriger, aber das WIAS hat sich erfolgreich dem wissenschaftlichen Wettbewerb um die Fördermittel gestellt und die erfolgten Kürzungen durch vermehrte Anstrengungen in der Drittmitteleinwerbung weitgehend kompensieren können. Allerdings gibt es hierfür eine Grenze: Eine hinreichende Grundausstattung ist auch für das WIAS unerlässlich, damit das Institut auch weiterhin erfolgreich im wissenschaftlichen Wettbewerb bestehen kann.

Die Herausforderungen des neuen Jahrtausends werden auch für das WIAS erheblich sein. Das Institut hat zu dessen Beginn eine anerkannte Stellung in der Scientific Community und sollte aufgrund seiner wissenschaftlichen Leistungsfähigkeit in der Lage sein, die zukünftigen Probleme bewältigen zu können; das WIAS hat allen Grund, optimistisch in die Zukunft zu blicken.

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 2000
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. G. Dziuk

Alb.-Ludwigs-Univ. Freiburg
Institut für Angewandte
Mathematik
Hermann-Herder-Str. 10

79104 Freiburg

Prof. Dr. H. Föllmer

Humboldt-Univ. zu Berlin
Math.-Naturwiss. Fakultät II
Institut für Mathematik
Rudower Chaussee 25

12489 Berlin

Prof. Dr. D. Kröner

Alb.-Ludwigs-Univ. Freiburg
Institut für Angewandte
Mathematik
Hermann-Herder-Str. 10

79104 Freiburg

Prof. Dr. U. Langer

Johannes Kepler Univ. Linz
Institut für Analysis
und Numerik
Altenberger Str. 69

A–4040 Linz
Österreich

Prof. Dr. M. Niezgódka

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

PL–02-106 Warsaw
Poland

J. Noack

Mitglied des Vorstandes
Berlin-Hannoversche
Hypothekenbank AG
Budapester Str. 1

10787 Berlin

PD Dr. L. Overbeck

Deutsche Bank AG
Group Market Risk
Management
Bockenheimer Landstr. 42

60262 Frankfurt am Main

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

3 Aufgabenstellung und Struktur des WIAS im Berichtsjahr

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 konzentrierten sich im Berichtsjahr 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 erstreckten 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 1999 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

FORSCHUNGS-GRUPPE 1	FORSCHUNGS-GRUPPE 2	FORSCHUNGS-GRUPPE 3	FORSCHUNGS-GRUPPE 4	FORSCHUNGS-GRUPPE 5	FORSCHUNGS-GRUPPE 6	FORSCHUNGS-GRUPPE 7
Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen	*Dynamische Systeme*	*Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen*	*Nichtlineare Optimierung und Inverse Probleme*	*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: Dr. V. Schulz	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 befassten 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 lagen 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

Die Arbeiten dieser Forschungsgruppe befassten sich mit der qualitativen Analyse und numerischen Untersuchung parameterabhängiger dynamischer Systeme sowie ihrer Steuerung, die vorwiegend Prozesse in Mehrsektions-Halbleiterlasern und in der Reaktionskinetik modellieren. Aufgrund der Komplexität der zu untersuchenden Prozesse spielen Fragen der Modellreduktion unter Beibehaltung essentieller Systemeigenschaften eine wesentliche Rolle.
Im Berichtsjahr lagen die Forschungsschwerpunkte der Forschungsgruppe auf den Arbeitsfeldern

- Dynamik von Halbleiterlasern,
- Reaktionskinetik.

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 Implementierung 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 Implementierung 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 im Berichtsjahr von der Forschungsgruppe in eigener Verantwortung bearbeiteten Anwendungsprobleme entstammen den Problemfeldern

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

3.2.4 Forschungsgruppe Nichtlineare Optimierung und Inverse Probleme

Im Berichtsjahr wurde durch die Wiederbesetzung der Leiterstelle der Schwerpunkt von Integralgleichungs- und Randelementmethoden hin zu Problemen der nichtlinearen Optimierung und Inversen Problemen verlagert. Daher spielten beide Bereiche noch eine etwa gleichgewichtige Rolle in den Aktivitäten der Forschungsgruppe. Das zentrale Arbeitsgebiet der Gruppe ist nun die Analyse, Entwicklung, Implementierung und Bereitstellung numerischer Methoden für große Optimierungs- und Inverse Probleme in konkreten Anwendungen. Insbesondere werden Methoden untersucht zur Lösung von Optimierungs- und Inversen Problemen bei diskretisierten Modellen, die von gewöhnlichen und partiellen Differentialgleichungen herrühren.
Die Hauptanwendungsgebiete der FG waren hierbei im Berichtsjahr:

- diffraktive Strukturen in der Optik,
- Prozessoptimierung in der chemischen Verfahrenstechnik.

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 lagen im Berichtsjahr 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 ein weiterer Ausbau 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 wurden fortgeführt. 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 orientierte sich im Berichtsjahr 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. Im Berichtsjahr untersuchte die Forschungsgruppe Phänomene in

- porösen und granularen Stoffen, z. B. Böden,
- modernen Legierungen, z. B. 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 wurden neue Lösungsmethoden für Anfangs- und Randwertprobleme für gewisse Klassen hyperbolischer Systeme etabliert. Außerdem wurde die Molekulardynamik als wichtiges Hilfsmittel verwendet und insbesondere im Hinblick auf eine neue Begründung der Statistischen Mechanik eingesetzt.

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 Modellierung naturwissenschaftlicher und technologischer Prozesse und zur analytischen und numerischen Untersuchung der Modellgleichungen fortgesetzt. Die Schwerpunkte lagen dabei auf den Gebieten:

- Ladungstransportvorgänge in Halbleitern unter Einbeziehung thermoelektrischer, optischer und quantenmechanischer Effekte,
- Reaktions-Diffusionsgleichungen zur Beschreibung des Transports von Fremdatomen in Festkörpern,
- Phasenfeldmodelle zur Beschreibung diffusiver Phasenübergänge,
- Modellierung von Shape-Memory-Phänomenen.

Die Modellierungsarbeiten erfolgten in enger interdisziplinärer Kooperation, vorwiegend mit anderen Forschungseinrichtungen.
Das Spektrum der analytischen Arbeiten reicht von grundlegenden qualitativen Untersuchungen zur Existenz, Einzigkeit, Regularität und dem asymptotischen Verhalten von Lösungen der Gleichungen über die Begründung, Implementierung und praktische Erprobung von Näherungsverfahren bis zur Installierung 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:

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

Ein Höhepunkt im internationalen mathematischen Leben war die EQUADIFF 99 (International Conference on Differential Equations) in Berlin. Die Forschungsgruppe beteiligte sich am wissenschaftlichen Programm und organisierte Minisymposien zu den Themen Hysteresis und Semiconductors.
Im Anschluss werden ausgewählte Projekte der Forschungsgruppe detaillierter vorgestellt.

4.1.2 Projekte

Energiemodelle für Halbleiterstrukturen

Bearbeiter: G. Albinus, H. Gajewski, R. Hünlich, R. Nürnberg, H. Stephan

Kooperation: G. Wachutka (Lehrstuhl für technische Elektrophysik, TU München), R. Sittig (Institut für Elektrophysik, TU Braunschweig), D. Silber (Institut für elektrische Antriebe, Leistungselektronik und Bauelemente, Universität Bremen), E. Schöll (Institut für theoretische Physik, TU Berlin), J. Knopke, R. Rothe (alpha microelectronics gmbh Frankfurt (Oder))

Förderung: DFG-Schwerpunktprogramm „Halbleiterbauelemente hoher Leistung “, BMBF

Für eine realistische mathematische Modellierung von elektronischen Bauelementen hoher Leistung, aber auch anderer Bauelemente, etwa Laserstrukturen, ist die Einbeziehung von Temperatureffekten erforderlich. Während jedoch zur Beschreibung von Reaktions-Diffusions- und Driftvorgängen in Halbleitern bei konstanten Temperaturen gesicherte Modelle existieren, ist die selbstkonsistente Modellierung der Temperaturverteilung bisher nur unzulänglich gelöst. Im Folgenden wird ein thermodynamisch begründetes Energiemodell des Ladungsträgertransports in Halbleitern formuliert. Ausgangspunkt ist ein weithin akzeptierter Ansatz für die freie Energie. Daraus werden unter Nutzung weniger thermodynamischer Grundprinzipien deduktiv Evolutionsgleichungen hergeleitet. Diese Herleitung wird hier exemplarisch für die Boltzmannstatistik und eine parabolische Bandstruktur skizziert. Sie kann auch für die Fermi-Dirac-Statistik, unter Berücksichtigung ionisierbarer Störstellen, für heiße Ladungsträger und bei allgemeinerer Bandstruktur realisiert werden (vgl. [1]).
Der Halbleiter wird als ein System betrachtet, das aus verschiedenen Teilsystemen besteht, dem Gitter, den Elektronen im Leitungsband und den Löchern im Valenzband. Das Gitter wird beschrieben durch eine positive Wärmekapazität c_L pro Volumeneinheit, durch die positive dielektrische Permeabilität ε und durch ein fixiertes Dotierungsprofil d vollständig ionisierter Störstellen. Die Materialgrößen c_L, ε und d sind gegebene Ortsfunktionen. Da in einem Halbleiter Elektronen-Loch-Paare erzeugt werden und rekombinieren, betrachten wir das System in einem Zustand des „partiellen lokalen Gleichgewichts“, das besagt, dass das System zu jeder Zeit t in jedem Punkt x des Halbleiters im Temperaturgleichgewicht ist, dass also der Zustand des Systems durch die Dichten n, p und die Temperatur T beschrieben wird, die im Allgemeinen Funktionen von t und x sind. Da wir nur einen gewissen Arbeitsbereich im Auge haben, ist es auch gerechtfertigt, die Energie des Systems als Summe von innerer Energie und elektrostatischer Energie zu betrachten. Daher kann die Herleitung zunächst ohne Berücksichtigung der elektrostatischen Wechselwirkung durchgeführt werden, indem man von der freien Energie ohne ihren elektrostatischen Anteil ausgeht. Die Dichte dieser „inneren freien Energie“ lautet im betrachteten Fall

$$\begin{aligned} f(n,p,T) \;=\; c_L(T - T\log T) \;&+\; nE_c(T) + nT\left[\log n - 1 - \frac{3}{2}\log T - \log M_c(T)\right] \\ &-\; pE_v(T) + pT\left[\log p - 1 - \frac{3}{2}\log T - \log M_v(T)\right] \;. \end{aligned}$$

Dabei bezeichnen $E_b(T)$ $(b = c, v)$ die Bandkanten des Halbleiters entsprechend der Elektronenaffinität und die $M_b(T)$ sind bis auf einen Faktor die effektiven Massen zu der Potenz $3/2$. Die

Dichte der inneren Energie ist

$$\begin{aligned} u &= u_f(n,p,T) = f(n,p,T) - T\partial_T f(n,p,T) \\ &= c_L T + n\left[E_c(T) - TE_c'(T) + \frac{3}{2}T + TL_c(T)\right] - p\left[E_v(T) - TE_v'(T) + \frac{3}{2}T + TL_v(T)\right] \end{aligned}$$

mit $L_b(T) :\equiv T\left[\log M_b(T)\right]'$, dabei bezeichnet ein Strich die partielle Ableitung nach T. Die Dichte der Entropie lautet

$$s = s_f(n,p,T) = -\partial_T f(n,p,T) = c_L \log T + P_n n + P_p p$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} P_n &= \frac{5}{2} - n\log n + \frac{3}{2}\log T + \log M_c(T) + L_c(T) - E_c'(T)\ , \\ P_p &= \frac{5}{2} - p\log p + \frac{3}{2}\log T + \log M_v(T) + L_v(T) + E_v'(T)\ , \end{aligned}$$

die die Entropie pro Ladungsträger bezeichnen. Durch Anwendung des Entropie-Maximum-Prinzips bestimmen wir das Maximum der Entropie unter den Nebenbedingungen konstanter Energie und konstanter Ladung. Dann erhält man zunächst die Gleichgewichtsbedingungen konstanter Temperatur $T \equiv \theta$ und konstanter koinzidierender „reduzierter Potentiale“

$$\mu = \partial_n \left[\frac{1}{\theta}u_f - s_f\right]_{T=\theta} = -\partial_p \left[\frac{1}{\theta}u_f - s_f\right]_{T=\theta} .$$

Die Konstanten $\lambda \equiv 1/\theta$ und μ sind die Lagrange-Multiplikatoren der beiden Nebenbedingungen. Wenn man die beiden aufgeführten Gleichgewichtsbedingungen nach n und p auflöst, erhält man vertraute Zustandsgleichungen, die im allgemeinen Fall als Definitionsgleichungen der elektrochemischen Potentiale v und w angesehen werden können,

$$n = M_c(T)T^{3/2}\exp\frac{v - E_c(T)}{T} \quad \text{und} \quad p = M_v(T)T^{3/2}\exp\left[-\frac{w - E_v(T)}{T}\right] .$$

Die implizit definierte Funktion

$$\tilde{s}(n,p,u) \equiv s_f\left[n,p,u_f(n,p,T)\right]$$

ist ein thermodynamisches Potential. Die konjugierten Variablen sind

$$\partial_u\tilde{s} = \frac{1}{T}\ ,\partial_n\tilde{s} = -\frac{v}{T} =: -\xi \quad \text{und} \quad \partial_p\tilde{s} = \frac{w}{T} =: \eta\ .$$

Ausgehend von den Gleichgewichtsbedingungen werden thermodynamische Kräfte als Differenzen oder Gradienten der konjugierten Variablen eingeführt. Die thermodynamischen Kräfte verursachen Ströme von Teilchen und Energie, die in diesem allgemeinen Rahmen nur qualitativ beschrieben werden können, weil sie von zusätzlichen Materialeigenschaften (Wärmeleitfähigkeit des Gitters, Mobilitäten der Ladungsträger, Reaktionsraten in den „chemischen Reaktionen“) abhängen, die nicht aus der freien Energie abgeleitet werden können.
Durch Berücksichtigung der elektrostatischen Wechselwirkung ändern sich die funktionalen Abhängigkeiten f, u_f, s_f, ξ und η nicht, nur ist u_f die Dichte der inneren Energie und f

bedeutet entsprechend die Dichte einer „inneren freien Energie“, der also der elektrostatische Anteil fehlt; es ändern sich aber die Zustandsgleichungen für die Ladungsträgerdichten in der Weise, dass die elektrochemischen Potentiale v oder w durch die Summen $v+\Psi$ bzw. $w+\Psi$ ersetzt werden.
Eine Formulierung des Systems der Evolutionsgleichungen lautet

$$\begin{aligned} \dot{n}+\nabla\cdot j_n &= -R\ , \\ \dot{p}+\nabla\cdot j_p &= -R\ , \\ \dot{u}+\nabla\cdot j_u &= [\nabla\cdot(j_p-j_n)]\,\Psi \end{aligned}$$

mit den Dichten

$$\begin{aligned} n &= M_c(T)T^{3/2}\exp\frac{v+\Psi-E_c(T)}{T}\ , \\ p &= M_v(T)T^{3/2}\exp\left[-\frac{w+\Psi-E_v(T)}{T}\right]\ , \\ u &= c_L T+n\left[E_c(T)-TE_c'(T)+\frac{3}{2}T+TL_c(T)\right]-p\left[E_v(T)-TE_v'(T)+\frac{3}{2}T+TL_v(T)\right]\ , \end{aligned}$$

dabei ist das elektrostatische Potential Ψ die Lösung einer Randwertaufgabe für die Poissongleichung

$$-\nabla\cdot(\varepsilon\nabla\Psi)=d+p-n\ .$$

Diese Gleichungen sind zu ergänzen durch die Netto-Reaktionsrate

$$R=r(n,p,T)\exp\left[\frac{1}{T}(E_v(T)-E_c(T))\right]\left[\exp\frac{v-w}{T}-1\right]\ ,$$

deren Struktur sich aus dem Massenwirkungsgesetz ergibt, und die Stromgleichungen

$$\begin{pmatrix} j_n \\ j_p \\ j_u \end{pmatrix}=\mathbf{D}\cdot\begin{pmatrix} -\nabla\xi \\ \nabla\eta \\ \nabla\frac{1}{T} \end{pmatrix}\ .$$

Entlang jeder Lösung des Systems der Evolutionsgleichungen erfüllt die Entropiedichte s die Bilanzgleichung

$$\dot{s}+\nabla\cdot j_s=(\xi-\eta)R+\begin{pmatrix} -\nabla\xi \\ \nabla\eta \\ \nabla\frac{1}{T} \end{pmatrix}\cdot\mathbf{D}\begin{pmatrix} -\nabla\xi \\ \nabla\eta \\ \nabla\frac{1}{T} \end{pmatrix}$$

mit der Entropiestromdichte

$$j_s=-\xi\,j_n+\eta\,j_p+\frac{1}{T}j_u=P_n j_n+P_p j_p+\frac{1}{T}\kappa\nabla\frac{1}{T}\ .$$

Die Forderung, dass die Entropieproduktion, also die rechte Seite der Entropiebilanz, positiv sei, ist erfüllt, wenn der Koeffizient r der Netto-Rekombinationsrate positiv ist und wenn die Koeffizientenmatrix $\mathbf{D}$ positiv definit ist.
Die Energiebilanz kann unter Verwendung der Beziehungen $u=u_f(n,p,T)$ und

$$j_u=(TP_n+v)\,j_n+(TP_p-w)\,j_n+\kappa\nabla(1/T)$$

und unter Verwendung der Kontinuitätsgleichungen als Wärmeleitungsgleichung

$$\begin{aligned}\partial_T u_f \cdot \dot{T} - \nabla \cdot \left(\frac{\kappa}{T^2}\nabla T\right) &= [\nabla \cdot (j_p - j_n)]\,\Psi + \sum_{o=n,p} \partial_o u_f \cdot (R + \nabla \cdot j_o) \\ &\quad - \nabla \cdot [(TP_n + v)\, j_n + (TP_p - w)\, j_p]\end{aligned}$$

geschrieben werden. In dieser Form ist das Modell im Bauelementesimulator `WIAS-TeSCA` implementiert, auch unter Berücksichtigung der Fermi-Dirac-Statistik, der Elektronen-Löcher-Streuung und der Störstellendynamik. Darüber hinaus ist es möglich, das durch Rekombinations- und Resonanzeffekte hervorgerufene optische Feld zu berechnen, was für die Simulation von Laserstrukturen erforderlich ist. Dabei sind für alle Materialparameter (Beweglichkeiten, Rekombinationsraten, Wärmeleitkoeffizient, Wärmekapazität, Bandkanten, Eigenleitungsdichten, Brechungsindex, Absorptionskoeffizienten und optischer Gewinn) explizite Abhängigkeiten von der Temperatur berücksichtigt, die der Benutzer über zugängliche Parameter seinen konkreten Problemen anpassen kann (vgl. [2]).
Das System partieller Differentialgleichungen wird in `WIAS-TeSCA` selbstkonsistent mit der Methode der finiten Elemente auf einem Dreiecksgitter gelöst. Die Diskretisierung der Gleichungen erfolgt in einer Weise, dass sich die Entropie des entstehenden diskreten Gleichungssystems wie im kontinuierlichen Fall entsprechend dem zweiten Hauptsatz verhält.
Mit dieser Version von `WIAS-TeSCA` sind verschiedene Aufgaben für praktisch relevante Halbleiterstrukturen, wie sie bei unseren Kooperationspartnern auftreten, gelöst worden, unter anderem das dynamische Verhalten von Fabry-Perot-Lasern (siehe S. 21) und das Durchbruchverhalten von Leistungstransistoren (siehe S. 24).

Literatur

1. G. Albinus, H. Gajewski, R. Hünlich, *Thermodynamic design of energy models of semiconductor devices*, in Vorbereitung.

2. H. Gajewski et al., *WIAS-TeSCA,* Manual, in Vorbereitung.

Selbstkonsistente Modellierung von Ladungsträgerinjektion, Photonendynamik und Temperaturentwicklung in langwelligen (1.55μm) SMQW-Lasern

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

Kooperation: Bosch Telekom GmbH (Backnang), M. Möhrle (Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin (HHI)), H. Wenzel (Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik Berlin (FBH)), H.-J. Wünsche (HU Berlin, Institut für Physik)

Förderung: BMBF

Dieses Projekt ist mit der Simulation spezieller langwelliger RW-SMQW-Laser (vgl. Abb. 1) für die Nachrichtenübertragung in Glasfasernetzen befasst, die am Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin entwickelt werden[1]. Dabei interessieren neben elektronischen Charakteristika der Laser wie elektrisches Feld und Stromfluss gerade auch deren Wechselwirkung mit dem optischen Feld und der Temperaturentwicklung im Bauelement, vgl. [2].

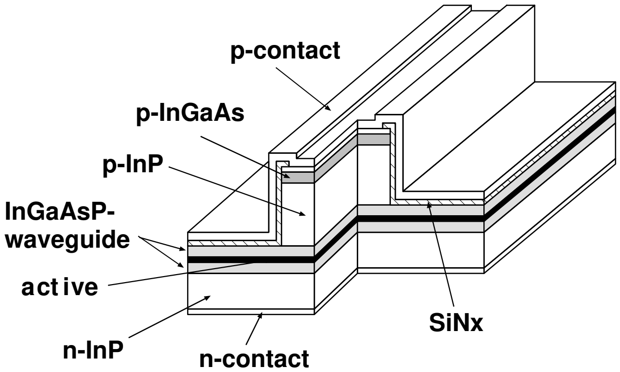


Abb. 1: Schematische Darstellung eines RW-SMQW-Lasers des HHI. Dieses beispielhafte Laserbauelement ist ein 470 μm langer Einsektions-FP-Laser mit unbeschichteten Facetten.

Die laseraktive Zone der untersuchten RW-SMQW-Laser ist ein Stapel (kompressiv) verspannter Quanten-Wells (SMQW) aus quaternärem Material (InGaAsP). Bei diesen Materialien spielen interne Verluste eine erhebliche Rolle, genauer, der Schwellstrom und die Ausbeute der Quanten-Wells hängt empfindlich von der lokalen Bauelementetemperatur ab. Es stellt sich heraus, dass bei Raumtemperatur und kurz über der Laserschwelle die Intervalenzbandabsorption und Absorption freier Ladungsträger die wesentlichen Prozesse der Aufheizung des Bauelementes sind, wohingegen bei höheren Temperaturen die Augerrekombination die Aufheizung bestimmt und so höhere Laserleistungen behindert.

Über den Einfluss von Bandstruktureffekten in den verspannten Quanten-Wells auf das Laserverhalten wird im Zusammenhang mit der Berechnung der elektronischen Zustände und der zugehörigen Impulsmatrixelemente in geschichteten Halbleiter-Heterostrukturen, vgl. [3] und S. 141 gesondert berichtet.

Die selbstkonsistente elektronische, thermische und optische Modellierung und Simulation des Gesamtbauelementes erfolgt auf der Basis der räumlich zweidimensionalen Version des Simulators `WIAS-TeSCA`, vgl. S. 133. Dabei wurde insbesondere das Temperaturmodell, vgl. [1] und S. 14, dahingehend erweitert, dass die Reabsorption des erzeugten Laserlichtes berücksichtigt wird ([2]). Die räumliche Struktur der optischen Moden in der zweidimensionalen Simulationsebene wird für wahlweise TE- bzw. TM-Felder durch eine skalare Helmholtzgleichung

[1] http://www.hhi.de

beschrieben. Diese Moden bestimmen dann die optische Rekombination in den Stromgleichungen des Drift-Diffusionsmodells, wobei longitudinale (in Ausbreitungsrichtung des Laserlichtes) Effekte über Photonenbilanzgleichungen für jede Mode in das transversale Modell eingeführt werden. Die Parameter der skalaren Helmholtzgleichung hängen ihrerseits vom elektrostatischen Potential, den Ladungsträgerdichten und der Bandstruktur in den Quanten-Wells, also den elektronischen Zuständen sowie den zugehörigen Impulsmatrixelementen darin ab. Die sich so ergebende Grundmode und die erste angeregte Mode des optischen TE-Feldes sind in Abb. 2 über einem wesentlichen Teil des zweidimensionalen Simulationsgebietes dargestellt. Aus Symmetriegründen kann man die Simulation auf eine Hälfte des transversalen Schnittes durch das Laserbauelement der Abb. 1 beschränken. — Die mit `WIAS-TeSCA` in diesem zweidimensionalen Schnitt des Bauelementes berechnete Temperaturverteilung ist für Laserleistungen knapp über der Laserschwelle und eine solche deutlich darüber in Abb. 3 dargestellt.

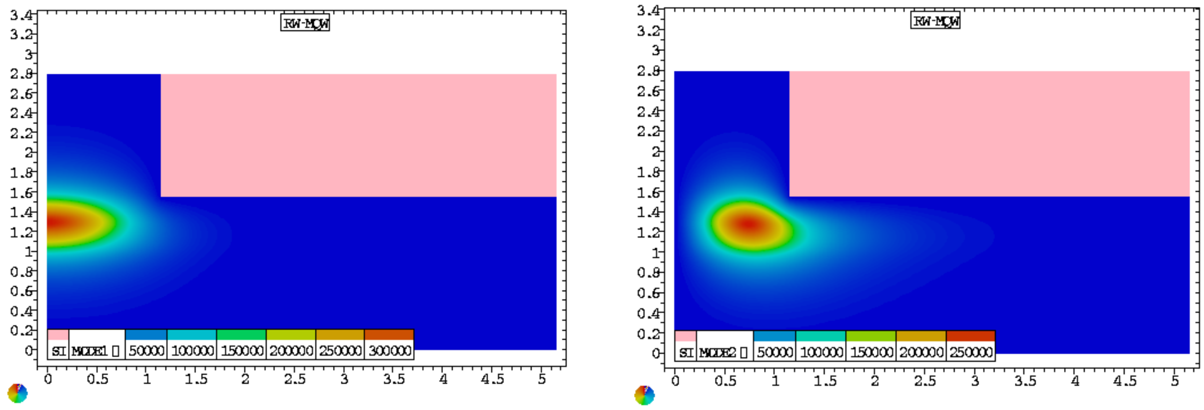


Abb. 2: Intensitätsverteilung der transversalen Grundmode (links) und der ersten Obermode (rechts) des optischen TE-Feldes in einem Ausschnitt des 2D-Simulationsgebietes.

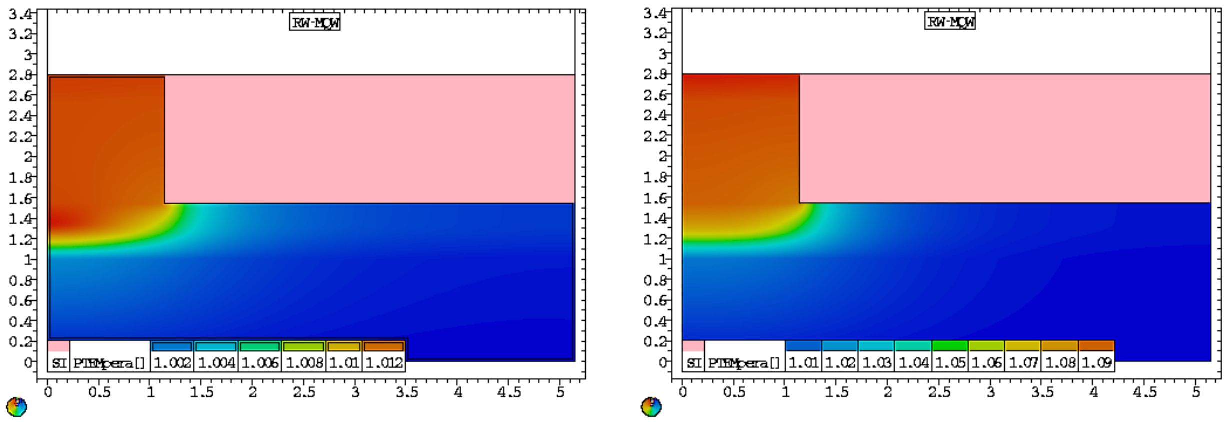
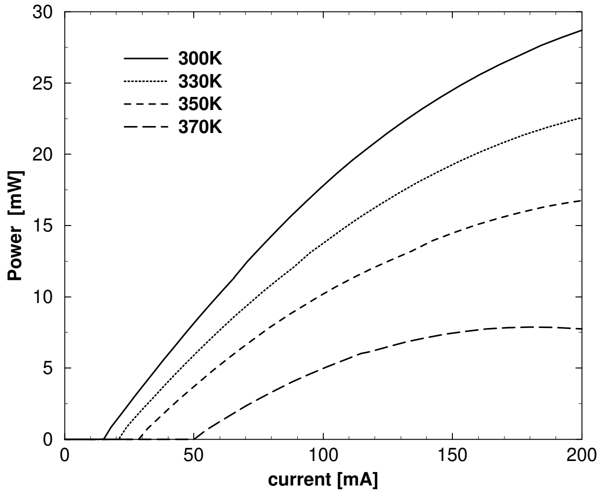


Abb. 3: Temperaturverteilung über einem Ausschnitt des 2D-Simulationsgebietes, links knapp über der Laserschwelle bei einem Injektionsstrom von 27 mA und 3 mW interner Laserleistung und rechts bei einem Injektionsstrom von 150 mA und 24 mW interner Laserleistung.

Knapp über der Laserschwelle beobachtet man eine lokale Erwärmung um maximal 3 K in dem Raumbereich, wo die Grundmode des Lasers, vgl. Abb. 2, konzentriert ist. Dies erlaubt den Schluss, dass die Erwärmung durch die Intervalenzbandabsorption und die Absorption freier Ladungsträger durch das kohärente Laserfeld erfolgt. Mit wachsender angelegter Spannung

verlagert sich das Temperaturmaximum unter den p-Kontakt, vgl. Abb. 1, und übertrifft dort bei einem Strom von 150 mA die Grundtemperatur um etwa 27 K, vgl. Abb. 3.
Um Aufschluss über die thermische Stabilität des Laserregimes zu gewinnen, haben wir den Einfluss verschieden temperierter Wärmesenken auf die PI-Kennlinie des Laserbauelementes studiert. Einige solche Kennlinien wurden am HHI auch gemessen und erlauben eine positive Bewertung der Simulationsrechnungen, von denen einige Ergebnisse in Abb. 4 dargestellt sind. Erstens konnte die Verschiebung der Laserschwelle mit der Temperatur reproduziert werden, die sich aus dem Anwachsen der Intervalenzbandabsorption und der Absorption freier Ladungsträger mit wachsender Temperatur erklärt. Dies wird von einem Abfall des optischen Gewinns begleitet. Daher werden höhere Ladungsträgerdichten benötigt, um den Laserprozess in Gang zu bringen, wodurch sich die Ladungsträgerrekombination verstärkt und schließlich höhere Injektionsströme zum Erreichen der gewünschten Laserleistung erforderlich werden, vgl. Abb. 4. Mit weiter zunehmender Temperatur dominiert am Ende die Augerrekombination, vgl. z. B. die 370-K-Kurve oberhalb der Laserschwelle in Abb. 4, was die Quanteneffizienz des Bauelementes drastisch verschlechtert.



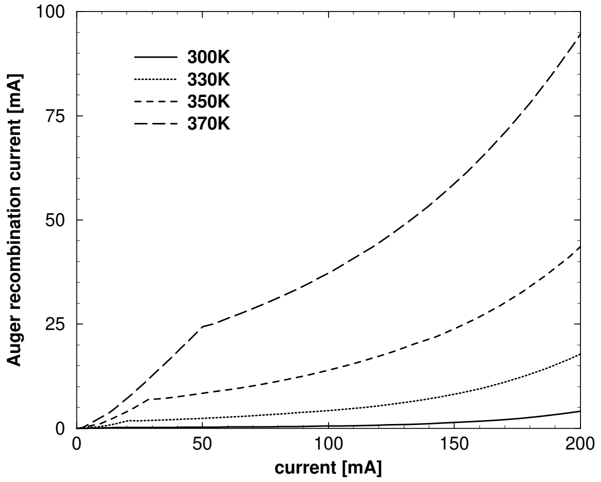


Abb. 4: PI-Kennlinie (links) und Augerrekombinationsstrom vs Injektionsstrom (rechts) für verschiedene Temperaturen der Wärmesenke.

Literatur

1. G. Albinus, H. Gajewski, R. Hünlich, *Thermodynamic design of energy models of semiconductor devices*, erscheint als WIAS-Preprint.

2. U. Bandelow, H. Gajewski, H.-Chr. Kaiser, *Modeling combined effects of carrier injection, photon dynamics and heating in strained multi quantum well lasers*, erscheint in: Proc. of Physics and Simulation of Optoelectronic Devices VIII, SPIE, Vol. **3944**.

3. U. Bandelow, H.-Chr. Kaiser, T. Koprucki, J. Rehberg, *Spectral properties of $k \cdot p$ Schrödinger operators in one space dimension*, erscheint in: Num. Funct. Anal. Optim.

Transversalmodendynamik von Halbleiterlasern

Bearbeiter: U. Bandelow, H. Gajewski, H. Stephan

Kooperation: E. Schöll (Institut für theoretische Physik, TU Berlin)

Förderung: DFG-Sonderforschungsbereich 555 „Komplexe nichtlineare Prozesse“

Laser sind ein klassisches Beispiel für Strukturbildung bei komplexen nichtlinearen Prozessen. Der Laserprozess selbst ist ein Resultat kooperativer Transportprozesse. Unabhängig davon können im aktiven Laserprozess bei Halbleiterlasern räumliche und zeitliche Strukturen auftreten. So wurden beispielsweise bei Breitstreifenlasern (siehe [1]) räumlich und zeitlich veränderliche optische Felder beobachtet. Ziel des Designs von Halbleiterlasern ist allerdings die Vermeidung solcher Strukturen, also der stabile kontinuierliche Laserbetrieb. Eine typische Eigenschaft von Breitstreifenlasern — und möglicherweise die Ursache dieser Diskontinuitäten — ist der räumlich ausgedehnte (breite) optisch aktive Bereich. Er führt dazu, dass viele optische Moden aktiv sind (im zitierten Beispiel acht). Diese Moden wirken mit den Ladungsträgern im Halbleiter (Elektronen und Löchern) auf komplizierte Weise zusammen. Je größer der aktive Bereich des Lasers ist, desto mehr Moden können aktiv werden und desto instabiler wird der Laser. Mit unserem Programmsystem `WIAS-TeSCA` ist es möglich den Betrieb von Halbleiterlasern zu simulieren. Allerdings ist die Zahl der möglichen aktiven Moden aus programmtechnischen Gründen auf zwei beschränkt. Bei derart kleinen Lasern (mit nur zwei möglichen aktiven Moden) wurden noch keine Instabilitäten beobachtet. Die Frage war nun, ob es trotzdem prinzipiell der Fall sein kann.
Das zugrunde liegende System partieller Differentialgleichungen besteht aus dem Energiemodell des Ladungsträgertransports (siehe S. 14), das durch die folgenden — die optischen Prozesse beschreibenden — Gleichungen (siehe [2]) ergänzt wird:

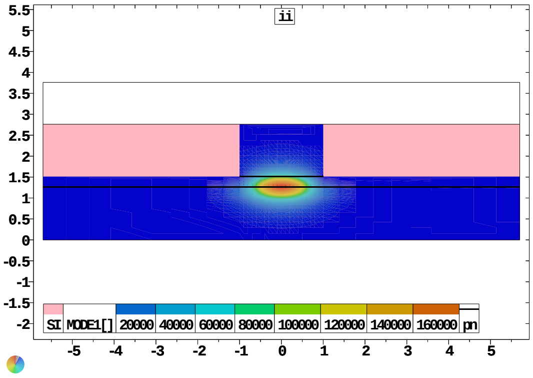
$$\begin{aligned} \dot{S}_j &= v_{g_j}(\Im\mathrm{m}\ \beta_j - \alpha_j)S_j && \text{Photonenbilanzgleichung} \\ \left[\Delta_{x,y} + \tfrac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_{opt}(N,P)\right]\Phi_j(x,y) &= \beta_j^2\Phi_j(x,y). && \text{Helmholtzgleichung} \end{aligned}$$

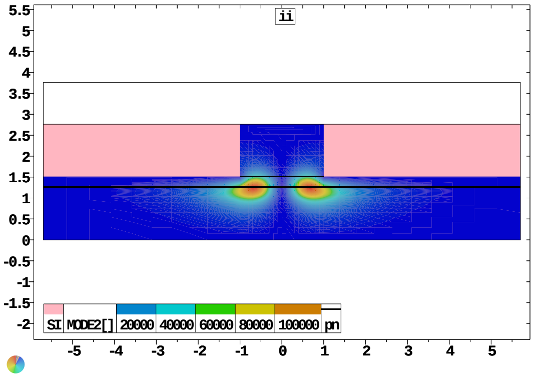
Hierbei ist

$$\begin{aligned} R &= R_0 + g(N,P)\cdot\sum_{j=1}^{\infty} c_j S_j \left|\Phi_j\right|^2 && \text{stimulierte Rekombination} \\ g(N,P) &= c\cdot N\cdot P - \alpha && \text{optischer Gewinn} \\ \varepsilon_{opt}(N,P) &= \Big(\mu_0 - \mu_1(N+P-|N_D-N_A|) + ig(N,P)\Big)^2 && \text{optische Dielektrizität} \end{aligned}$$

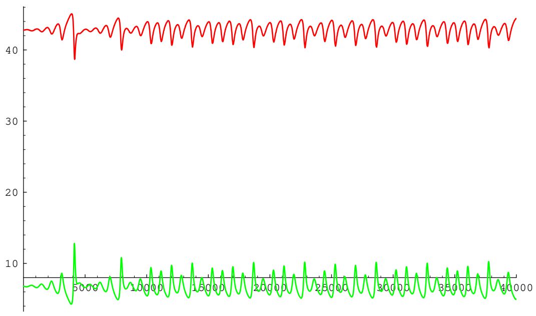
mit den Bezeichnungen:
N ... Elektronendichte,
P ... Löcherdichte,
$N_D - N_A$ ... Nettodotierung,
$P_j = c_jS_j$ ... optische Leistung der j-ten Mode,
S_j ... Photonenzahl der j-ten Mode,
$|\Phi_j|^2$ ... Intensitätsverteilung der j-ten Mode,
μ_0 ... effektiver Brechungsindex,

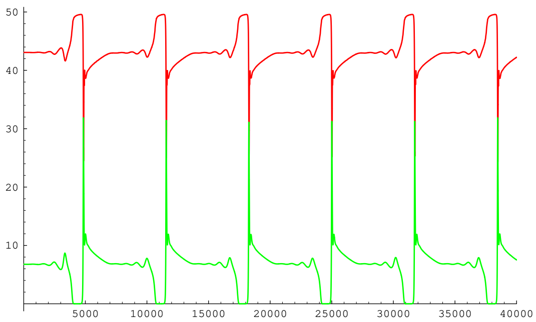
μ_1 ... differentieller Brechungsindex,
$\Im\mathrm{m}\ \beta_j$ ... modaler Gewinn,
α_j ... Verluste.
Die Kopplung zum Energiemodell besteht einerseits in der Abhängigkeit der optischen Parameter von den Ladungsträgerdichten N und P, die aus den Ladungsträgertransportgleichungen berechnet werden, und andererseits in der Abhängigkeit der rechten Seiten dieser Gleichungen von der vom optischen Feld Φ_j stimulierten Rekombination. Darüber hinaus hängen alle Materialparameter explizit von der Temperatur ab, die selbstkonsistent mit der Wärmeleitungsgleichung berechnet wird.
Die folgenden Bilder zeigen die Intensitätsverteilung der ersten und zweiten optischen Mode für den von uns simulierten Fall eines einfachen Fabry-Perot-Lasers mit einer Stegbreite von 2,8 μm.





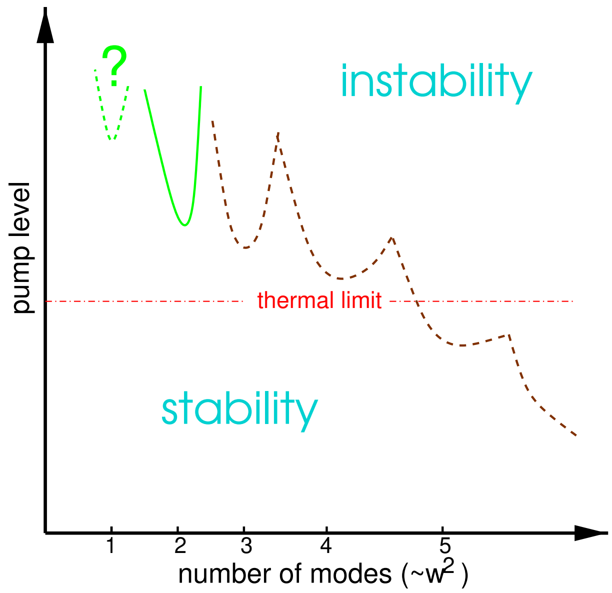
Bei der Simulation des dynamischen Verhaltens des Lasers betrachten wir zwei Fälle: Das Verhalten bei konstanter Temperatur (300 K), was einem Betrieb mit effektiver Kühlung entspricht, und das Verhalten unter isolierten Bedingungen mit sich selbst einstellender Temperatur. Tatsächlich treten im ersten Fall Oszillationen auf. Die beiden folgenden Bilder zeigen die Intensitäten der ersten (dunkel) und zweiten (hell) Mode in Abhängigkeit von der Zeit (die Gesamtzeit beträgt 40000 ps) für zwei ausgewählte Spannungen (1,40 V links und 1,42 V rechts).





Bemerkenswert ist, dass diese Oszillationen nur in einem sehr kleinen Stegbreitenbereich auftreten: Verringert man die Stegbreite bei zwei aktiven Moden, tritt der Fall ein, dass die zweite Mode plötzlich nicht mehr unter dem Steg lokalisiert ist — ein Effekt, der mit Erhöhung der Zahl der aktiven Moden zunimmt.

Das nebenstehende Bild zeigt eine hypothetische Spannungs-Stegbreiten-Karte. Die nichtlineare Abhängigkeit des Brechungsindex des optisch aktiven Mediums von der Leistung führt zu einem Ein- und Ausschalten der höchsten aktiven Mode, der zweiten in der durchgeführten Simulation. Beim Design von Halbleiterlasern wird darauf geachtet, dass der Steg eine Breite hat, bei der die zweite Mode auch mit einiger Toleranz unter dem Steg lokalisiert ist. Daher wird dieser — unerwünschte — Effekt nicht beobachtet.



Die zweite Simulation zeigte, dass dieser Effekt nur bei Kühlung des Lasers auftritt. Ist das nicht der Fall, führt die Aufheizung der aktiven Zone zur Senkung der optischen Leistung und der erwähnte nichtlineare Effekt kann das Bauelement nicht mehr destabilisieren. Interessant wäre nun zu klären, bei wie vielen aktiven Moden unter erlaubter Aufheizung Instabilitäten wieder auftreten.

Literatur

1. T. BURKHARD, M. O. ZIEGLER, I. FISCHER, W. ELSÄSSER, *Spatio-temporal dynamics of Broad Area Semiconductor Lasers and its characterization*, Chaos, Solitons and Fractals, **10** (1998), No. 4/5, pp. 845–850.

2. H. GAJEWSKI ET AL., *WIAS-TeSCA,* Manual, in Vorbereitung.

Modellierung und Simulation von hochsperrenden Bauelementen für Schaltkreise der angesteuerten Leistungselektronik

Bearbeiter: H. Gajewski, R. Hünlich, W. Röpke

Kooperation: J. Knopke, R. Rothe (alpha microelectronics gmbh Frankfurt (Oder)), B. Heinemann (Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder) GmbH), N. Strecker (ISE Zürich, Schweiz)

Förderung: BMBF

In diesem Projekt geht es um die Erweiterung des Bauelementesimulators `WIAS-TeSCA` durch die Kopplung des van-Roosbroeck-Systems mit der Wärmeleitungsgleichung, damit Anwendungsfälle mit hohen Temperaturgradienten adäquat behandelt werden können. Der Betrieb von Leistungstransistoren ist hierfür ein typisches Beispiel. Die in den Smart-Power-Schaltkreisen der Partnerfirma alpha microelectronics gmbh auftretenden Hochvoltbauelemente (HV-Bauelemente) mit einer Spannungsfestigkeit von mehreren 100 V sind gut geeignete Testobjekte für solch einen Anwendungsfall.
Im Berichtszeitraum wurden Arbeiten zu folgenden Punkten durchgeführt:

- Untersuchungen zur physikalischen und mathematischen Modellierung,
- Implementierung der Wärmeleitungsgleichung in das Programmsystem,
- Testrechnungen an einfachen Standardstrukturen,
- Testrechnungen an realen Strukturen der Partnerfirma.

Über die Aktivitäten zu den ersten beiden Punkten wird im Beitrag auf S. 14 berichtet. Die Testrechnungen an einfachen Strukturen dienten zur Prüfung der neu entwickelten Programmteile und der benutzten physikalischen Modelle.
Zum vierten Punkt ergaben sich neue Fragestellungen aus der Tatsache, dass die Partnerfirma Änderungen der Technologie vorbereitet, nämlich den Wechsel von Siliziumscheiben mit komplett dielektrisch isolierten Wannen (DI-Substrat) zu Scheiben mit durchgehender Oxidschicht in definierter Tiefe und Trench-Seitenisolation der Wannen (TDI-Substrat). Die wesentlichen Vorteile der neuen TDI-Scheiben sind deren einfachere Herstellung sowie die definierte Lage der Trenches, was eine bessere Ausnutzung der Chipfläche garantiert. Zur Vorbereitung dieser Technologie werden Prozess- und Bauelementesimulation eingesetzt, um begründete Forderungen an die neuen TDI-Scheiben zu formulieren und Abschätzungen über das Verhalten der HV-Bauelemente zu erhalten. Die Anzahl der sehr teuren Testpräparationen soll auf diese Weise reduziert werden.
Als repräsentative Vertreter für die Schalttransistoren, die mit der vollen Spannung belastet werden, sind zwei typische DMOST-Teststrukturen mit einem rotationssymmetrischen Aufbau ausgewählt worden. Diese Strukturen wurden mit dem Prozess-Simulator DIOS berechnet, wobei dank der Erfahrungen aus den Simulationen zu den HV-pMOST-Strukturen, deren Optimierung in der ersten Phase des Projekts im Vordergrund gestanden hatte, keine weiteren Probleme auftraten. Die anschließende Berechnung der Kennlinien erfolgte mit `WIAS-TeSCA`. Wesentliche Kriterien für die Bewertung von HV-Bauelementen sind die Durchbruchspannung und der Einschaltwiderstand. Deshalb wurden Kennlinien bis zum Durchbruchbereich für 0 V Gate-Spannung (Kurzschluss Source-Gate, Messbedingung für die Durchbruchspannung) und für 10 V Gate-Spannung (Messkurve für die Bestimmung des Einschaltwiderstandes) berechnet.

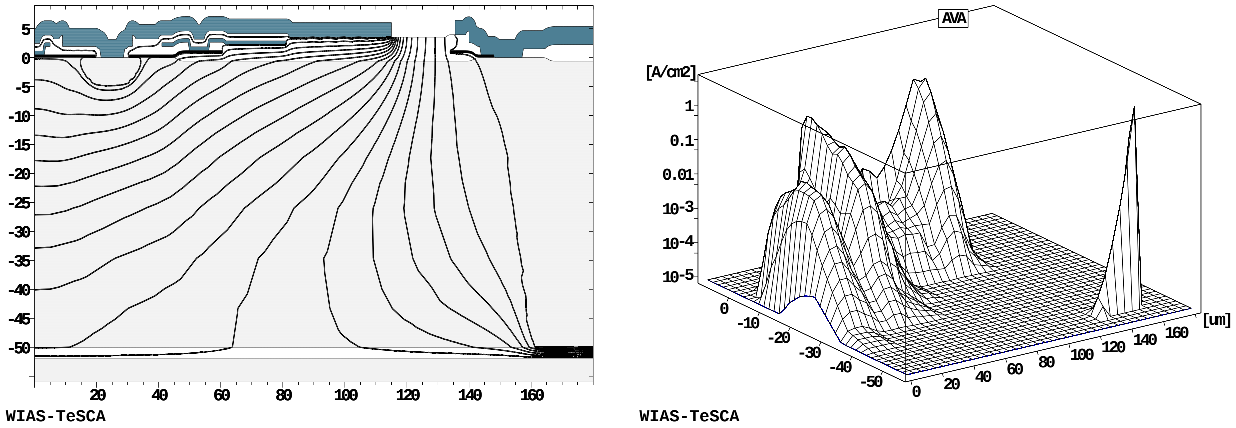


Abb. 1: Rotationssymmetrische DMOST-Struktur mit zwei Kanalringen. Potentialverlauf in der Struktur bei einer Gate-Source-Spannung von 10 V und einer Drain-Source-Spannung von 792 V (links), zugehörige Avalanche-Rate (rechts).

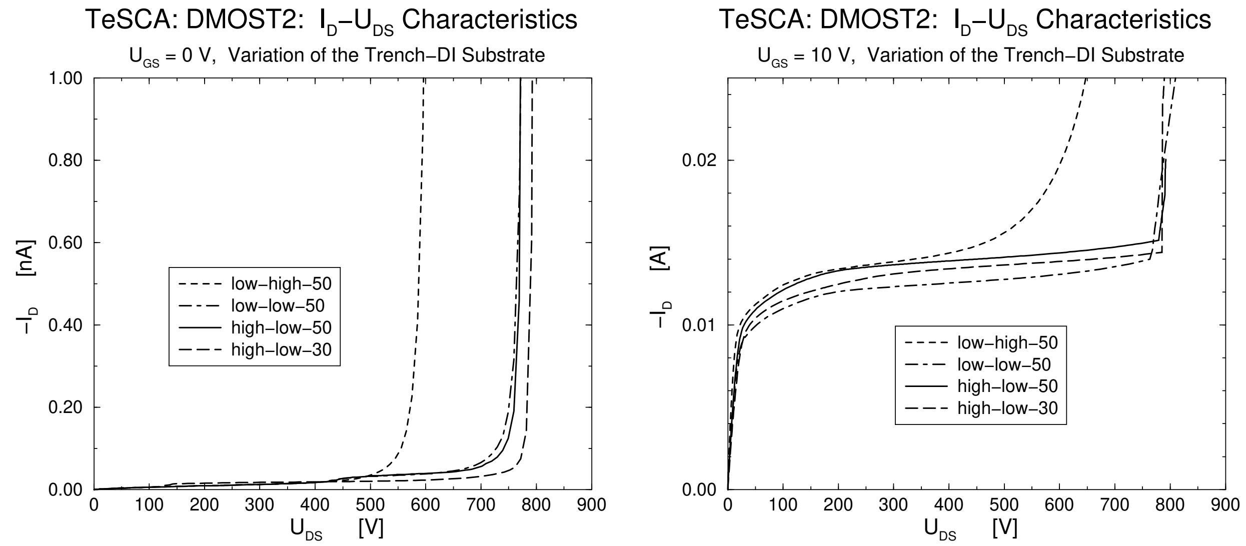
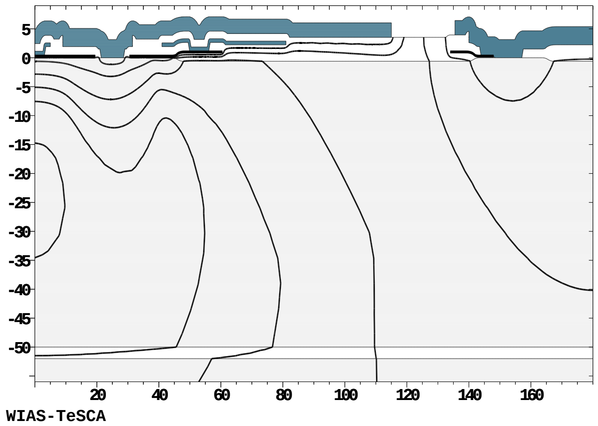


Abb. 2: Kennlinien zur Bauelementestruktur von Abb. 1 in verschiedenen TDI-Substraten bei Gate-Source-Spannungen von 0 V und 10 V. Legende: Dotierung zuerst in der Trägerscheibe, dann in der n^+-Schicht über dem Oxid, danach die Dicke der Si-Schicht über dem Oxid in μm.

Abbildung 1 zeigt den Potentialverlauf in einer DMOST-Struktur mit zwei Kanalringen bei einer Drainspannung im Durchbruchbereich und die zugehörige Verteilung der Avalancherate. Kennlinien zu typischen Varianten der TDI-Substrate sind in Abb. 2 dargestellt. Durch derartige Rechnungen konnten Aussagen erhalten werden, die für die Firma wertvolle Entscheidungshilfen beim Übergang von den DI-Substraten zu den TDI-Substraten darstellen.
Die eben genannten Ergebnisse sind mit dem jeweils aktuellen Stand von `WIAS-TeSCA`, aber noch ohne Berücksichtigung von Temperatureffekten erzielt worden. Gegenwärtig wird untersucht, wie die DMOST-Strukturen von `WIAS-TeSCA` mit angekoppelter Wärmeleitungsgleichung bewältigt werden und wie sich die bisher erhaltenen Ergebnisse ändern. Als Beispiel zeigt Abb. 3 simulierte Temperaturverläufe in einer DMOST-Struktur bei verschiedenen Drain-Source-Spannungen.



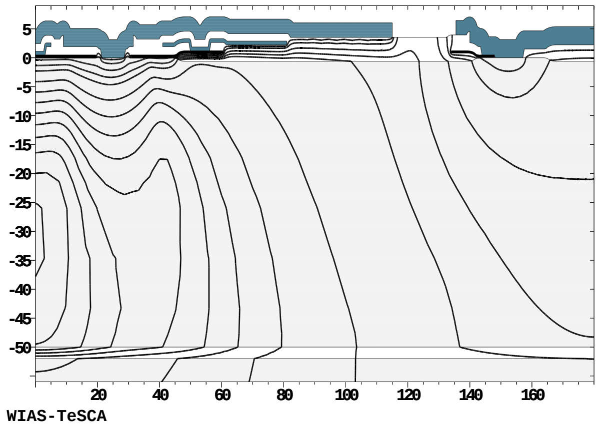


Abb. 3: Temperaturverlauf in einem DMOST bei verschiedenen Drain-Source-Spannungen (links 350 V, rechts 750 V). Minimale Temperatur an den Kontakten (300 K), maximale Temperatur auf der Rotationsachse (links 348 K, rechts 468 K).

Die Simulation der hier betrachteten HV-Bauelemente stellt hohe Anforderungen an den Simulator `WIAS-TeSCA`. Es handelt sich dabei um

- sehr große Strukturen,
- steile Profile und starke Felder in kleinen Teilgebieten,
- das Auftreten sehr großer floatender Gebiete,
- Heteroeffekte in und zwischen den verschiedenen Materialien,
- eine starke Abhängigkeit der Modellparameter von der Temperatur,
- eine Variation der Drain-Source-Spannung über einen weiten Bereich.

Zur Bewältigung dieser Anforderungen mussten einige Algorithmen verbessert werden. Insbesondere ging es darum, die Steuerung der Iterationsverfahren so zu gestalten, dass sie über einen weiten Bereich mit stark wechselndem Bauelementeverhalten zuverlässig funktioniert.

Globale Eigenschaften von Paardiffusionsmodellen

Bearbeiter: A. Glitzky, R. Hünlich

Kooperation: W. Merz (Technische Universität München)

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

Die im vergangenen Jahr begonnenen Untersuchungen zu Paardiffusionsmodellen (vgl. [3]) wurden fortgesetzt, wobei jetzt auch spezielle Fälle von Heterostrukturen diskutiert wurden. Wir betrachten m Spezies X_i, von denen nur die ersten l als diffundierend angenommen werden, und bezeichnen mit ψ das chemische Potential der Elektronen, $p_i(\cdot,\psi)$ sind geeignet gewählte vom Ort und von ψ abhängende Referenzdichten, die gemäß

$$p_i(x,\psi) = p_{i0}(x)\mathrm{e}^{-P_i(\psi)},\ P_i(\psi) = \int_0^\psi Q_i(s)\,\mathrm{d}s$$

mit den Ladungszahlen $Q_i(\psi)$ zusammenhängen. Da die Teilchendichten u_i der diffundierenden Spezies nun nicht mehr zu $H^1(\Omega)$ gehören (sie liegen lediglich im dualen Raum), werden die Gleichungen in den chemischen Aktivitäten $b_i = u_i/p_{i0}$ formuliert, die weiterhin H^1-Größen sein sollen. Die Modellgleichungen enthalten m Kontinuitätsgleichungen gekoppelt mit einer nichtlinearen Poissongleichung und sehen wie folgt aus:

$$\left.\begin{array}{rcll}
\dfrac{\partial u_i}{\partial t} + \nabla\cdot j_i + \sum\limits_{(\alpha,\beta)}(\alpha_i-\beta_i)R^{\Omega}_{\alpha\beta} &=& 0 & \text{auf } (0,\infty)\times\Omega,\\
\nu\cdot j_i - \sum\limits_{(\alpha,\beta)}(\alpha_i-\beta_i)R^{\Gamma}_{\alpha\beta} &=& 0 & \text{auf } (0,\infty)\times\partial\Omega,\ i=1,\dots,l;\\
\dfrac{\partial u_i}{\partial t} + \sum\limits_{(\alpha,\beta)}(\alpha_i-\beta_i)R^{\Omega}_{\alpha\beta} &=& 0 & \text{auf } (0,\infty)\times\Omega, \quad i=l+1,\dots,m;\\
-\nabla\cdot(\varepsilon\nabla\psi) + e(\cdot,\psi) - \sum\limits_{i=1}^{m} Q_i(\psi)u_i &=& f & \text{auf } (0,\infty)\times\Omega,\\
\nu\cdot(\varepsilon\nabla\psi) &=& 0 & \text{auf } (0,\infty)\times\partial\Omega;\\
u_i(0) &=& U_i & \text{in } \Omega,\ i=1,\dots,m.
\end{array}\right\} \quad (1)$$

Dabei ist ε die Dielektrizität, f eine fixierte Ladungsdichte, und $-e(\cdot,\psi)$ ist die Ladungsdichte der Elektronen und Löcher. Für die ersten l Spezies (Punktdefekte und Dotand-Defekt-Paare) nehmen wir diffusiven und konvektiven Transport an, der durch den Stromausdruck

$$j_i = -D_i(\cdot,b,\psi)p_{i0}\big[\nabla b_i + Q_i(\psi)\,b_i\nabla\psi\big],\ i=1,\dots,l,$$

gegeben ist. Ein Beispiel für die ψ-Abhängigkeit der betrachteten Diffusionskoeffizienten D_i sowie der Ladungen Q_i ist für verschiedene Prozesstemperaturen in Abb. 1 dargestellt. In allen Kontinuitätsgleichungen treten Volumenquellterme auf, die durch Reaktionen der Form

$$\alpha_1 X_1 + \cdots + \alpha_m X_m \rightleftharpoons \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_m X_m$$

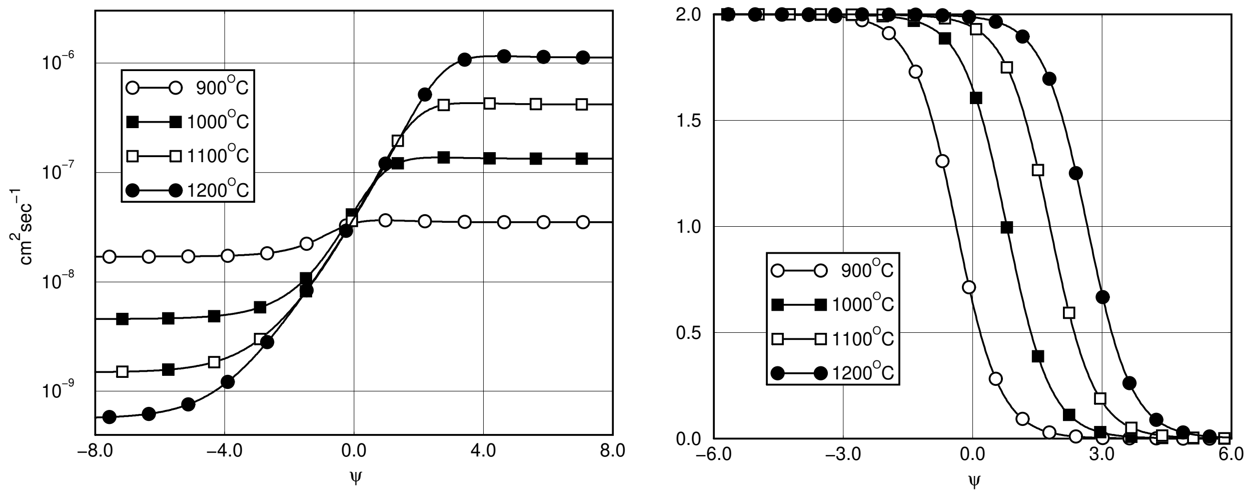


Abb. 1: Phosphor-Interstitial-Paare in Silizium: Diffusionskoeffizient (links) und Ladungszahl (rechts) als Funktion des chemischen Potentials ψ bei verschiedenen Temperaturen (nach [1]).

entstehen, wobei $\alpha, \beta \in \mathbb{Z}_+^m$ die Vektoren der stöchiometrischen Koeffizienten bezeichnen. Die entsprechenden Reaktionsraten $R^{\Omega}_{\alpha\beta}$ lauten gemäß dem Massenwirkungsgesetz

$$R^{\Omega}_{\alpha\beta}(x,b,\psi) = k^{\Omega}_{\alpha\beta}(x,b,\psi)\Big[\prod_{i=1}^{m} a_i^{\alpha_i} - \prod_{i=1}^{m} a_i^{\beta_i}\Big],\ x\in\Omega,\ b\in\mathbb{R}^m_+,\ \psi\in\mathbb{R},\ a_i = b_i e^{P_i(\psi)}.$$

Gemeint sind damit verschiedene Paarbildungs- und Generations-Rekombinationsreaktionen. Für alle nicht diffundierenden Spezies X_i (Dotanden) wird die Existenz einer Reaktion der Form

$$R^{\Omega}_{\alpha\beta} = k^{\Omega}_{\alpha\beta}\big[\prod_{j=1}^{l} a_j^{\alpha_j} - a_i^2\big] \tag{2}$$

vorausgesetzt (Generation-Rekombination verschiedener Dotand-Defekt-Paare). Zwischen den diffundierenden Spezies X_i, $i = 1,\dots,l$, können zusätzlich Randreaktionen mit Reaktionsraten

$$R^{\Gamma}_{\alpha\beta}(x,b_1,\dots,b_l,\psi) = k^{\Gamma}_{\alpha\beta}(x,b_1,\dots,b_l,\psi)\Big[\prod_{i=1}^{l} a_i^{\alpha_i} - \prod_{i=1}^{l} a_i^{\beta_i}\Big],\ x\in\Gamma,\ b\in\mathbb{R}^l_+,\ \psi\in\mathbb{R},$$

auftreten. Die kinetischen Koeffizienten D_i, $k^{\Omega}_{\alpha\beta}$ und $k^{\Gamma}_{\alpha\beta}$ hängen außer von ψ noch vom Ort und vom Zustand selbst (beschrieben durch den Vektor $b = (b_1,\dots,b_m)$) ab.
Die in [3] benutzten Methoden zu energetischen Abschätzungen können für den betrachteten Fall von Heterostrukturen adaptiert werden, was auf die folgenden Resultate führt: Das Problem (1) besitzt einen durch $\int_\Omega (u^* - U)\,\mathrm{d}x \in \operatorname{span}\{\alpha - \beta\}$ eindeutig bestimmten stationären Zustand (u^*, b^*, ψ^*). Die freie Energie

$$F(u) = \int \Big\{\frac{\varepsilon}{2}|\nabla\psi|^2 + g(\cdot,\psi) + \sum_{i=1}^{m}\big\{u_i(P_i(\psi) - Q_i(\psi)\psi) + u_i\big[\ln\frac{u_i}{p_{i0}} - 1\big] + p_{i0}\big\}\Big\}\,\mathrm{d}x,$$

wobei $g(\cdot,\psi) = e(\cdot,\psi)\psi - \int_0^{\psi} e(\cdot,s)\,\mathrm{d}s$ und ψ die eindeutig bestimmte Lösung der Poissongleichung zu u ist, ist entlang von Lösungen von (1) beschränkt und fällt monoton und exponentiell gegen ihren Gleichgewichtswert $F(u^*)$. Diese energetischen Abschätzungen bilden die Grundlage für weitere a priori-Abschätzungen für Lösungen von (1).

Unter der für Paardiffusionsmodelle erfüllten Voraussetzung, dass die Quellterme aus den Volumenreaktionen maximal zweiter Ordnung sind, haben wir im räumlich zweidimensionalen Fall die Existenz globaler oberer Schranken für die Teilchendichten u_i nachgewiesen. Dazu werden zunächst die $L^\infty(\mathbb{R}_+, L^2(\Omega))$- und $L^\infty(\mathbb{R}_+, L^4(\Omega))$-Normen der chemischen Aktivitäten b_i abgeschätzt. Hier verwenden wir die Voraussetzung (2) und Folgerungen aus dem exponentiellen Fallen der freien Energie entlang von Lösungen von (1), um die aus der Drift und den Reaktionen resultierenden Terme zu kontrollieren. Eine anschließende Moser-Iteration liefert für die diffundierenden Spezies globale obere Schranken für die chemischen Aktivitäten b_i und Teilchendichten u_i, mit deren Kenntnis schließlich auch die entsprechenden Schranken für die nicht diffundierenden Spezies gewonnen werden.

Für strikt positive Anfangswerte haben wir globale positive untere Schranken für die chemischen Aktivitäten b_i und Teilchendichten u_i hergeleitet. Von der Länge des Zeitintervalls abhängende Abschätzungen $\|\ln b_i\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))} \le c_T$ sichern zunächst die Zulässigkeit von Testfunktionen der Form

$$-\Big(1-\frac{b_i^*}{b_i}\Big)^- \text{ bzw. } -p\,\mathrm{e}^t\,\frac{(\ln b_i + K)^{p-1}}{b_i}, \quad p \ge 2, \quad K \ge 0.$$

Die erste Testfunktion führt für $i = 1, \ldots, l$ auf $\|\ln b_i\|_{L^\infty(\mathbb{R}_+;L^1(\Omega))} \le c$, mittels der zweiten Testfunktion und Moser-Iteration gelangen wir zu positiven globalen unteren Schranken für die chemischen Aktivitäten b_i, $i = 1, \ldots, l$. Hieraus können aufgrund der vorhandenen Reaktion (2) die entsprechenden Resultate für die nicht diffundierenden Spezies gewonnen werden.

Mit Hilfe der a priori-Abschätzungen und des exponentiellen Fallens der freien Energie haben wir weitere Aussagen zum asymptotischen Verhalten von Lösungen des Paardiffusionsmodells (1) erhalten. Insbesondere nähern sich die Teilchendichten u_i, die chemischen Aktivitäten b_i und das chemische Potential der Elektronen ψ in jeder L^p-Norm exponentiell ihrem Gleichgewichtswert. Aufgrund von Regularitätsaussagen für elliptische Gleichungen gilt die Asymptotik für ψ auch in der L^∞-Norm. Für die ausführliche Diskussion der hier vorgestellten Paardiffusionsmodelle verweisen wir auf [2].

Aussagen zur Lösbarkeit von (1) sind Gegenstand aktueller Untersuchungen, Resultate für den Fall einer homogenen glatt berandeten Struktur sind in [4] zu finden.

Literatur

1. K. GHADERI, G. HOBLER, *Simulation of phosphorus diffusion in silicon using a pair diffusion model with a reduced number of parameters*, J. Electrochem. Soc., **142** (1995), pp. 1654–1658.

2. A. GLITZKY, R. HÜNLICH, *Global properties of pair diffusion models*, in Vorbereitung.

3. R. HÜNLICH, A. GLITZKY, *On energy estimates for electro-diffusion equations arising in semiconductor technology*, in: Partial differential equations. Theory and numerical solution (W. Jäger, J. Nečas, O. John, K. Najzar, J. Stará, Hrsg.), Research Notes in Mathematics, **406**, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, 2000, pp. 158–174.

4. W. MERZ, A. GLITZKY, R. HÜNLICH, K. PULVERER, *Strong solutions for pair diffusion models in homogeneous semiconductors*, Preprint SFB–438–9921, SFB 438, TU München, Univ. Augsburg, 1999.

Zur Regularität nichtglatter linearer parabolischer Anfangsrandwertprobleme in Sobolev-Campanato-Räumen

Bearbeiter: J. A. Griepentrog

Gegenstand unserer Untersuchungen sind qualitative Eigenschaften der Operatoren $\Lambda + L$, die als Summe von $\Lambda : \{u \in L^2(S;H^1_\circ(G)) : (au)' \in L^2(S;H^{-1}(G)),\, u(t_1) = 0\} \to L^2(S;H^{-1}(G))$ und $L : L^2(S;H^1_\circ(G)) \to L^2(S;H^{-1}(G))$ vermöge der Vorschriften

$$\int_S \langle Lu(s), w(s)\rangle_G \,\mathrm{d}s = \int_S \int_G \big(A(s)\nabla u(s) + b(s)u(s)\big)\cdot \nabla w(s)\,\mathrm{d}\lambda^n\,\mathrm{d}s$$
$$+ \int_S \int_G \big(c(s)\cdot \nabla u(s) + d(s)u(s)\big)w(s)\,\mathrm{d}\lambda^n\,\mathrm{d}s + \int_S \int_{\partial_N G} e(s)u(s)w(s)\,\mathrm{d}\lambda_{\partial G}\,\mathrm{d}s$$

und

$$\int_S \langle \Lambda u(s), w(s)\rangle_G \,\mathrm{d}s = \int_S \langle (au)'(s), w(s)\rangle_G \,\mathrm{d}s \quad \text{jeweils für } w \in L^2(S;H^1_\circ(G))$$

definiert sind, sowie Regularitätseigenschaften der zu den Funktionalen $F \in L^2(S;H^{-1}(G))$ gehörenden Lösungen des linearen parabolischen Anfangsrandwertproblems

$$\int_S \langle \Lambda u(s) + Lu(s), w(s)\rangle_G \,\mathrm{d}s = \int_S \langle F(s), w(s)\rangle_G \,\mathrm{d}s \quad \text{für } w \in L^2(S;H^1_\circ(G)), \quad u(t_1) = 0. \qquad (1)$$

Unsere Voraussetzungen an die Daten der genannten Aufgabenklasse (1) sind so allgemein formuliert, dass Anfangsrandwertprobleme mit nichtglatten Koeffizienten auf beschränkten Zeitintervallen $S = (t_1,t_2)$ in beschränkten, nichtglatten Teilmengen G des $\mathbb{R}^n$ der Raumdimension $n \geq 3$ unter gemischten Randbedingungen auf den Neumann- bzw. Dirichlet-Randstücken $\partial_N G = G \cap \partial G$ bzw. $\partial_D G = \partial G \setminus \overline{\partial_N G}$ des Randes von G behandelt werden können.[1] Genauer gesagt, fordern wir die Regularität der Menge $G \subset \mathbb{R}^n$ im Sinne von Gröger [2] sowie die Beschränktheit und die Messbarkeit der auf G° bzw. $S \times G^\circ$ und $S \times \partial_N G$ definierten Koeffizienten a bzw. A, b, c, d und e. Während b und c vektorwertige sowie a, d und e skalare Größen sind, soll A Werte in der Menge der positiv definiten, symmetrischen $(n \times n)$-Matrizen annehmen, mit anderen Worten, es möge eine Elliptizitätskonstante $0 < \varepsilon \leq 1$ mit der Eigenschaft

$$\varepsilon\,|\xi|^2 \leq A\xi \cdot \xi \leq \frac{1}{\varepsilon}\,|\xi|^2 \quad \text{fast überall auf } S \times G^\circ \text{ für alle } \xi \in \mathbb{R}^n$$

existieren. Außerdem setzen wir die Positivität des Koeffizienten a voraus, das heißt, es soll

$$\varepsilon \leq a \leq \frac{1}{\varepsilon} \quad \text{fast überall auf } G^\circ$$

gelten. Dabei ist die Einbeziehung des Koeffizienten a in unsere Betrachtungen einerseits der Invarianz der Problemklasse (1) gegenüber allgemeinen Lipschitz-Transformationen geschuldet, andererseits aber auch für viele Problemstellungen von durchaus eigenständigem Interesse.

Mit unseren Forderungen wird der häufig anzutreffenden Nichtglattheit konkreter Aufgabenstellungen (z. B. instationäre Stoff- oder Wärmetransportprobleme in heterogenen, nichtglatt berandeten räumlichen Strukturen bei wechselnden Randbedingungen) Rechnung getragen.

[1]Für (reguläre) Mengen $G \subset \mathbb{R}^n$ gelten stets die Beziehungen $G = G^\circ \cup \partial_N G$ sowie $\partial G = \overline{\partial_N G} \cup \overline{\partial_D G}$.

Das wesentliche Ergebnis unserer Arbeit (siehe Griepentrog [1]) besteht darin, dass es in dieser allgemeinen Konstellation möglich ist, für die obige Klasse parabolischer Anfangs-randwertprobleme (1) die Existenz einer nur von $0 < \varepsilon \leq 1$ und G abhängigen Konstanten $n < \overline{\omega} < n+2$ zu beweisen, so dass für alle Parameter $0 \leq \omega < \overline{\omega}$ der lineare parabolische Operator $\Lambda + L$ die Isomorphismus-Eigenschaft sowie die maximale Regularitätseigenschaft zwischen den Sobolev-Campanato-Räumen

$$W_{\circ\circ}^{\omega}(a,S,G) = \{u \in L^2(S;H_\circ^1(G)) : \nabla u \in \mathfrak{L}^{2,\omega}(S,G^\circ,\mathbb{R}^n),\, (au)' \in Y^\omega(S,G),\, u(t_1) = 0\}$$

sowie den Campanato-Räumen

$$Y^\omega(S,G) = \{F \in L^2(S;H^{-1}(G)) : \sup_{t\in S, x\in G^\circ, r>0} r^{-\omega}\, \|F|_{S[t,r],G[x,r]}\|^2_{L^2(S[t,r];H^{-1}(G[x,r]))} < \infty\}$$

besitzt. Hierbei verwenden wir die Symbole $S[t,r] = S \cap (t-r^2,t)$ und $G[x,r] = G \cap B(x,r)$.

Darüber hinaus liegt eine lineare und stetige Abhängigkeit (im Sinne der Operatornorm) des Isomorphismus $\Lambda + L$ von den Koeffizienten A,b,c,d und e vor. Daraus ergibt sich insbesondere, dass die Lösung zu Problem (1) im Sinne des Sobolev-Campanato-Raumes $W_{\circ\circ}^{\omega}(a,S,G)$ sowohl glatt von den rechten Seiten $F \in Y^\omega(S,G)$ als auch glatt von den Koeffizienten A,b,c,d und e im Sinne der jeweiligen L^∞-Norm abhängt.

Man beachte, dass im Falle $3 \leq n < \omega < n+2$ der Sobolev-Campanato-Raum $W_{\circ\circ}^{\omega}(a,S,G)$ für $\alpha = (\omega - n)/2$ stetig in den Hölder-Raum $C^{0,\alpha/2}(\overline{S};C(\overline{G})) \cap C(\overline{S};C^{0,\alpha}(\overline{G}))$ eingebettet ist.

Im Vergleich zu unseren Ergebnissen liefern im Falle $a = 1$ bekannte Regularitätsresultate von Gröger, Rehberg [4], Gröger [3] die Existenz einer reellen Zahl $\overline{p} = \overline{p}(\varepsilon,G) > 2$, so dass der parabolische Operator $\Lambda + L$ für $q \geq 2$ und $2 \leq p < \overline{p}$ ein Isomorphismus zwischen $\{u \in L^q(S;W_\circ^{1,p}(G)) : u' \in L^q(S;W^{-1,p}(G)),\, u(t_1) = 0\}$ und $L^q(S;W^{-1,p}(G))$ ist. Somit hängt die Lösung des Problems (1) im Raum $\{u \in L^q(S;W_\circ^{1,p}(G)) : u' \in L^q(S;W^{-1,p}(G)),\, u(t_1) = 0\}$ glatt von den rechten Seiten $F \in L^q(S;W^{-1,p}(G))$ ab. Insbesondere erhält man daraus für $n = 2$ sowie $2 < p < \overline{p}$ und $q > 2p/(p-2)$ die glatte Abhängigkeit der Lösungen im Sinne der Norm des Hölder-Raumes $C^{0,\alpha/2}(\overline{S};C(\overline{G})) \cap C(\overline{S};C^{0,\alpha}(\overline{G}))$ mit dem Exponenten $\alpha = 1 - 2/q - 2/p$.

Literatur

1. J. A. GRIEPENTROG, *Zur Regularität linearer elliptischer und parabolischer Randwert-probleme mit nichtglatten Daten*, Dissertation, Humboldt-Universität zu Berlin, 1999.

2. 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.

3. ——, *$W^{1,p}$-estimates of solutions to evolution equations corresponding to nonsmooth second order elliptic differential operators*, Nonlinear Anal., **18** (1992), pp. 569–577.

4. K. GRÖGER, J. REHBERG, *Local existence and uniqueness of solutions to nonsmooth parabolic systems*, in Vorbereitung.

Phasenfeldsysteme

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

Kooperation: P. Colli, G. Gilardi (Universität Pavia, Italien), M. Frémond (LMSGC, Paris, Frankreich), S. Zheng (Fudan Universität, Shanghai, China)

Förderung: DFG: „Hysterese-Operatoren in Phasenfeld-Gleichungen“, VIGONI

Diffusive Phasenübergänge, wie z. B. das Kristallwachstum oder die Phasenseparation, werden häufig durch *Phasenfeldsysteme* modelliert. In derartigen Systemen ist eine Evolutionsgleichung für den so genannten *Ordnungsparameter* des Phasenübergangs mit einer weiteren Evolutionsgleichung gekoppelt, die typischerweise entweder die Impulsbilanz oder die Bilanzgleichung für die innere Energiebilanz beinhaltet. Aus praktischen Anwendungssituationen abgeleitete Systeme dieser Art sind seit längerem Gegenstand der Untersuchungen am WIAS. Im Rahmen des Projektes wurden im Berichtszeitraum verschiedene Typen Phasenfeldsysteme untersucht.

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

$$C_V\,\partial_t\theta - \kappa\Delta\theta = g \qquad \text{im Wasser und im Eis,} \tag{1}$$

$$\left[\kappa\frac{\partial\theta}{\partial n}\right] = -LW_N \quad \text{auf der Grenzschicht Wasser/Eis,} \tag{2}$$

$$c(\theta)\,W_N = \frac{L(\theta_M-\theta)}{\theta_M} \quad \text{auf der Grenzschicht Wasser/Eis.} \tag{3}$$

Hierbei sind θ die absolute Temperatur, $[\cdot]$ 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:

$$\partial_t\,(C_V\,\theta + L\chi) - \kappa\Delta\theta \;=\; g\,, \tag{4}$$

$$\phi(\nabla\beta,\theta)\,\chi_t - \varepsilon\Delta\chi + \partial I_{[0,1]}(\chi) \;\ni\; \frac{L}{\theta_M}\,(\theta-\theta_M)\,. \tag{5}$$

Hierbei sind χ die Volumenfraktion der flüssigen Phase (Ordnungsparameter) und ferner $\phi(\nabla\beta,\theta)$ eine geeignete Näherung von $\dfrac{c(\theta)}{|\nabla\chi|}$. Es gelang in [1, 4], die Lösbarkeit dieses Systems nachzuweisen.

b) Phasenübergänge werden häufig von Hysterese-Phänomenen begleitet. Zur besseren Modellierung dieser Erscheinungen wurde in den Arbeiten [5, 6, 7, 8] 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

$$\mu(\theta)\,w_t + \mathcal{H}_1[w] + \mathcal{H}_2[w]\,\theta \;=\; 0\,, \tag{6}$$

$$(C_V\,\theta + \mathcal{F}_1[w])_t - \kappa\Delta\theta \;=\; g(\theta,x,t)\,, \tag{7}$$

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. *relaxierte*

Stefan-Probleme, auf die Form (6), (7) transformieren lassen (in diesem Zusammenhang stellt die Variable w eine Verallgemeinerung des so genannten *freezing index* dar). Dabei sorgt die vorausgesetzte (aber in praktischen Anwendungen tatsächlich gegebene) *Dissipativität* der Hysterese-Operatoren $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ dafür, dass der zweite Hauptsatz der Thermodynamik in Form der Entropieungleichung und der Positivität der Temperatur erfüllt ist.

Es gelang im Berichtszeitraum, die in [5, 6, 7, 8] erzielten Resultate auf den Fall von Systemen mit mehreren Phasenfeldvariablen auszudehnen, das asymptotische Verhalten für $t \to \infty$ zu klären und Fälle einzubeziehen, in denen ein zusätzliches thermisches Gedächtnis vorliegt. Die Resultate sind in den Arbeiten [3, 9, 10] zusammengefasst.

Literatur

1. P. COLLI, M. FRÉMOND, O. KLEIN, *Global existence of a solution to a phase field model for supercooling*, WIAS-Preprint No. 525, 1999, erscheint in: Nonlin. Anal. TMA.

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 thermal memory*, WIAS-Preprint No. 497, 1999, erscheint in: Math. Meth. Appl. Sci.

4. O. KLEIN, *Two phase field systems modelling supercooling*, erscheint in: Proceedings der Tagung „Free Boundary Problems: Theory and Applications (FBP'99)“ in Chiba, Japan, Gakkotōsho, Tokyo.

5. P. KREJČÍ, J. SPREKELS, *Hysteresis operators in phase-field models of Penrose-Fife type*, Appl. Math., **43** (1998), pp. 207–222.

6. ——, *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.

7. ——, *A hysteresis approach to phase-field models*, Nonlin. Anal. TMA, **39** (2000), pp. 569–586.

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

9. ——, *Phase-field systems and vector hysteresis operators*, erscheint in: Proceedings der Tagung „Free Boundary Problems: Theory and Applications (FBP'99)“ in Chiba, Japan, Gakkotōsho, Tokyo.

10. P. KREJČÍ, J. SPREKELS, S. ZHENG, *Asymptotic behaviour for a phase-field system with hysteresis*, WIAS-Preprint No. 520, 1999, eingereicht.

Hysteresephänomene in der Elastoplastizität

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

Kooperation: J. Franců (Technische Universität, Brno, Tschechische Republik)

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 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 $x = \mathfrak{s}_Z[x^0,u]$ (oder kurz $x = \mathfrak{s}_Z[u]$, falls x^0 im entsprechenden Sinne kanonisch gewählt wird) heißt *Stop mit Charakteristik Z*; seine Eigenschaften werden seit den siebziger Jahren systematisch untersucht. Eine Zusammenfassung bisheriger Resultate über 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 wurde im Buch [1] vorgestellt.

a) Die Arbeit [2] zeigt, dass die Lipschitz-Stetigkeit des Normalenvektors der konvexen Menge Z nicht nur hinreichend für die lokale Lipschitz-Stetigkeit des Stop-Operators $\mathfrak{s}_Z$ im Raum $W^{1,1}(0,T;\mathbb{T})$ ist, sondern auch notwendig.

b) Die Homogenisierungstheorie wurde in der Arbeit [3] verwendet, um das eindimensionale Prandtl-Ishlinskii-Modell zu begründen. Der Prandtl-Ishlinskii-Operator $\mathcal{P}$ definiert das elastoplastische Materialgesetz in der Form

$$\sigma = \mathcal{P}[\varepsilon], \tag{2}$$

wobei ε, σ die einachsigen zeitabhängigen Dehnungs- und Spannungsfunktionen bezeichnen. Der Operator $\mathcal{P}: C[0,T] \to C[0,T]$ wird als das Stieltjes-Integral

$$\mathcal{P}[\varepsilon](t) := a\,\varepsilon(t) + \int_0^\infty \mathfrak{s}_r[\varepsilon]\,d\nu(r) \tag{3}$$

über alle eindimensionalen Stop-Operatoren $\mathfrak{s}_r$ mit Charakteristiken $[-r,r]$, $r > 0$, für jedes $\varepsilon \in C[0,T]$ und $t \in [0,T]$ definiert, wobei $a > 0$ eine Konstante und ν eine gegebene nicht fallende Verteilungsfunktion ist, $\nu(+\infty) = -a$. In der Arbeit [3] wurde vorausgesetzt, dass a und ν auch von der Raumkoordinate x abhängen dürfen. Ein typisches Beispiel wäre die stückweise konstante Abhängigkeit, die einem laminierten Material mit unterschiedlichen Schichtdichten und Materialeigenschaften (z. B. Elastizitätskonstanten und Fließgrenzen) entspricht. Es wurde bewiesen, dass die hyperbolische Bewegungsgleichung

$$\rho(x)\,u_{tt} - (\mathcal{P}[u_x])_x = g(x,t) \tag{4}$$

für longitudinale oder torsionale Schwingungen eines elastoplastischen Stabes mit geeigneten Anfangs- und Randbedingungen eine eindeutige starke Lösung für beliebige Funktionen $\rho(x)$ und $g(x,t)$ hat.
Die Homogenisierungsaufgabe besteht darin, eine Folge von Gleichungen vom Typ (4) zu betrachten, mit räumlich periodischen Materialdaten $\rho^\eta(x)$, $v^\eta(x,r)$ in der Form

$$\rho^\eta(x) = \rho^1(\frac{x}{\eta}), \; v^\eta(x,r) = v^1(\frac{x}{\eta}, r), \tag{5}$$

$\rho^1(y) = \rho^1(y+1)$, $v^1(y,r) = v^1(y+1,r)$ für jedes $y \in \mathbb{R}$ und $r > 0$, mit der Absicht, η gegen null konvergieren zu lassen. Es wurde gezeigt, dass die entsprechende Lösungsfolge u^η stark konvergiert, und eine explizite Formel für den Grenzoperator $\mathcal{P}$ vom Prandtl-Ishlinskii-Typ wurde hergeleitet, so dass die Grenzfunktion eine Grenzgleichung der Form (4) erfüllt.

c) Dissipationseigenschaften einer nichtlinearen Erweiterung des Prandtl-Ishlinskii-Modells (das so genannte *Preisach-Modell*) wurden in der Arbeit [4] weiter untersucht. Als Modellbeispiel wurde die Gleichung

$$\ddot{w} + u = \psi(t), \quad w = u + \mathcal{W}[u], \tag{6}$$

mit einem Preisach-Operator $\mathcal{W}$ und einer beschränkten äußeren Kraft $\psi(t)$ betrachtet, die die Schwingungen eines nichtlinearen elastoplastischen oder eines ferromagnetischen Oszillators beschreibt, wobei die Hysterese die einzige Dissipationsquelle ist. Eine explizite asymptotische Bilanzbedingung zwischen der Energiezufuhr (dargestellt durch die rechte Seite ψ) und der hysteretischen Energiedissipation wurde hergeleitet, die entscheidet, ob jede Lösung global beschränkt bleibt, oder ob Resonanzlösungen existieren können.

d) Die numerische Lösung von Gleichung (4) für $\rho(x) \equiv 1$ mit verschiedenen Randbedingungen wird in [5] untersucht. Dabei wird ein implizites Finite-Differenzen-Schema mit Gedächtnis verwendet. Es wird vorausgesetzt, dass zu dem Hysterese-Operator $\mathcal{P}$ aus Gleichung (4) eine Familie von approximierenden Hysterese-Operatoren $\mathcal{P}^\delta$, $\delta \geq 0$, existiert, die zwei verschiedene Monotonie- und eine Lipschitz-Bedingung sowie eine Bedingung an die Form der Hysterese-Schleifen erfüllt, wobei der Approximationsfehler linear von δ abhängt. Diese Bedingungen werden insbesondere von dem in der Gleichung (3) definierten Hysterese-Operator erfüllt. Unter den genannten Voraussetzungen wurden die Existenz und Eindeutigkeit der numerischen Lösung, falls das Verhältnis der Zeit- zur Ortsschrittweite hinreichend klein ist, sowie die Konvergenz des numerischen Verfahrens und eine Fehlerabschätzung der Ordnung $1/2$ bewiesen.

Literatur

1. P. Drábek, P. Krejčí, P. Takáč, *Nonlinear Differential Equations*, Research Notes in Mathematics, **404**, Chapman & Hall/CRC, London, 1999.

2. P. Krejčí, *A remark on the local Lipschitz continuity of vector hysteresis operators*, erscheint in: Appl. Math., **45** (2000).

3. J. Franců, P. Krejčí, *Homogenization of scalar wave equations with hysteresis*, Contin. Mech. Thermodyn., **11** (1999), pp. 371–391.

4. P. Krejčí, *Resonance in Preisach systems*, erscheint in: Appl. Math., **45** (2000).

5. M. Siegfanz, *Die eindimensionale Wellengleichung mit Hysterese*, Dissertation, in Vorbereitung.

Existenz und Optimierung nichtglatter Bögen

Bearbeiter: J. Sprekels, D. Tiba

Kooperation: A. Ignat (Universität Iaşi, Rumänien)

Die Untersuchungen befassten sich mit der Modellierung der Deformation eines beidseitig eingespannten Bogens der Dicke $\sqrt{\varepsilon}$, der durch eine Kurve $\varphi : [0,1] \to \mathbb{R}^2$ beschrieben wird. Sind $(f_1, f_2) \in (L^2(0,1))^2$ die am Bogen angreifende Kraft und c die Krümmung des Bogens, so führt (in lokalen Koordinaten) das *Kirchhoff-Love-Modell* (Verwendung des Dirichlet-Prinzips) auf die Variationsaufgabe

$$\begin{aligned} &\int_0^1 \Big(\varepsilon^{-1}(v_1' - c v_2)(u_1' - c u_2) + (v_2' + c v_1)'(u_2' + c u_1)'\Big)\, ds \\ = &\int_0^1 (f_1 u_1 + f_2 u_2)\, ds \quad \forall u_1 \in H_0^1(0,1) \quad \forall u_2 \in H_0^2(0,1). \end{aligned} \tag{1}$$

Die Unbekannten v_1, v_2 stellen dabei die tangentiale bzw. normale Verschiebung des Bogens dar, d. h. es gilt $\vec{v} = (v_1, v_2) = v_1 \vec{t} + v_2 \vec{n}$, wobei $\vec{t}$ der Tangenteneinheitsvektor und $\vec{n}$ der Normaleneinheitsvektor sind.

Damit (1) sinnvoll ist, wurde bisher üblicherweise in der Literatur (vgl. z. B. [1], [2]) angenommen, dass $c \in W^{1,\infty}(0,1)$, d. h. $\varphi \in (W^{3,\infty}(0,1))^2$, gilt. Unter dieser Annahme erhält man eindeutige Lösbarkeit.

Durch diese hohe Glattheitsforderung konnten bisher praktisch wichtige Fälle, wie z. B. gothische Bögen, nicht behandelt werden. Es ist ein Ziel der Untersuchungen, diese Einschränkung zu überwinden. Hierzu wurde eine neue variationelle Formulierung hergeleitet, die auf Methoden der optimalen Steuerung beruht und auch für den Fall $\varphi \in W^{1,\infty}(0,1)$, d. h. für Bögen mit Ecken, anwendbar ist.

Es seien dazu $g_1 := \varepsilon \ell$ und $g_2 \in H^3(0,1) \cap H_0^1(0,1)$ die eindeutige Lösung der Zweipunktrandwertaufgabe

$$-g_2'' = h \quad \text{in } (0,1), \quad g_2(0) = g_2(1) = 0, \tag{2}$$

wobei sich ℓ und h aus der Anfangswertaufgabe

$$-\ell' - c h = f_1, \quad c\ell - h' = f_2, \quad \text{in } (0,1), \quad \ell(0) = h(0) = 0 \tag{3}$$

bestimmen. Wir betrachten dann das folgende unrestringierte Problem der optimalen Steuerung:

Finde $(u, z; v_1, v_2) \in L^2(0,1) \times H_0^1(0,1) \times H_0^1(0,1) \times H_0^1(0,1)$ mit **(P)**

$$\frac{1}{2\varepsilon} \int_0^1 u^2\, ds + \frac{1}{2} \int_0^1 |z'|^2\, ds = \min.,$$

unter der Zustandsgleichung

$$c v_1 + v_2' = z + g_2, \quad v_1' - c v_2 = u + g_1, \quad \text{in } (0,1), \quad v_1(0) = v_2(0) = 0 \tag{4}$$

und der Endbedingung

$$v_1(1) = v_2(1) = 0. \tag{5}$$

Es lässt sich zeigen, dass im Falle $c \in W^{1,\infty}(0,1)$ für jede Lösung $(u,z;v_1,v_2)$ von **(P)** gilt, dass (v_1,v_2) Lösung von (1) ist und umgekehrt.

Es stellt sich nun heraus, dass das zu **(P)** duale Problem *endlich-dimensional* ist und eine vollständige Lösung zulässt. Hieraus erhält man dann sogar *explizite* Lösungen für die Deformation Lipschitz-stetiger Bögen.

Ferner ergibt sich Folgendes: Schreibt man die notwendigen Optimalitätsbedingungen für **(P)** (oder für das duale Problem) in Form des Pontryagin'schen Maximum-Prinzips, so erhält man eine spezielle *Dekomposition von* (1) in ein System von Differentialgleichungen erster Ordnung mit Zweipunkt-Randbedingungen. In dieser Hinsicht stellt der neue Ansatz eine Fortsetzung der von Sprekels und Tiba (vgl. [3 , 4 , 5]) entwickelten Ideen für Platten und Stäbe dar.

Als weitere Aufgabenstellungen wurden Probleme der *Shape Optimierung* für (1) untersucht. Hierbei sind φ (oder c) so zu bestimmen, dass für ein gegebenes Kräftepaar (f_1,f_2) die resultierende Deformation bestimmte gewünschte Eigenschaften besitzt. Ein typisches Beispiel ist es, die Deformation v_2 in Normalenrichtung im Sinne der $L^2(0,1)$ - Norm zu minimieren. Es ist im Berichtszeitraum gelungen, die Existenz einer Lösung dieses nichtkonvexen Optimierungsproblems für Lipschitz-stetige Bögen nachzuweisen und die notwendigen Optimalitätsbedingungen erster Ordnung herzuleiten.

Die theoretischen Resultate und die Ergebnisse erster numerischer Tests sind in [6] dokumentiert.

Literatur

1. PH. CIARLET, *The Finite element method for elliptic problems*, North-Holland, Amsterdam, 1978.

2. D. CHENAIS, J.-C. PAUMIER, *On the locking phenomenon for a class of elliptic problems*, Numer. Math., **67** (1994), pp. 427–440.

3. J. SPREKELS, D. TIBA, *A duality-type method for the design of beams*, Adv. Math. Sci. Appl., **9** (1999), pp. 89–102.

4. ——, *On the approximation and optimization of fourth order elliptic problems*, in: Intern. Ser. Numer. Math., Vol. **133**, Birkhäuser Verlag, Basel, 1999, pp. 277–286.

5. ——, *A duality approach in the optimization of beams and plates*, SIAM J. Control Optimiz., **37** (1998/99), pp. 486–501.

6. ——, *Sur les arches lipschitziennes*, WIAS-Preprint No. 550, 2000.

4.2 Forschungsgruppe Dynamische Systeme

4.2.1 Zusammenfassung

Im Mittelpunkt der Arbeit der Forschungsgruppe steht die Entwicklung analytischer und numerischer Methoden zur Analyse, Simulation und Steuerung dynamischer Systeme sowie deren Anwendung auf konkrete Probleme optischer Kommunikationssysteme und der Reaktionskinetik. Die Schwerpunkte der Forschung lagen dabei auf folgenden Gebieten:

- Modellierung, Analysis und Numerik der Dynamik von Mehrsektions-Halbleiterlasern mit dispersivem Feedback,
- Komplexe Dynamik von Systemen gewöhnlicher Differentialgleichungen,
- Dynamik und Stabilität in Mehrskalensystemen,
- Attraktoren von Reaktions-Diffusions-Systemen.

Im Berichtszeitraum konnten wesentliche Beiträge auf den genannten Gebieten erzielt werden (siehe Publikationsliste). Da die personelle Ausstattung der Gruppe stark reduziert wurde, gelang dies nur durch eine enge interdisziplinäre nationale und internationale Kooperation. Dabei spielt das Laserseminar, das in Zusammenarbeit mit der Humboldt-Universität und dem Heinrich-Hertz-Institut veranstaltet wird, eine besondere Rolle. Die durchgeführten Arbeiten wurden z. T. durch DFG, DAAD und ein EU-Projekt gefördert.

4.2.2 Projekte

Dynamik von Halbleiterlasern

Bearbeiter: M. Radziunas, J. Sieber, K. R. Schneider, D. Turaev, M. Wolfrum, F. Jochmann

Kooperation: V. Tronciu (Technische Universität Moldawien), H.-P. Nolting, B. Sartorius, D. Hoffmann (Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik (HHI) Berlin), H.-J. Wünsche (Institut für Physik, HU Berlin), L. Recke (Institut für Mathematik, HU Berlin), H. Wenzel (Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik, Berlin)

Die Untersuchung von nichtlinearen dynamischen Effekten in DFB-Halbleiterlasern ist ein zentrales, längerfristiges Projekt der Forschungsgruppe. Bearbeitet wird dabei ein breites Spektrum von Fragestellungen, das sowohl das grundlegende mathematische Verständnis der auftretenden Modelle, die problemangepasste Modellierung als auch die Simulation und Optimierung bei der Entwicklung von konkreten Bauelementen betrifft, die von den Kooperationspartnern am HHI durchgeführt wird. Dort wird versucht, kompliziertes nichtlineares Verhalten (Synchronisation, hochfrequente Selbstpulsation, schnelles Schalten) von DFB-Mehrsektionslasern für den Einsatz in Bauelementen zur rein optischen Datenverarbeitung und Signalregeneration nutzbar und beherrschbar zu machen. Ausgangspunkt für unsere Untersuchungen zur zeitlichen Dynamik von DFB-Mehrsektionslasern sind die folgenden Modellgleichungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= H(\beta(n))\psi, \\ \frac{\partial n}{\partial t} &= f(n, |\psi|^2). \end{aligned} \tag{1}$$

Dabei beschreibt der komplexe Vektor $\psi \equiv (\psi^+(t,z), \psi^-(t,z))$ das longitudinale zeitliche Verhalten der vorwärts- bzw. rückwärtslaufenden optischen Welle; der lineare hyperbolische Operator $H(\beta(n))$ modelliert die Wellenausbreitung, Lichtverstärkung und interne Kopplung am Bragg-Gitter. Die Ladungsträger $n(t,z)$ sind nichtlinear an das optische Feld gekoppelt und können sowohl gemittelt über einzelne Sektionen als auch räumlich aufgelöst betrachtet werden. Die Reflexion an den Facetten des Lasers sowie ein möglicher optischer Input $a(t)$ werden durch geeignete Randbedingungen der Gestalt

$$\psi^+(t,0) = r_0\psi^-(t,0); \;\; \psi^-(t,1) = r_1\psi^+(t,1) + a(t) \tag{2}$$

berücksichtigt, wobei r_0 und r_1 komplexe Reflexionskoeffizienten sind.
Bezüglich der Modellgleichungen (1), (2) wurden folgende Untersuchungen durchgeführt:

- Analytische Untersuchungen zur Existenz, Eindeutigkeit und Wohlgestelltheit von Anfangs-Randwertproblemen ([2]) und zum Spektralverhalten des Operators H ([5]),
- Modellreduktion und Modenapproximation,
- Simulation und Optimierung von Halbleiterlaser-Bauelementen.

Im Folgenden werden die erhaltenen Resultate kurz beschrieben.

Lösbarkeit des Anfangs-Randwertproblems für die Modellgleichungen (1), (2).
Das hyperbolische Gleichungssystem (1) wurde bisher nur mit sektionsweise gemittelten Ladungsträgerdichten analytisch auf seine Lösbarkeit untersucht. Mathematisch bewirkt dieser Mittelungsprozess eine erhebliche Vereinfachung des Existenzbeweises für eine Lösung.
Gegenstand der analytischen Untersuchungen waren Systeme (1), (2), bei denen auch zeitlich unstetige optische Inputs $a(t)$ und Ströme $I(t)$ zugelassen werden. Dies macht es erforderlich, ein geeignetes Konzept schwacher Lösungen einzuführen. Diese Lösungen erfüllen die zu (1) gehörende Integralgleichung nur im schwachen Sinne und die zweite Randbedingung in (2) nur in der aufintegrierten Form:

$$\int_0^t \psi^-(s,1)ds = r_1 \int_0^t \psi^+(s,1)ds + \int_0^t a(s)ds.$$

In [2] wurden Untersuchungen zur Existenz, Eindeutigkeit und Abschätzung schwacher Lösungen durchgeführt. Dabei wird insbesondere ein Existenzsatz für schwache Lösungen linearer inhomogener Evolutionsgleichungen bewiesen, der auch auf andere Rand-Anfangswertprobleme anwendbar ist. Im autonomen Fall werden Regularitätseigenschaften gezeigt, welche grundlegend für spätere Untersuchungen zur Langzeitasymptotik und zur Stabilität sind.

Qualitative Untersuchungen zur Modellreduktion.
Das Differentialgleichungssystem (1) wurde in der folgenden abstrakten Form untersucht:

$$\begin{aligned} \dot{\psi} &= H(\beta(n))\psi, \\ \dot{n}_i &= \varepsilon F_i(n) - \psi^\top G_i(n)\psi^*, \; i = 1,\ldots,k. \end{aligned} \tag{3}$$

Dabei ist $\psi \in C^p$ ein komplexer Vektor, $n = (n_1,\ldots,n_k) \in R^k$ ein reeller Vektor und ε ein kleiner Parameter; die Matrizen $G_i(n)$ sind hermitesch und positiv definit. Diese Gleichungen können als abstrakte Lasergleichungen mit linearer Optik, etwa im Sinne einer Galerkin-Approximation von (1), angesehen werden. Für (3) wurde gezeigt, dass alle Lösungen, deren Ausgangsleistung durch $|\psi|^2 \approx \varepsilon$ charakterisiert wird, die also vergleichbar mit der der stationären Lösung sind, in einer kleinen Umgebung einer kritischen Fläche liegen, deren n-Koordinate die Eigenschaft aufweist, dass $H(\beta(n))$ mindestens einen Eigenwert auf der imaginären Achse besitzt. Aus Stabilitätsgründen konzentrieren wir uns nur auf den Teil der kritischen Fläche, wir bezeichnen sie als Schwellenfläche, wo $H(\beta(n))$ keine Eigenwerte mit positivem Realteil besitzt. Falls m die Anzahl der Eigenwerte auf der imaginären Achse darstellt, wird die Existenz einer attrahierenden $(2m+k)$-dimensionalen invarianten Mannigfaltigkeit in der Nähe der Schwellenfläche gezeigt, d. h. nur m Komponenten von ψ können in diesem Fall essentiell von null verschieden sein. Im Allgemeinen ist die Anzahl m der kritischen Moden klein, so dass das erwähnte Resultat die Modellierung von Lasergleichungen mit nur einer geringen Anzahl von optischen Moden rechtfertigt. Im generischen Fall ist $m = 1$, und wir können zeigen, dass die Existenz von Parameterregimen mit Selbstpulsationen hier sehr unwahrscheinlich ist (das entsprechende Parametergebiet ist von der Größenordnung ε). Es konnte weiterhin nachgewiesen werden, dass mit mehreren kritischen Moden $(m = 2)$, oder wenn ein einzelner kritischer Eigenwert die imaginäre Achse nicht generisch kreuzt, wesentlich bessere Aussichten für das Auftreten von Selbstpulsationen bestehen, da in diesem Fall das entsprechende Gebiet im Parameterraum von der Größenordnung $\varepsilon^{1/3}$ ist ([6]).

Modellierung des passiven dispersiven Reflektors im Rahmen der Einmodenapproximation. Betrachtet man Laser mit nur einer aktiven Sektion und reduziert das System (1) auf die dominante Mode von $H(\beta(n))$, so erhält man ein reelles zweidimensionales System gewöhnlicher Differentialgleichungen

$$\frac{dp}{dt} = TG(n)p, \tag{4}$$
$$\frac{dn}{dt} = I - n - (1+n)K(n)p \tag{5}$$

für die skalierte optische Leistung p der ausgewählten Mode und die skalierte gemittelte Ladungsträgerdichte n in der aktiven Sektion (die Schwelldichte wurde in den Ursprung verschoben, so dass $G(0) = 0$ gilt). Die Eigenschaften der als dispersiver Reflektor agierenden passiven Lasersektion gehen in dieses System nur durch die Funktionen $G(n)$ und $K(n)$ ein. Im Einsektionslaser gilt $G(n) = n$ und $K(n) = 1$.
Der dispersive Reflektor bewirkt typischerweise eine Lorentz-artige Resonanz in K und eine Änderung α des Anstiegs von $G(n)$ in 0. Dieser Zugang gestattet, die Dynamik im System (4), (5) in Abhängigkeit von α sowie der Position n_0 und der Höhe A der Resonanz von $K(n)$ (siehe Bilder auf der linken Seite in Abb. 1) zu untersuchen (siehe [1]). Die Resultate der numerischen Bifurkationsanalyse sind im Bifurkationsdiagramm im rechten Bild in Abb. 1 dargestellt.

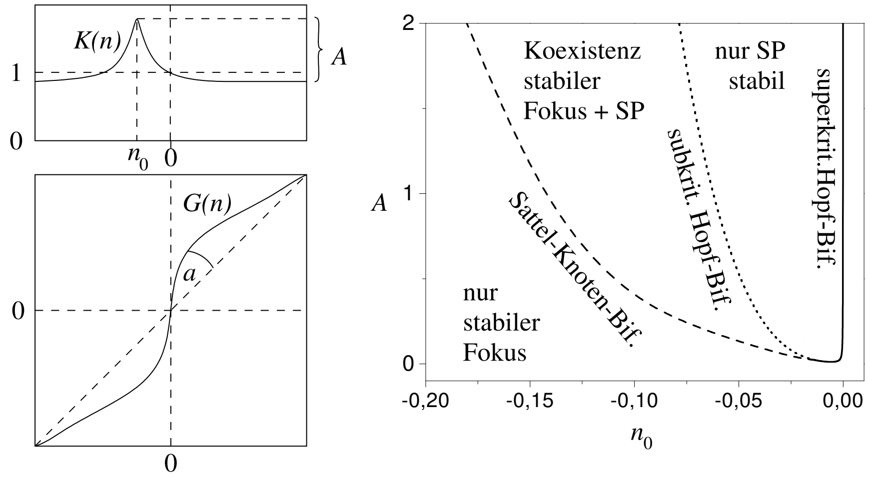


Abb. 1: Darstellung der Funktionen $K(n)$ und $G(n)$ (links) und des Bifurkationsdiagrammes zu (4), (5) mit den Angaben zu den Grenzmengen (rechts).

Die dargestellten Bifurkationsszenarien wurden auch in den Simulationen des Modells (1) beobachtet (siehe Jahresforschungsbericht 1998[1]).
Weiteres Ziel der Untersuchungen war die Frequenz der Selbstpulsationen. Es wurde festgestellt, dass diese Frequenz nicht nur durch den Pumpstrom (siehe Jahresforschungsbericht 1998[2]), sondern auch durch α erhöht werden kann.

Numerische Simulation von 3-Sektionslasern.
Hauptgegenstand unserer Modellierung sind Laser, die aus zwei DFB-Sektionen (Gainsektion, Reflektorsektion) und einer Fabry-Perot-Sektion (Phasensektion) bestehen. Die Reflektorsektion wird so gepumpt, dass sie im Wesentlichen als passiver Reflektor dient. Eine geeignete Wahl des Pumpstromes in der Phasensektion führt zu DQS-Selbstpulsationen des Lasers. Das Ziel der

[1]http://www.wias-berlin.de/publications/annual_reports/1998/node33.html
[2]http://www.wias-berlin.de/publications/annual_reports/1998/node33.html

numerischen Untersuchungen besteht darin, durch geeignete Wahl der Laser-Parameter robuste DQS-Selbstpulsationen mit hoher Frequenz zu erzielen.

a. Modellvereinfachungen.
Das im Folgenden verwendete Modell erhalten wir aus (1), (2), indem wir für $\beta(n)$ in den einzelnen Sektionen die folgenden Ausdrücke verwenden:

$$\beta_l(n) = \delta - i(\alpha/2) + 0.5(i+\alpha_H)g'(n-n_{tr}), \quad \beta_p = \varphi/2|L_p| - \alpha_p/2; \quad \beta_r = -i\alpha_r/2. \tag{6}$$

Dabei bedeutet $|L_p|$ die Länge der Phasensektion, α beschreibt den Verlust in den einzelnen Sektionen, n stellt die räumlich gemittelte Ladungsträgerdichte in der Gainsektion dar.
Dieses vereinfachte Modell vernachlässigt die Dynamik der Ladungsträger in Phasensteuerungs- und Reflektorsektion, sie dienen als passiver dispersiver Reflektor (PDR) für die Gainsektion.
Die numerischen Resultate der nächsten Abschnitte wurden sowohl für das vollständige als auch für das PDR-Modell erhalten.

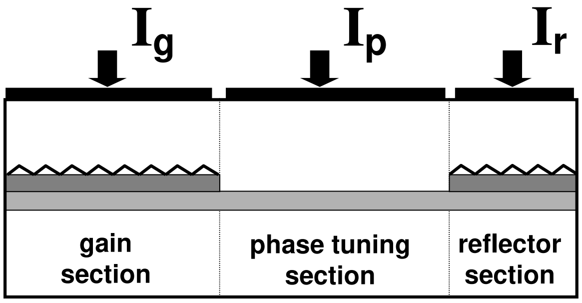


Abb. 2: Laser mit zwei DFB-Sektionen und einer integrierten Phasensteuerungssektion.

b. Anschalten der Selbstpulsation durch Variation der Phasenbedingung.
Um Selbstpulsationen zu erhalten, muss die folgende relative Lage der Reflexionsspektren von Gain- (durchgezogene Kurve) und Reflektorsektionen (punktierte Kurve) durch geeignete Wahl des Detuning δ (siehe linkes Bild in Abb. 3) erhalten werden.

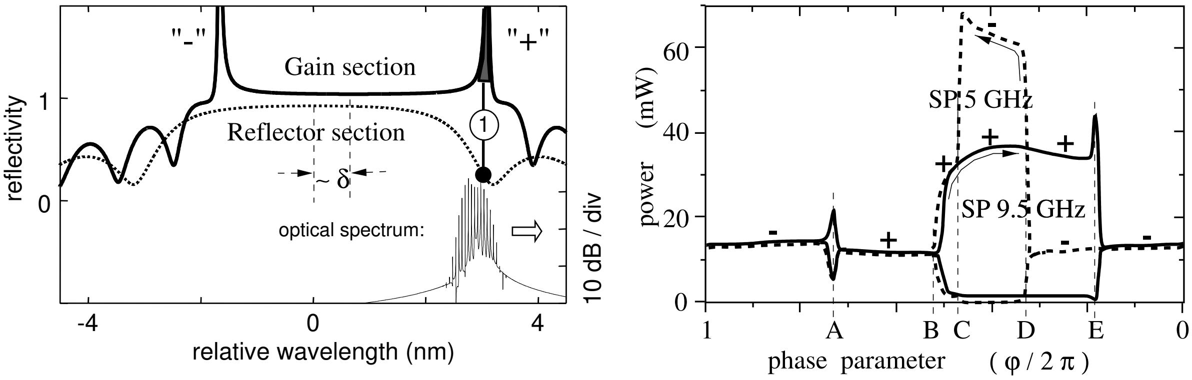


Abb. 3: Typische Reflektionsspektren der DFB-Sektionen und die Spektren des optischen Outputs bei Selbstpulsation (linkes Bild), Output-Leistung bei variierender Phasenbedingung (rechtes Bild).

Die dünne durchgezogene Linie im linken Bild stellt das optische Spektrum des Outputs an der Facette der Lasersektion dar. Die Zeichen „+“ und „-“ markieren, ob die langwellige oder die kurzwellige DFB-Mode der Gainsektion dominant ist. Wie im Bild gezeigt, muss die „+“-Mode mit einer abklingenden Flanke des Spektrums der Reflektorsektion übereinstimmen.

In diesem Fall kann durch Anpassen des Phasenparameters φ eine Selbstpulsation gefunden werden, wie im rechten Bild von Abb. 3 zu sehen ist. Die durchgezogene Linie (φ von 0 nach 2π variiert) und die gestrichelte Linie (φ von 2π nach 0 variiert) stellen entweder den stationären Output oder Maximum und Minimum während einer Periode der Selbstpulsation dar. In allen Fällen, ausgenommen der Punkt A, ist eine Mode deutlich dominant. „+“ bzw. „-“ über den Linien markieren, ob die langwellige oder die kurzwellige Mode der Gainsektion aktiv ist. Das große Intervall ($\varphi/2\pi \in [B,E]$) mit DQS-Selbstpulsationen wird für fallendes φ (im Bild von links nach rechts) beobachtet. Das entspricht steigendem Pumpstrom in der Phasensteuerungssektion. Bei steigendem φ beobachten wir DQS-Selbstpulsationen nur im Intervall $\varphi/2\pi \in [C,B]$. Gleichzeitig treten DQS-Selbstpulsationen eines anderen Typs auf der „-“-Mode im Intervall $\varphi/2\pi \in [D,C]$ auf. Dieses Verhalten der Lösung wird dadurch erklärt, dass die „-“-Mode starkes Feedback vom Reflektor (siehe linkes Bild in Abb. 3) bekommt.

c. Robustere Selbstpulsationen durch verstimmte Gitter.

Zu diesem Zweck führen wir die statische Verstimmung δ zwischen den beiden DFB-Gittern als Design-Parameter ein (siehe [4]). Dieses Herangehen ist durch die Beobachtung motiviert, dass die nicht pulsierende „-“-Mode (Bild links in Abb. 3) ein stärkeres Feedback von der Reflektorsektion erhält als die pulsierende „+“-Mode. Wir erwarten, dass das Parametergebiet, in dem Selbstpulsationen auftreten, durch Verminderung des Feedbacks für die nicht pulsierende Mode, z. B. durch geeignete Gitterverstimmung, vergrößert wird. Um diese Hypothese zu überprüfen, wurde der Verstimmungsparameter δ über einen 15 nm großen Bereich variiert. Für jedes δ wurde der Phasenwinkel φ abwärts geändert, von 2π bis 0. Die Regionen mit DQS-Selbstpulsationen sind im oberen Bild von Abb. 4 als weiße Inseln mit dicken

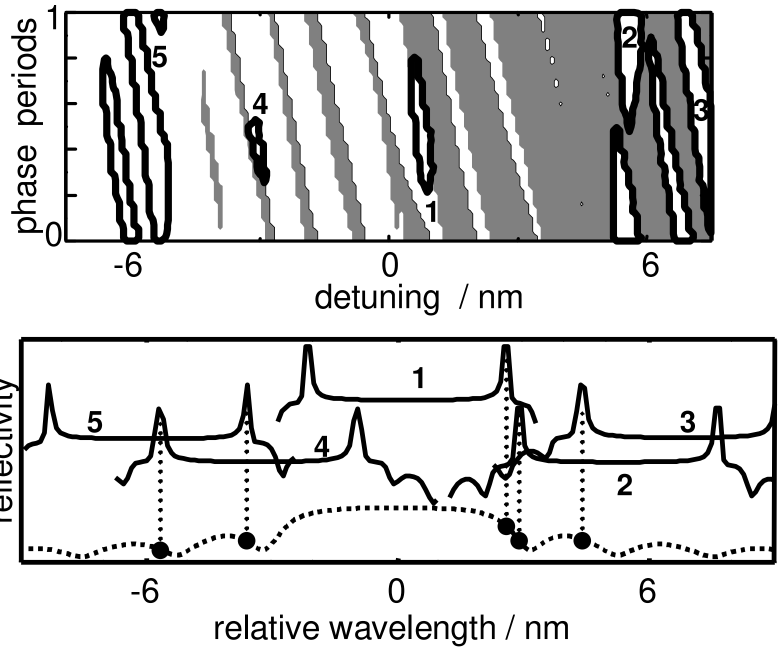


Abb. 4: Verschiedene Pulsationsregionen der Ebene Verstimmung–Phasenbedingung (oben) und die Feedback-Spektren der DFB-Sektionen für verschiedene Werte von δ_g (unten).

schwarzen Rändern eingezeichnet. Insel 1 in der Mitte und die Selbstpulsationen darin entsprechen der Situation in Abb. 3. Graue und weiße Gebiete außerhalb der Inseln zeigen an, ob die kurzwellige oder die langwellige Mode aktiv ist.

Der untere Teil von Abb. 4 stellt die Feedback-Spektren der Reflektorsektion (gepunktet)

und der Gainsektion (durchgezogen) für die verschiedenen zu Pulsationsinseln gehörenden Verstimmungen dar. Die gestrichelten vertikalen Linien zeigen an, welche der DFB-Moden der Gainsektion jeweils aktiv ist.
Bemerkenswert ist, dass es Phasenparameter gibt, für die die Gainsektionsmode mit betragsmäßig deutlich kleinerem Feedback dominiert. Im oberen Teil des Bildes erkennt man die Sprünge zur Mode mit kleinerem Feedback als schmale Streifen (Wechsel zwischen grau und weiß) im Bereich mit moderatem Detuning. Bei großem Detuning, d. h. dort, wo diese Modensprünge vollständig verschwinden, wurden, wie erwartet, neue große Selbstpulsationsinseln entdeckt.

Literatur

1. V. TRONCIU, H.-J. WÜNSCHE, J. SIEBER, K. R. SCHNEIDER, F. HENNEBERGER, *On the dynamics of single mode lasers with passive dispersive reflector*, WIAS-Preprint No. 541, 1999.

2. F. JOCHMANN, L. RECKE, *Existence and uniqueness of weak solutions of an initial boundary value problem arising in laser dynamics*, WIAS-Preprint No. 515, 1999.

3. M. RADZIUNAS, H.-J. WÜNSCHE, B. SARTORIUS, O. BROX, D. HOFFMANN, K. R. SCHNEIDER, *Modeling of self-pulsating DFB lasers*, WIAS-Preprint No. 516, 1999.

4. M. RADZIUNAS, H.-J. WÜNSCHE, B. SARTORIUS, H.-P. NOLTING, K. R. SCHNEIDER, O. BROX, D. HOFFMANN, *Modeling of new grating designs for self-pulsating DFB lasers.* in: Integrated Photonics Research, OSA Technical Digest, Optical Society of America, Washington DC, 1999, pp. 358–360.

5. L. RECKE, K. R. SCHNEIDER, V. V. STRYGIN, *Spectral properties of coupled wave operators*, Z. Angew. Math. Phys., **50** (1999), pp. 925–933.

6. D. TURAEV, *Notes about laser models*, in Vorbereitung.

Mehrskalensysteme

Bearbeiter: K. R. Schneider

Teilprojekt 1: Stabilitätswechsel in Mehrskalensystemen

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

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

Der zeitliche Verlauf der Reaktionsrate von schnellen bimolekularen Reaktionen in homogenen Medien kann unter gewissen Bedingungen ein sprungartiges Verhalten aufweisen. Wie aus unseren Untersuchungen folgt, treten die Sprünge genau dann auf, wenn bei den zugehörigen assoziierten Systemen ein Stabilitätswechsel vorliegt. Im Berichtsjahr wurde die Frage nach einem räumlichen Sprungverhalten der stationären Reaktionsrate einer schnellen bimolekularen Reaktion in einem räumlich inhomogenen System untersucht. Zu diesem Zweck wurde das folgende Dirichlet-Problem betrachtet:

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 \Delta u &= f(u,x,\varepsilon), \quad x \in D \subset \mathbb{R}^2, \\ \frac{\partial u}{\partial n} &= \lambda(x) u \quad \text{für} \quad x \in \Gamma. \end{aligned} \tag{1}$$

Dabei ist D ein offenes, beschränktes, einfach zusammenhängendes Gebiet mit glattem Rand Γ, ε ist ein kleiner positiver Parameter, und $\partial/\partial n$ bedeutet die Ableitung in Richtung der inneren Normalen von Γ. Wir nehmen an, dass das ausgeartete Problem $f(u,x,0) = 0$ zwei Lösungen $x = \varphi_1(x)$ und $x = \varphi_2(x)$ besitzt, die sich in einer glatten geschlossenen Jordankurve $\mathcal{C}$ schneiden, die ganz in D liegt, so dass für $i = 1,2$ die Funktionen $f_u(\varphi_i(x),x,0)$ auf $\mathcal{C}$ ihr Vorzeichen wechseln. Diese Annahme ist mit einem Stabilitätswechsel der Equilibria des zugehörigen assoziierten Systems identisch und kann nicht im Rahmen der Standard-Theorie singulär gestörter elliptischer Systeme behandelt werden. Unter Verwendung der so genannten „zusammengesetzten stabilen Lösung“ des ausgearteten Systems, die aus $\varphi_1(x)$ und $\varphi_2(x)$ besteht, werden asymptotische Ober- und Unterlösungen $\beta(x,\varepsilon)$ und $\alpha(x,\varepsilon)$ konstruiert. Daraus folgt, dass (1) wenigstens eine Lösung besitzt, die der Bedingung $\alpha(x,\varepsilon) \leq \mu(x,\varepsilon) \leq \beta(x,\varepsilon)$ genügt und somit der zusammengesetzten stabilen Lösung benachbart ist. Bezeichnen wir mit D_δ eine δ-Umgebung von $\mathcal{C}$, wobei δ eine beliebig kleine positive Zahl ist, dann genügen $\alpha(x,\varepsilon)$ und $\beta(x,\varepsilon)$ der Bedingung

$$\beta(x,\varepsilon) - \alpha(x,\varepsilon) = \begin{cases} O(\sqrt{\varepsilon}) & \text{für} \quad x \in D_\delta, \\ O(\varepsilon) & \text{für} \quad x \in \bar{D} \backslash D_\delta. \end{cases}$$

Daraus folgt, dass im Übergangsbereich von $\varphi_1(x)$ zu $\varphi_2(x)$ die Lösung $u(x,\varepsilon)$ weniger gut durch $\alpha(x,\varepsilon)$ und $\beta(x,\varepsilon)$ approximiert wird. Durch Anwendung dieses Resultates auf spezielle Reaktionssysteme in einem nichthomogenen Medium kann gezeigt werden, dass die Reaktionsrate räumliche Sprünge aufweist.

Literatur

1. V. F. BUTUZOV, N. N. NEFEDOV, K. R. SCHNEIDER, *Singularly perturbed elliptic problems in the case of exchange of stabilities*, WIAS-Preprint No. 496, 1999.

Teilprojekt 2: Reduktion des Zustandsraumes von Mehrskalensystemen

Kooperation: S. Handrock-Meyer (Fakultät für Mathematik der Technischen Universität Chemnitz)

Die Modellierung chemischer Reaktionsprozesse in homogenen Medien führt im Allgemeinen auf steife Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen mit hoher Dimension. Eine traditionelle Methode zur Reduktion des Zustandsraumes ist die Quasi-Steady-State-Annahme, d. h. die zeitliche Ableitung der schnellen Variablen wird gleich null gesetzt. Dieses Verfahren erfordert eine gute Kenntnis der zugrunde liegenden chemischen Prozesse, bzw. das Differentialgleichungssystem muss die Form eines singulär gestörten Systems besitzen.
Im vorliegenden Projekt gehen wir von mathematischen Modellen der Gestalt

$$\frac{dx}{dt} = f(t,x,\lambda) \tag{1}$$

aus und entwickeln eine mathematisch fundierte Methode, die eine lokale und zeitabhängige Reduktion des Zustandsraumes gestattet, ohne die oben erwähnten Vorkenntnisse vorauszusetzen. Der Algorithmus basiert auf einer Schur-Dekomposition von Jakobi-Matrizen und einem geeigneten Splitting ihrer Spektren. Zur Rechtfertigung des Splittings, das letztlich auf eine Darstellung von (1) in Form eines singulär gestörten Systems führt, wird ein Satz über die Existenz einer invarianten Mannigfaltigkeit für singulär gestörte Systeme verwendet, der für die betrachtete Systemklasse bewiesen wird. Daneben wird ein vereinfachter Algorithmus dargestellt und auf konkrete Systeme (z. B. Belousov-Zhabotinskii-Reaktion) erfolgreich angewendet.

Literatur

1. S. HANDROCK-MEYER, K. R. SCHNEIDER, *Local state space reduction of multi-scale systems*, WIAS-Preprint No. 532, 1999.

Teilprojekt 3: Sensitivität innerer Schichten in singulär gestörten Problemen
weiterer Bearbeiter: A. Bohé

Kooperation: I. Bremer (FG 4)

Wir betrachten das Dirichlet-Problem für singulär gestörte Differentialgleichungen zweiter Ordnung

$$\begin{aligned} \varepsilon x'' &= f(t,x,x'), \qquad c < t < d, \\ x(c) &= A, \qquad x(d) = B, \end{aligned} \tag{1}$$

wobei f hinreichend glatt und ε ein hinreichend kleiner positiver Parameter ist. Wir nehmen an, dass (1) eine Lösung mit einer inneren Schicht besitzt, deren Lage nicht durch die klassische

Rankine-Hugoniot Bedingung bestimmt wird. In diesem Fall kann sich die Lage der inneren Schicht schnell ändern, falls A und B nur wenig variiert werden. Probleme dieser Art treten u. a. bei der stationären Burgers-Gleichung und bei Supersonic-Subsonic-Stößen auf.
Es wird vorausgesetzt, dass die Gleichung $f(t,x,y)=0$ im (t,x,y)-Phasenraum eine Mannigfaltigkeit S besitzt, die aus attrahierenden $(f_y<0)$ und abstoßenden $(f_y>0)$ Teilmannigfaltigkeiten besteht. Unter Verwendung der Theorie invarianter Mannigfaltigkeiten und von Methoden der Nichtstandard-Analysis wird das Problem der supersensitiven Abhängigkeit der inneren Schicht von den Randdaten untersucht. Es wird ein Verfahren zur Berechnung asymptotischer Entwicklungen in ε sowohl der Lösung als auch der Randdaten abgebildet und mittels MAPLE implementiert. Die Anwendung auf das Beispiel $f(t,x,x')=-2xx'+e^t,\ x(0)=-1,\ x(1)=B\simeq\sqrt{e}$ liefern die in Abb. 1 dargestellten Resultate.

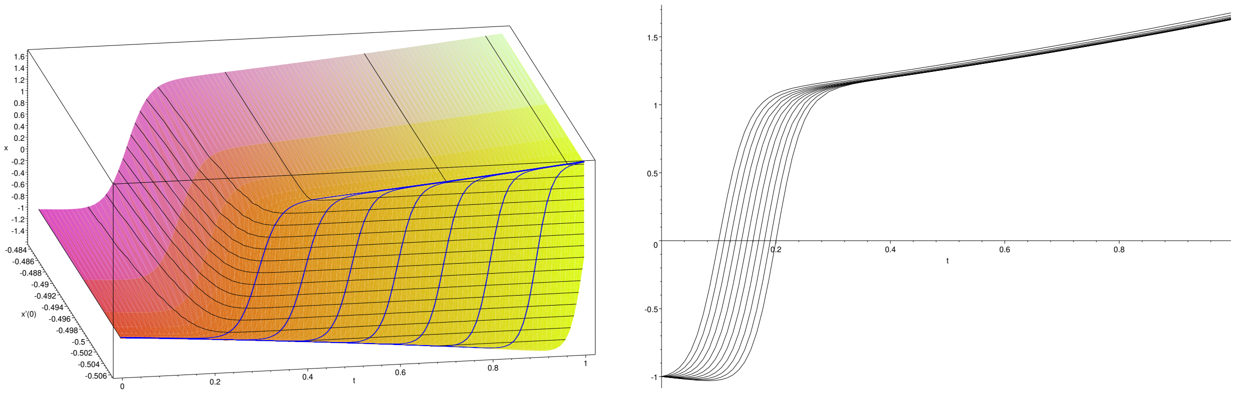


Abb. 1: Das linke Bild zeigt sieben Stoßschichten im (t,x,x')-Raum für obiges Beispiel, das rechte Bild stellt interne Schichten dar, die für elf Werte von B berechnet wurden, die sich nur sehr wenig von $\sqrt{e}$ unterscheiden.

Für den autonomen Fall

$$\varepsilon x''=(g(x)+\delta)f(x') \tag{2}$$

werden Bedingungen über das Verhalten von f für große Werte von x abgeleitet, so dass (2) entweder eine algebraische oder eine exponentielle Sensitivität der inneren Schicht gegenüber Änderungen der Dirichlet-Daten aufweist.

Literatur

1. A. BOHÉ, *Free layers in a singularly perturbed boundary value problem*, SIAM J. Math. Anal., **21** (1990), pp. 1264–1280.

2. ——, *The existence of supersensitive boundary value problems*, Methods and Applications of Analysis, **3** (1996), pp. 1–17.

3. ——, *The shock location for a class of sensitive boundary value problems*, J. Math. Anal. Appl., **235** (1999), pp. 295–314.

4. ——, *Exponentially sensitive internal layers solutions of one side and their asymptotic expansions,* in Vorbereitung.

5. ——, *Supersensitive and metastable solutions for a Burgers type equation*, eingereicht.

Steuerung dynamischer Bifurkationen

Bearbeiter: N. Berglund, K. R. Schneider

Wir betrachten das nichtlineare Kontrollsystem

$$\frac{dx}{dt} = f(x,u,\lambda), \tag{1}$$

das von einem Parametervektor λ abhängt, und nehmen an, dass das unkontrollierte System

$$\frac{dx}{dt} = f(x,0,\lambda) \equiv f_0(x,\lambda) \tag{2}$$

sein qualitatives Verhalten ändert, falls λ den Bifurkationspunkt λ_0 passiert. Im Unterschied zur traditionellen Bifurkationstheorie nehmen wir an, dass der Parameter λ sich langsam mit der Zeit ändert, d. h. das ungestörte System besitzt die Gestalt

$$\frac{dx}{dt} = f_0(x,\lambda(\varepsilon t)), \tag{3}$$

wobei ε ein kleiner positiver Parameter ist. Nach einer Zeittransformation nimmt (3) die Gestalt eines singulär gestörten Systems

$$\varepsilon\,\frac{dx}{dt} = f_0(x,\lambda(\tau)) \tag{4}$$

an.
Stellt der Bifurkationspunkt λ_0 für das System (2) eine Hopf-Bifurkation dar, dann ist bekannt, dass bei der zugehörigen dynamischen Bifurkation ein verzögerter Stabilitätswechsel in (4) auftritt, der mit einem Sprungverhalten der Zustandsvariablen verbunden ist. Wird eine langsame Parameteränderung als Materialalterung interpretiert, dann kann der zu erwartende Sprung im Systemverhalten sehr unerwünschte Konsequenzen haben. Um dramatische Systemveränderungen zu vermeiden, wurde eine Feedbacksteuerung konstruiert, die den Übergang in den neuen Systemzustand glatter ablaufen lässt und somit kein Sprungverhalten zulässt. Die Konstruktion der Steuerung beruht auf einer Kodimension-4-Entfaltung des singulären Vektorfeldes $(y, -x^2y - x^3)$. Der kontrollierte Übergangsprozess wird unter Verwendung von asymptotischen Entwicklungen bezüglich des kleinen Parameters ε abgeschätzt. Einzelheiten können den angegebenen Publikationen entnommen werden.

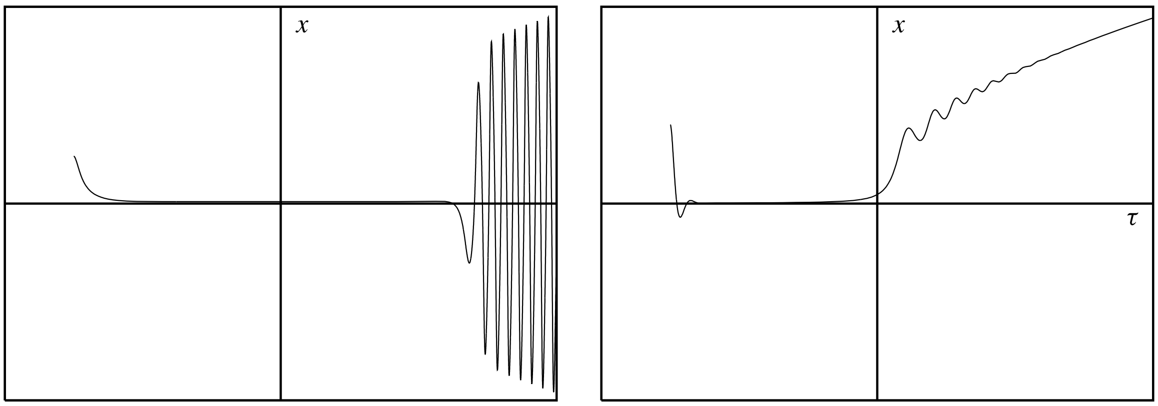


Abb. 1: Dynamische Hopf-Bifurkationen, linkes Bild: ungesteuert (sprungartiges Verhalten), rechtes Bild: gesteuert (geglätteter Übergang).

Literatur

1. N. BERGLUND, K. R. SCHNEIDER, *Control of dynamic bifurcations*, in: Stability and Stabilization of Nonlinear Systems. Lecture Notes in Control and Inform. Sci., **246** (1999), pp. 75–93.

2. N. BERGLUND, *Control of dynamic Hopf bifurcations*, Nonlinearity, **13** (2000), pp. 225–248.

Dynamische Systeme mit komplexer Verhaltensstruktur: Homokline Bifurkationen

Bearbeiter: D. Turaev

Kooperation: S. Gonchenko (Institut für Angewandte Mathematik und Kybernetik, Nizhny Novgorod, Russland), L. Lerman (Institut für Mathematik, FU Berlin)

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

Das Studium homokliner Bifurkationen liefert ein einzigartiges Werkzeug für das Verständnis nichtlokaler dynamischer Phänomene. Die Kenntnis der Struktur einer bestimmten (im Allgemeinen endlichen) Menge von ausgezeichneten Trajektorien (zu ihr gehören z. B. periodische Orbits, zu denen eine homokline Trajektorie existiert, und Gleichgewichtspunkte mit einer homoklinen Schleife) gestattet eine umfassende Beschreibung komplexer dynamischer Verhaltensweisen.
Im Berichtszeitraum wurden Untersuchungen zu folgenden Themen durchgeführt.

1. Blue-Sky-Bifurkation. 1995 wurde von D. Turaev und L. Shilnikov ein neuer Bifurkationstyp für periodische Lösungen bewiesen ([1]): In der Menge aller glatten dreidimensionalen Flüsse existiert eine Fläche der Kodimension 1, die aus Bifurkationspunkten (Blue-Sky-Bifurkation)

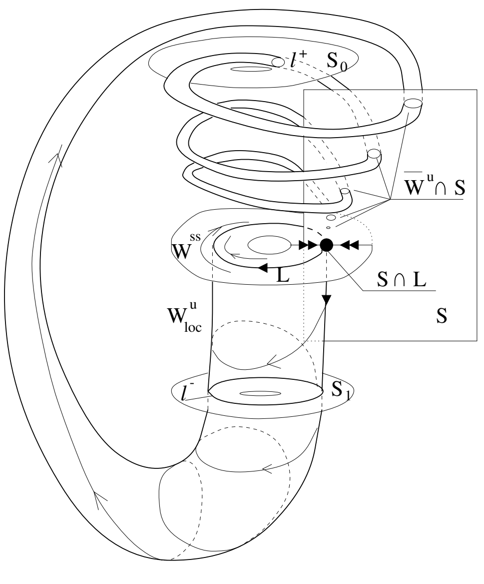


Abb. 1: Blue-Sky-Bifurkation. L ist eine periodische Lösung vom Sattel-Knoten-Typ. Der Durchschnitt der instabilen Mannigfaltigkeit W^u von L mit einem Schnitt S transversal zu L besteht aus abzählbar vielen Kreisen, der Durchschnitt von W^u mit einem Schnitt S_0 parallel zu L ist homotop zu einem Punkt.

besteht und die Eigenschaft besitzt, dass bei Annäherung an diese Fläche die Periode und die Länge einer ausgezeichneten periodischen Lösung unendlich groß werden. Dieses Resultat

wurde unter der Voraussetzung bewiesen, dass die Flüsse C^∞-glatt sind. Es konnte jetzt gezeigt werden, dass dafür C^2-Glattheit hinreichend ist ([2]). Diesem Resultat kommt unter dem Gesichtspunkt der Reduktion dynamischer Systeme auf nichtlokale invariante Mannigfaltigkeiten (z. B. inertiale Mannigfaltigkeiten) eine besondere Bedeutung zu, da bei diesem Prozess die Systeme ihre ursprüngliche Glattheit verlieren ([3, 4]).
Eine Erweiterung der Resultate in [1] konnte dadurch erreicht werden, dass gezeigt wurde, dass die in [5] verwendete geometrische Konstruktion in der für Anwendungen wichtigen Klasse der dynamischen Systeme mit schnellen und langsamen Variablen in natürlicher Weise auftritt (bedingt durch das Sprungverhalten zwischen verschiedenen Typen von langsamen Mannigfaltigkeiten).

2. Kodimension-2-Bifurkationen von homoklinen Schleifen. Es ist bekannt, dass unter generischen Bedingungen aus einer homoklinen Schleife eines Sattelpunktes eine periodische Lösung abzweigt. Die Verletzung dieser generischen Bedingungen führt zu Kodimension-2-Bifurkationen. Das bisher offene Problem, ob die bekannte Kodimension-2-Bifurkationsszenarien vollständig sind, wurde gelöst. Es konnte gezeigt werden, dass es außer den bekannten Bifurkationsszenarien

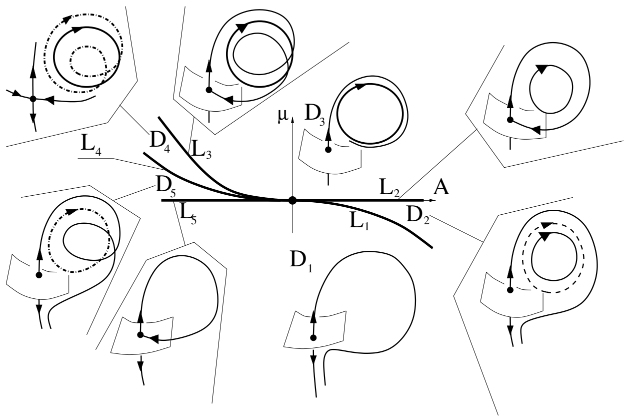


Abb. 2: Bifurkationsdiagramm zu einer Verdopplung einer homoklinen Kurve.

keine weiteren geben kann ([5]).

3. Selbstlokalisierte Lösungen von Hamilton-Systemen. In Systemen von gewöhnlichen Differentialgleichungen stellen selbstlokalisierte Lösungen homokline Schleifen dar. Die Bifurkationen von homoklinen Schleifen in Hamilton-Systemen sind weitgehend unerforscht. Bezüglich der Existenz von N-Pulsen in Hamilton-Systemen wurde gezeigt, dass die Verletzung der generischen Bedingungen in [6], wie sie z. B. bei der Orbit-Flip-Bifurkation in Hamilton-Systemen auftritt, zur Existenz von unendlich vielen N-Pulsen führt. Die Menge dieser Lösungen wurde unter Verwendung der Sprache der symbolischen Dynamik vollständig beschrieben, außerdem wurde in diesem Zusammenhang die Rolle spezieller nichthomokliner Lösungen (z. B. periodischer und heterokliner Lösungen) dargestellt. Es wurde gezeigt, dass die Existenz von super-homoklinen Lösungen (sie stellen homokline Orbits zu homoklinen Orbits dar) die Komplexität der Dynamik wesentlich erhöht ([7]).
Für singulär gestörte Hamilton-Systeme wurde das Phänomen von exponentiell kleiner Separatrizen-Aufspaltung untersucht. Die erhaltenen Resultate können zur Beschreibung von Pulslösungen in verschiedenen physikalischen Systemen (z. B. bei flachen Wasserwellen) verwendet werden ([8]).

4. Dynamik in Newhouse-Gebieten. Computersimulationen chaotischer Systeme zeigen stets das Auftreten homokliner Berührungen, d. h. die invarianten Mannigfaltigkeiten von sattelar-

tigen periodischen Lösungen berühren sich. Newhouse zeigte, dass Systeme mit homoklinen Berührungen in gewissen Gebieten des Raumes aller dynamischen Systeme dicht liegen. In [9] wird detailliert dargestellt, dass eine vollständige Beschreibung der Dynamik von Systemen in Newhouse-Gebieten prinzipiell unmöglich ist.
Eine der Haupteigenschaften von homoklinen Berührungen besteht im gleichzeitigen Auftreten periodischer Lösungen mit topologisch unterschiedlichem Verhalten. Dieses Phänomen wird auch für Newhouse-Gebiete in Hamilton-Systemen nachgewiesen ([10, 11, 12]).

Literatur

1. D. V. TURAEV, L. P. SHILNIKOV, *Blue sky catastrophes*, Dokl. Math., **51** (1995), No. 3, pp. 404–407.
2. ——, *A new stability boundary for periodic orbits*, erscheint in: Trans. Amer. Math. Soc.
3. M. SHASHKOV, D. TURAEV, *An existence theorem for a nonlocal invariant manifold near a homoclinic loop*, J. Nonlinear Sci., **9** (1999), No. 5, pp. 1–49.
4. ——, *A C^1-version of a Shilnikov theorem*, erscheint in: Trans. Amer. Math. Soc.
5. L. SHILNIKOV, A. SHILNIKOV, D. TURAEV, L. CHUA, *Methods of qualitative theory in nonlinear dynamics. Part II*, World Scientific, Singapore, in Druck.
6. D. V. TURAEV, L. P. SHILNIKOV, *On Hamiltonian systems with homoclinic saddle curves*, Soviet Math. Dokl., **39** (1989), No. 1, pp. 165–168.
7. D. V. TURAEV, *On multi-pulse self-localized solutions of systems with a smooth first integral*, eingereicht.
8. V. GELFREICH, L. LERMAN, J. SCHEURLE, *Exponentially small separatrix splitting in singularly perturbed Hamiltonian systems*, in Vorbereitung.
9. S. V. GONCHENKO, D. V. TURAEV, L. P. SHILNIKOV, *Homoclinic tangencies of arbitrarily high orders in the Newhouse regions*, erscheint in: Itogi Nauki i Tekhniki: Sovremennye problemy matematiki.
10. P. DUARTE, S. V. GONCHENKO, D. V. TURAEV, *Newhouse regions in the multidimensional Hamiltonian systems*, in Vorbereitung.
11. S. V. GONCHENKO, D. V. TURAEV, L. P. SHILNIKOV, *Abundance of elliptic periodic orbits near homoclinic tangencies to a saddle-focus*, in Vorbereitung.
12. V. ROM-KEDAR, D. TURAEV, *Big islands in dispersing billiard-like potentials*, Physica D, **130** (1999), Nos. 3/4, pp. 187–210.

4.3 Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen

4.3.1 Zusammenfassung

Die Forschungsgruppe hat ihre langfristig angelegten und im Forschungsprogramm des Instituts dargelegten Forschungen zu den in Verbindung mit der Behandlung anspruchsvoller Anwendungsaufgaben vorgenommenen Numerischen Verfahren für Systeme von partiellen Differentialgleichungen und von Algebro-Differentialgleichungen weitergeführt.
Die Schwerpunkte der bearbeiteten Gebiete waren:

- Transportprozesse in porösen Medien mit den Projekten:
  - Adaptive Verfahren (BMBF),
  - Thermokonvektion im nordostdeutschen Becken,
  - Zweiphasenströmungen;
- pdelib – Algorithmen und Softwarekomponenten für die numerische Lösung von partiellen Differentialgleichungen;
- Mikrowellenschaltungen;
- Simulation chemischer Prozesse und
- Gittergenerierung.

Die Forschungsgruppe hat an den nachfolgend genannten forschungsgruppenübergreifenden Projekten mitgearbeitet:

- Elektronische Zustände in Quantum-Wells (siehe S. 145), gemeinsam mit der FG 1 und
- Dynamik von Thermokonvektion, gemeinsam mit der FG 2 (siehe S. 141).

In der Forschungsgruppe wird das folgende institutsübergreifende Thema bearbeitet:

- Visualisierung.

Die Arbeiten im Rahmen des von Juli 1997 bis Juni 2000 laufenden BMBF-Förderprogramms „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“ wurden mit den nachfolgend genannten Projekten weitergeführt:

- Entwicklung von adaptiven Lösungsstrategien und effizienten Auflösungsverfahren für die numerische Simulation unterirdischer Strömungs- und Transportprozesse in räumlich dreidimensionalen Gebieten und
- Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen.

4.3.2 Projekte

Transport in porösen Medien

Im Berichtszeitraum wurden neue Resultate zu Fehlerschätzern für Interfaceprobleme erzielt (siehe S. 54). Damit wurde ein wichtiger Schritt gegangen, um für praxisrelevante Probleme aus dem Bereich der Grundwassersimulation adaptive Verfahren einzusetzen, deren mathematische Begründung über eine reine Heuristik hinausgeht.
Auf der Grundlage des *pdelib/sysconlaw*-Codes (siehe S. 58), der eine flexible Beschreibung von nichtlinearen Systemen viskoser Erhaltungsgleichungen ermöglicht, wurden mit dem Ziel der Anwendung durch Praxispartner Simulatoren für Zweiphasen- und thermokonvektive Strömungen erstellt und verifiziert (siehe S. 55 und 56).

Teilprojekt: Adaptive Verfahren

Bearbeiter: J. Fuhrmann, M. Petzoldt

Kooperation: H.-J. Diersch (WASY GmbH Berlin), R. Kornhuber (Freie Universität Berlin)

Förderung: BMBF

Im Rahmen des BMBF-Projektes „Adaptive Lösungsstrategien für Transportprozesse in porösen Medien“ wurden in Absprache mit dem Projektpartner a posteriori-Fehlerschätzer in der Klasse der linearen elliptischen Probleme weiterentwickelt.
Ziel war es, Fehlerschätzer zu entwickeln, die robust bezüglich der Diffusion sind. In der Literatur waren bis 1999 nur Ansätze für konstante Diffusionskoeffizienten vorhanden. Es ist gelungen, eine theoretische Grundlage für neue a posteriori-Fehlerschätzer zu schaffen. Die neuen Fehlerschätzer sind eine Modifikation der bisher verwendeten.
Dazu wird die Eigenschaft der Quasimonotonie des Diffusionskoeffizienten verwendet. Wir konnten zeigen, dass die Fehlerschätzer in der Klasse der quasimonotonen Diffusionskoeffizienten den Fehler robust von oben und von unten schätzen (Resultat 2D und 3D). Numerische Testbeispiele bestätigten dies ([1]).
Die verwendeten Fehlerschätzer sind als residuenbasierte Fehlerschätzer und als Fehlerschätzer, die auf lokalen Problemen beruhen, zu klassifizieren. Es wurde ein neuer Fehlerschätzer vorgestellt, der auf der Lösung eines lokalen Dirichletproblems auf jeweils zwei benachbarten Simplices beruht. Theoretisch und programmtechnisch sind Randbedingungen erster, zweiter oder dritter Art zugelassen.
Fehlerschätzer, die auf einem hierarchischen Ansatz aufbauen, wurden ebenfalls berücksichtigt. Unter Umständen liefern auch sie brauchbare Resultate. Fehlerschätzer, die auf der Idee von Zienkiewicz-Zhu beruhen, erwiesen sich dagegen sowohl theoretisch als auch in numerischen Tests als unbrauchbar.
Außerdem wurde untersucht, wie die Quasimonotonie des Diffusionskoeffizienten mit der Regularität der Lösung zusammenhängt. Wir konnten zeigen, dass die Lösung bei quasimonotonen Diffusionskoeffizienten in einem Sobolevraum $H^{5/4}$ liegt (Resultat in 2D). Ohne Quasimonotonie erhält man nur die schlechtere Regularität H^1. Die Regularität der Lösung ist deshalb von Bedeutung, weil sie die Approximationseigenschaften der Finiten Elemente bestimmt.

Über den Interface-Manager des Programmes FEFLOW unseres Praxispartners wurde eine Offline-Schnittstelle geschaffen, die es erlaubt Probleme in FEFLOW zu formulieren und in *pdelib* zu rechnen und zu verfeinern. Gegenwärtig werden in Zusammenarbeit mit dem Praxispartner Testprobleme mit realen Daten gerechnet. In Abb. 1 wurde ein FEFLOW-Problem von *pdelib* adaptiv verfeinert.

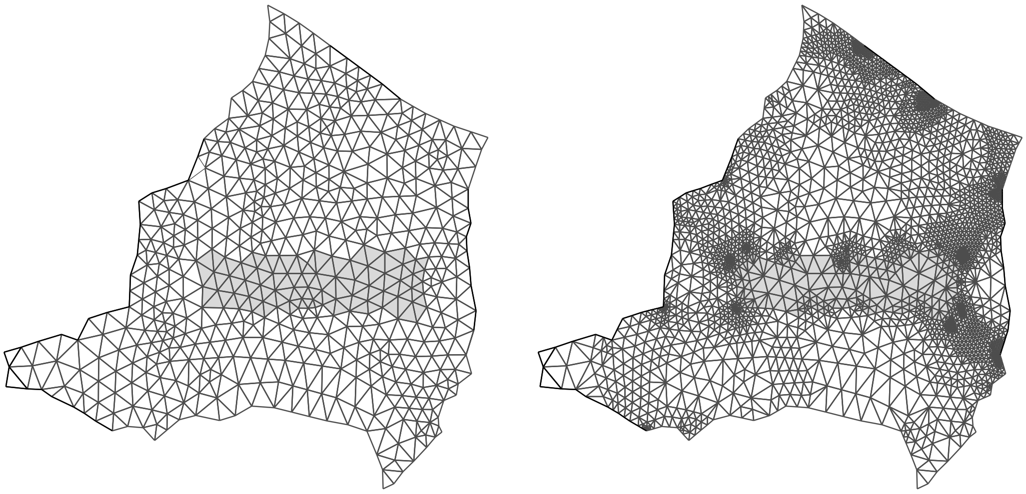


Abb. 1: Vor und nach der Verfeinerung mit Hilfe von a posteriori-Fehlerschätzern.

Literatur

1. M. PETZOLDT, *A posteriori error estimators for elliptic equations with discontinuous diffusion coefficients*, WIAS-Preprint No. 533, 1999.

Teilprojekt: Zweiphasenströmungen in porösen Medien

Bearbeiter: J. Fuhrmann, A. Becker (Technische Fachhochschule Berlin)

Kooperation: H.-J. Diersch (WASY GmbH Berlin), R. Helmig (Technische Universität Braunschweig)

Zweiphasenströmungen in porösen Medien lassen sich mit folgendem Gleichungssystem in den Variablen $p_w,\ p_n$ (Druck der benetzenden bzw. nicht benetzenden Phase) modellieren:

$$
\begin{aligned}
\partial_t(\phi\rho_i s_i) + \nabla\cdot\mathbf{q}_i &= f, \quad i\in\{n,w\}\,,\\
\mathbf{q}_i &= -\frac{\rho_i k_f k_{ri}}{\mu_i}(\nabla p_i - \rho_i\mathbf{g}), \quad i\in\{n,w\}\,,\\
s_n + s_w &= 1\,,\\
s_w &= s_{rw} + (1 - s_{rn} - s_{rw})s_e \quad \text{(Sättigung)}\,,\\
s_e &= s_e(p_c) \quad \text{(effektive Sättigung)}\,,\\
k_{ri} &= k_{ri}(s_e) \quad \text{(relative Permeabilität)}\,,\\
\rho_i &= \rho_i(p_i) \quad \text{(Dichte)}\,.
\end{aligned}
$$

Dieses Gleichungssystem ist dadurch gekennzeichnet, dass die Gleichung für das nicht benetzende Fluid in einem Gebiet mit freiem Rand gelöst wird. Um dieses Problem anzugehen, wird in der Literatur vorgeschlagen, anstelle des Phasendrucks p_n die Sättigung s_n der nicht benetzenden Phase als Grundvariable zu benutzen. Der Nachteil dieser Herangehensweise ist, dass in heterogenen Gebieten die Sättigung im Ort nichtstetig ist. Bei der numerischen Lösung mittels voronoiboxbasierter Finite-Volumen-Verfahren kann diese Unstetigkeit durch eine Nachiterationsprozedur nachträglich eingeführt werden. Alternativ dazu wird in diesem Projekt ein Regularisierungsverfahren vorgeschlagen. Um dieses Verfahren zu überprüfen, wurde auf der Grundlage des *pdelib/sysconlaw*-Codes die Druck-Sättigungs-Formulierung implementiert. Es wurden numerische Experimente für Probleme in homogenen Gebieten durchgeführt, welche diese Methode verifizieren und zeigen, dass der eingeführte Fehler in der Größenordnung des Zeitdiskretisierungsfehlers liegt.

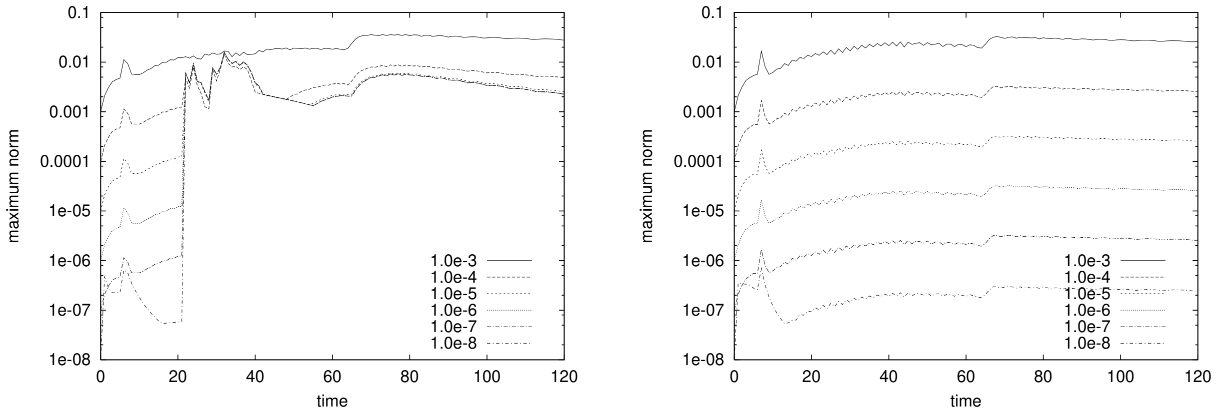


Abb. 1: L^∞-Fehler über die Zeit für verschiedene Regularisierungsparameter, maximaler Zeitschritt = 1 s (links), 0,1 s (rechts).

In Vorbereitung auf den Einbau des Zweiphasenströmungs-Codes in FEFLOW wurde unter Benutzung des Interface-Managers von FEFLOW ein Prototyp für eine graphische Benutzeroberfläche erstellt.

Teilprojekt: Simulation thermokonvektiver Strömungen im nordostdeutschen Becken

Bearbeiter: J. Fuhrmann

Kooperation: K. Gärtner (FG 7), V. Clausnitzer, U. Bayer (GeoForschungsZentrum Potsdam)

Ziel des Projektes ist es, auf der Grundlage der Simulation dreidimensionaler thermokonvektiver Strömungsprozesse im nordostdeutschen Becken Aussagen über die Genese der Sedimentschichten zu treffen. Im Berichtszeitraum wurde nach der Verifikation des Simulationscodes anhand von Literaturbeispielen die Implementierung des vervollständigten Modells

$$
\begin{aligned}
\text{Massenbilanz:}\quad & \partial_t(\varphi\tilde{\rho}_f) - \nabla\cdot(\tilde{\rho}_f\mathbf{v}) = 0 \\
\text{Darcygesetz:}\quad & \mathbf{v} = \frac{k}{\mu}(\nabla p - \rho_f\mathbf{g}) \\
\text{Energiebilanz:}\quad & \partial_t(((1-\varphi)\rho_s c_s + \varphi\tilde{\rho}_f c_f)T) - \nabla\cdot\mathbf{q} = 0 \\
\text{Fouriergesetz:}\quad & \mathbf{q} = (\varphi\lambda_f + (1-\varphi)\lambda_s)\nabla T - T\tilde{\rho}_f c_f\mathbf{v}
\end{aligned}
\tag{1}
$$

in den Grundvariablen p, T (Druck, Temperatur) im Rahmen des *pdelib/sysconlaw*-Codes (siehe S. 58) vorgenommen. Insbesondere wurden nichtlineare Dichte- und Viskositätsansätze, welche dem Arbeitspunkt des Problems angepasst sind, implementiert.
Auf der Grundlage des Anschlusses des Gittergenerators *triangle* an *pdelib* (siehe S. 67) wurden systematische zweidimensionale Simulationen zur Untersuchung des Fließregimes durchgeführt. Dabei ist es möglich, vollständige Schnitte durch das Becken mit geometrischen Abmessungen der Größenordnung 230×9 km zu rechnen.

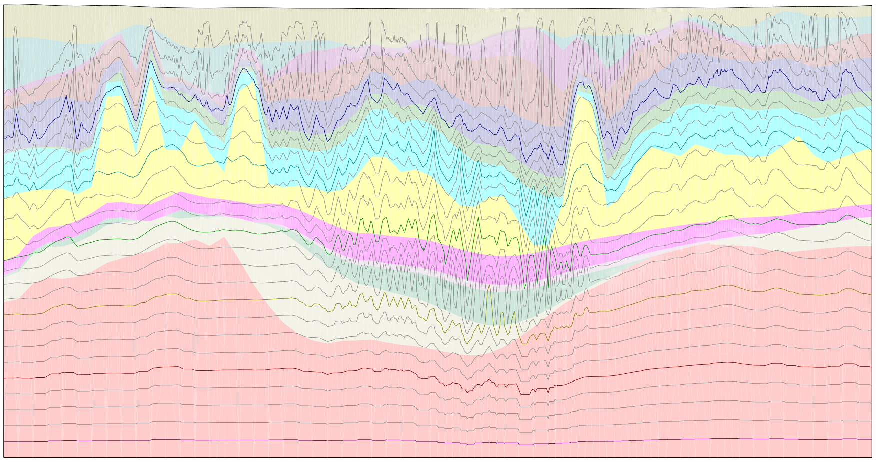


Abb. 1: Isothermen eines Beckenschnitts (überhöhte Darstellung), t = $1,02 \cdot 10^6$ Jahre.

Für die Interpretation der Resultate ist das mathematische Verständnis der möglichen Fließregimes essentiell. Hierzu wurden im Rahmen des Projektes „Dynamik thermokonvektiver Strömungen“ (siehe S. 145) entsprechende Untersuchungen für die Boussinesq-Approximation der oben beschriebenen Gleichungen durchgeführt.

pdelib — Algorithmen und Softwarekomponenten für die numerische Lösung von partiellen Differentialgleichungen

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

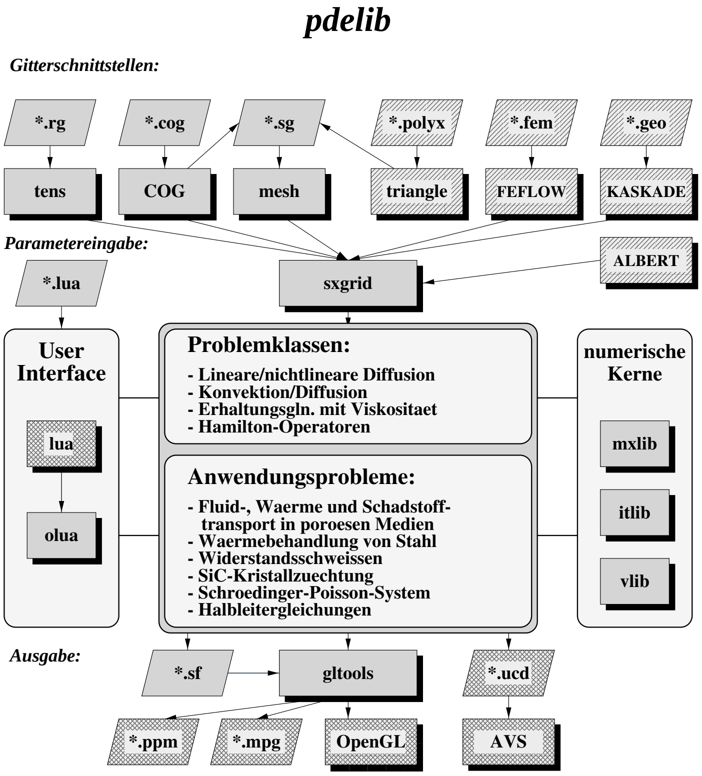
Kooperation: K. Gärtner (FG 7)

Im Rahmen dieses Projektes wurde *pdelib*[1], ein System von Softwarekomponenten für die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen, weiterentwickelt. Im Berichtszeitraum wurden Arbeiten zur Konsolidierung des Codes sowie einige aus den Anforderungen der Projektarbeit resultierende Erweiterungen vorgenommen:

- Ein Schwerpunkt der Arbeiten war die Anpassung des Finite-Volumen-basierten Codes *pdelib/sysconlaw* zur numerischen Lösung von Systemen aus m gekoppelten nichtlinearen viskosen Erhaltungsgleichungen der Art

  $$\partial_t b_l(x,u_1,\dots,u_m) + \nabla\cdot\mathbf{j}_l(x,u_1,\dots,u_m) + r_l(x,u_1,\dots,u_m) = f_l$$
  $$\mathbf{j}_l(x,u_1,\dots,u_m) = -k_l(x,u_1,\dots,u_m)\nabla u_l + \mathbf{q}_l(x,u_1,\dots,u_m), \qquad l = 1,\dots,m.$$

  in ein-, zwei- und dreidimensionalen Gebieten an die Anforderungen verschiedener Projekte. Dieser Code ist Grundlage der Arbeiten im Rahmen der Projekte Beckensimulation (siehe S. 56), Zweiphasenströmungen (siehe S. 55) und Dynamik von Thermokonvektion (siehe S. 145).



- Die Möglichkeit der portablen Speicherung von Binärdaten auf der Grundlage der xdr-Bibliothek wurde geschaffen, der *pdelib/sysconlaw*-Code wurde mit einer Save/Restore-Funktionalität ausgerüstet.

[1] http://www.wias-berlin.de/~pdelib

- Der Gittergenerator *triangle* wurde offline an *pdelib* angeschlossen (siehe S. 67).
- Vektorpostscriptausgabe aus der Graphiktoolbox *gltools* wurde ermöglicht (siehe S. 69).
- Die Bibliothek der verfügbaren linearen Löser wurde erweitert. Unter anderem ist jetzt der parallele direkte Sparse-Matrix-Solver PARDISO von K. Gärtner (FG 7) und O. Schenk (ETH Zürich) aus *pdelib* heraus benutzbar. Weiterhin wurde ein blockstrukturiertes algebraisches Agglomerations-Mehrgitter-Verfahren für stark gekoppelte Systeme partieller Differentialgleichungen eingebaut.
- Im Rahmen der Entwicklung eines 3D-Bauelementesimulators wurde die Überarbeitung des Gitterkonzepts von *pdelib* begonnen.

Simulation von Mikrowellenschaltungen

Bearbeiter: G. Hebermehl, R. Schlundt, F.-K. Hübner

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

Die Arbeiten zur Simulation von Mikrowellenschaltungen wurden unter Einbeziehung von absorbierenden Randbedingungen für offene Strukturen fortgesetzt.
Mikrowellenschaltungen werden in der Mobil- und Satellitenkommunikation, für intelligente Sensorsysteme, im Richtfunkbereich, der KFZ-Radartechnik und in der Optoelektronik eingesetzt. Die kommerziellen Anwendungen umfassen den Mikrowellen- und Millimeterwellenbereich, d. h. Frequenzen zwischen 1 Ghz und 80 GHz. Für die Radioastronomie werden Frequenzen bis zu 1 THZ und in der Optoelektronik bis zu 300 THz benötigt. Die Strukturen enthalten Metallisierungen mit einer Dicke von 0,1 μm – 6 μm. Die maximale Größe eines Multi-Chip-Moduls beträgt einige cm^2. Gerade die dünnen Metallisierungen beeinflussen das Verhalten der Schaltungen wesentlich. Die Aufgabe stellt daher hohe Anforderungen an die räumliche Auflösung.

Grundelemente der Schaltungen sind Wellenleiter und Diskontinuitäten. Das Verhalten der Struktur wird durch eine Streumatrix beschrieben, die aus der orthogonalen Dekomposition des elektrischen Feldes an zwei benachbarten Schnittebenen auf jedem Wellenleiter für eine Anzahl linear unabhängiger Erregungen berechnet wird. Das elektromagnetische Feld wird aus einem dreidimensionalen Randwertproblem für die Integralform der Maxwell'schen Gleichungen

$$\oint_{\partial\Omega} \vec{H} \cdot d\vec{s} = \int_{\Omega} j\omega[\varepsilon]\vec{E} \cdot d\vec{\Omega}, \qquad \oint_{\cup\Omega} ([\varepsilon]\vec{E}) \cdot d\vec{\Omega} = 0,$$
$$\oint_{\partial\Omega} \vec{E} \cdot d\vec{s} = -\int_{\Omega} j\omega[\mu]\vec{H} \cdot d\vec{\Omega}, \qquad \oint_{\cup\Omega} ([\mu]\vec{H}) \cdot d\vec{\Omega} = 0,$$

mit den konstitutiven Relationen

$$\vec{D} = [\varepsilon]\vec{E}, \quad \vec{B} = [\mu]\vec{H}$$

ermittelt. Die elektrischen und magnetischen Feldstärken $\vec{E}$ und $\vec{H}$ sowie die elektrischen und magnetischen Flussdichten $\vec{D}$ und $\vec{B}$ sind komplexe Funktionen der räumlichen Koordinaten. ω ist die Kreisfrequenz und $j^2 = -1$. Die Materialgrößen $[\varepsilon]$ und $[\mu]$ (Permittivität und Permeabilität) sind diagonale komplexe Tensoren:

$$[\varepsilon] = \operatorname{diag}(\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z), \quad [\mu] = \operatorname{diag}(\mu_x, \mu_y, \mu_z)$$

oder komplexe Skalare. Für die numerische Behandlung wird das Berechnungsgebiet durch elektrische und magnetische Wände oder durch so genannte Absorbing-Boundary-Bedingungen (ABC) begrenzt. Als ABC werden Perfectly Matched Layers (PML) verwendet. Diese Schichten bestehen aus künstlichem Material mit komplexen anisotropen Materialeigenschaften. Es wird mit der PML-Formulierung von Sacks ([1]) gearbeitet, weil sie im Gegensatz zu dem älteren Ansatz von Berenger ([2]) die Verwendung der ursprünglichen Maxwell'schen Gleichungen gestattet.
An den Toren ist das transverse elektrische Feld gegeben durch die Superposition der transversalen Wellenleitermoden, die mit Hilfe eines Eigenwertproblems zu berechnen sind, bevor das Randwertproblem gelöst werden kann.

Die Diskretisierung der Maxwell'schen Gleichungen mit Hilfe nichtäquidistanter, versetzter Quadergitter ([3, 4]) ergibt hochdimensionale lineare Gleichungssysteme mit schwach besetzten indefiniten komplexen symmetrischen Koeffizientenmatrizen.

Aufgrund der longitudinalen Homogenität der Wellenleiter wird von einem exponentiellen Ansatz für die longitudinale Richtung ausgegangen. Dieser Ansatz führt auf ein Eigenwertproblem mit schwach besetzter nichtsymmetrischer komplexer Matrix zur Berechnung der Moden ([5]). Die Berechnung aller Eigenwerte zur Berechnung einiger weniger Ausbreitungskonstanten wird vermieden, indem das Arnoldi-Verfahren nacheinander auf die Matrix des Eigenwertproblems und eine modifizierte Matrix angewendet wird (siehe Abb. 1). Das endliche PML-Volumen verursacht auch virtuelle Moden, die nicht das wirkliche Verhalten des Wellenleiters widerspiegeln. Diese unerwünschten so genannten PML-Moden zeichnen sich durch ihre hohe Leistungsdichte in den PM-Schichten aus und werden aufgrund dieser Eigenschaft eliminiert.

Die hochdimensionalen Gleichungssysteme (mehrere Millionen Unbekannte) mit mehreren rechten Seiten werden unter Verwendung von vier verschiedenen auf die Aufgabenstellung zugeschnittenen Vorkonditionierungstechniken (Addition des Gradienten der elektrischen Divergenzgleichung, Independent Set Orderings, Jacobi- und SSOR-Vorkonditionierung) in Zusammenhang mit Krylov-Subspace-Verfahren gelöst. Die Anzahl der rechten Seiten hängt von der Anzahl der Tore in der Struktur und der Anzahl der Moden pro Tor ab. Die ABC-Bedingungen ziehen eine Erhöhung der Anzahl der zu berücksichtigenden Moden nach sich. Durch die Einführung von Block-QMR-Methoden, mit denen die Gleichungssysteme mit mehreren rechten Seiten simultan gelöst werden, wurden die Rechenzeiten reduziert.

Die Ergebnisse der Forschungsarbeiten wurden in den Publikationen [6–11] dargestellt.

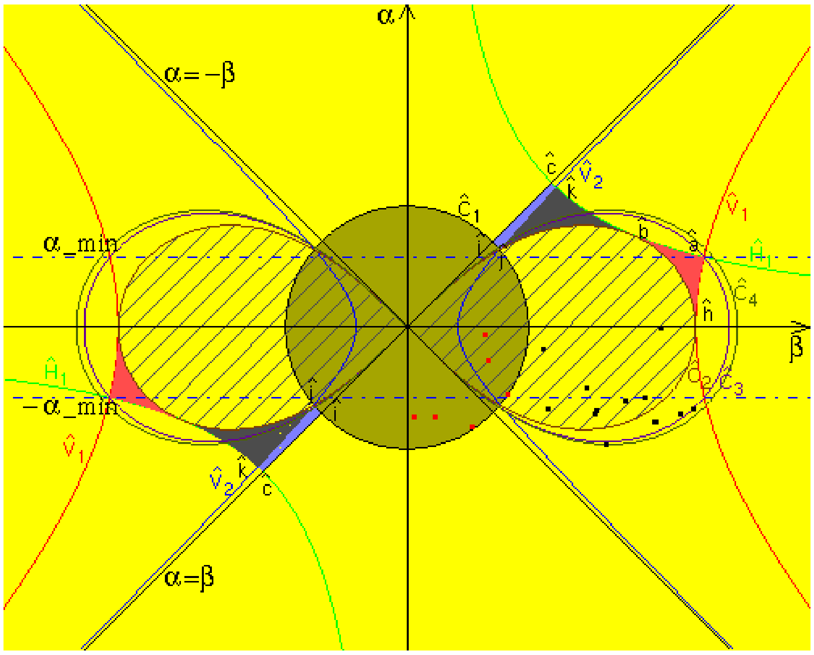


Abb. 1: Lage der Ausbreitungskonstanten innerhalb eines Kreises und einer Lemniskate.

Literatur

1. Z. S. Sacks, D. M. Kingsland, R. Lee, J.-F. Lee, *A perfectly matched anisotropic absorber for use as an absorbing boundary condition*, IEEE Trans. Antennas and Propagation, **43** (1995), No. 12, pp. 1460–1463,

2. J.-P. BERENGER, *Perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves*, J. Comput. Phys., **114** (1994), pp. 185–200,

3. K. YEE, *Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media*, IEEE Trans. Antennas and Propagation, **14** (1966), No. 3, pp. 302–307.

4. K. BEILENHOFF, W. HEINRICH, H. L. HARTNAGEL, *Improved finite-difference formulation in frequency domain for three-dimensional scattering problems*, IEEE Trans. Microwave Theory and Techniques, **40** (1992), No. 3, pp. 540–546.

5. A. CHRIST, H. L. HARTNAGEL, *Three-dimensional finite-difference method for the analysis of microwave-device embedding*, IEEE Trans. Microwave Theory and Techniques, **35** (1987), No. 8, pp. 688–696.

6. G. HEBERMEHL, R. SCHLUNDT, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *The eigen mode problem for microwave transmission lines with absorbing boundary conditions*, erscheint in: Z. Angew. Math. Mech.

7. ——, *Improved numerical methods for the simulation of microwave circuits*, Surveys Math. Indust., **9** (1999), No. 2, pp. 117–129.

8. ——, *The eigen mode problem for microwave transmission lines with absorbing boundary conditions*, in: Book of Abstracts, Annual Meeting, Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik, April 12 – 16, 1999 (M. Berveiller, A. Louis, Hrsg.), Walter de Gruyter GmbH, Metz, Frankreich, 1999, pp. 67–68.

9. ——, *Simulation of microwave integrated circuits and multi-chip modules*, in: Book of Abstracts, The Fourth International Congress on Industrial and Applied Mathematics, Edinburgh, Scotland, 5–9 July 1999, Edinburgh Press, 1999, p. 268.

10. G. HEBERMEHL, F.-K. HÜBNER, R. SCHLUNDT, TH. TISCHLER, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *On the simulation of microwave transmission lines with PML*, eingereicht.

11. ——, *On the computation of eigen modes for lossy microwave transmission lines including Perfectly Matched Layer boundary conditions*, WIAS-Preprint No. 543, 1999.

Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen

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

Kooperation: A. Schuppert (Bayer AG, Leverkusen), P. Čapek (Institut für Chemische Technologie, Prag, Tschechische Republik), A. Kienle (Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme, Magdeburg), G. Wozny (Institut für Prozess- und Anlagentechnik, Technische Universität Berlin)

Förderung: BMBF

Bei der dynamischen Prozess-Simulation von Produktionsanlagen der chemischen Industrie sind Anfangswertprobleme für große Systeme von nichtlinearen Algebro-Differentialgleichungen (DAE) numerisch zu lösen. Insbesondere bedingt durch die Verbesserung der Exaktheit der verwendeten Prozessmodelle und den steigenden Grad ihrer Integration gewinnt der Einsatz paralleler numerischer Verfahren bei der anlagenweiten Simulation immer größere Bedeutung. Die von uns in den letzten Jahren hierfür entwickelten Simulationsansätze und numerischen Verfahren nutzen die durch die Modellierung vorgegebene hierarchische Struktur der chemischen Anlagen für die Parallelisierung aus. Dabei wird das DAE-System entsprechend der Prozesseinheiten (Units) der chemischen Anlage in Teilsysteme strukturiert. Die Kopplungen zwischen den Teilsystemen sind durch die Stoff-, Wärme- und Informationsströme zwischen den Units der Anlage festgelegt. Basierend auf dieser Teilsystemstruktur werden nach Auswertung der Kopplungen die DAE-Systeme entsprechend den Erfordernissen der verwendeten numerischen Verfahren in Blöcke partitioniert.
Im Prototyp unseres dynamischen Prozess-Simulators *BOP* (Block Oriented Process simulator) ([1]) wird ein **homogener Simulationsansatz** realisiert. Dabei kommen BDF-Verfahren, blockstrukturierte Verfahren vom Newton-Typ und direkte Verfahren für lineare Gleichungssysteme mit schwach besetzten Matrizen zum Einsatz. Der Simulator ist auf Parallelrechnern mit Shared Memory vom Typ Cray J90 und SGI Origin 2000 implementiert und hat sich bei Simulationsrechnungen für komplexe industrielle Anlagen bewährt. Die Arbeiten am Prozess-Simulator *BOP* wurden im Berichtszeitraum fortgesetzt.
Für die blockstrukturierten Verfahren vom Newton-Typ ([5]) wurde ein Relaxationsansatz zur Lösung des Kopplungssystems untersucht. Hierbei kann u. a. die aufwendige Berechnung von Sensitivitätsmatrizen durch die Verwendung von Matrix-Vektor-Produkten ersetzt werden. Der daraus resultierende Parallelisierungsansatz ermöglicht bis auf sequentiell auszuführende Permutationsoperationen eine vollständige Parallelisierung des Verfahrens. Durch eine geeignete Transformation des Kopplungssystems kann man eine hinreichende Konvergenzbedingung ableiten, deren numerische Auswertung nur wenig Rechenzeit erfordert. Diese Bedingung lässt sich auch zur Ausnutzung der zeitlichen Inaktivität (Latenz) von Komponenten der chemischen Anlagen verwenden.
Die bei der Diskretisierung der DAE-Systeme auftretenden linearen Systeme mit schwach besetzten, unsymmetrischen, nichtstrukturierten und indefiniten Matrizen werden mit direkten Methoden behandelt. Die entwickelten Methoden wurden hinsichtlich ihrer Effektivität weiterentwickelt ([4]). Mit Arbeiten zur Entwicklung der nächsten Version des Programmpaketes *GSPAR* wurde begonnen.
Ausgehend von der definierten Eingabesprache zur Beschreibung chemischer Prozesse (siehe Beispielcode in Abb. 1), die eine zweistufige hierarchische Modellierung zulässt, wurde die

Implementierung eines Compilers zur Erzeugung einer Schnittstelle zum Simulator *BOP* weitergeführt. Der Compiler erzeugt aus der Eingabebeschreibung das dazugehörige DAE-System. Hierzu muss die zweistufige Hierarchie aufgelöst und eine Zuordnung der im System enthaltenen Größen zu den Variablen und Parametern vorgenommen werden.

```
MODEL STEAMVALVE
      TYPE
         FLOWRATE: flow_in,flow_out;
         PRESSURE: press_in,press_out;
         VALVE_COEFF: kvalve;
      STREAM
         INPUT: input1(flow_in,press_in)
         OUTPUT: output1(flow_out,press_out);
      EQUATION
         flow_in * flow_in = kvalve * (press_in - press_out);
         flow_out = flow_in;
MODEL STEAMER
      TYPE
         PRESSURE: psteam;
         TEMPERATURE: tsteam;
         FLOWRATE: steamout;
      STREAM
         OUTPUT: output1(steamout,psteam);
      EQUATION
         psteam = 0.133 * 1.0'(0.796681 - 1668.21/(tsteam + 228));
OPERATION
      SET
         STEAMER: tsteam=105;
         STEAMVALVE: kvalve=46.361;
PLANT
      STREAM
         OUTPUT: product1;
      UNIT
         STEAMVALVE: steamvalve;
         STEAMER: steamer;
      FLOWSHEET
         steamer.output1 = steamvalve.input1,
         steamvalve.output1 = product1;
```

Abb. 1: Beispielcode.

Aus den bei der Auflösung entstehenden Listen, die das gesamte DAE-System beschreiben, wird die Schnittstelle zum Simulator *BOP* erzeugt. Die Schnittstelle enthält in einem Datenteil die Beschreibung der Dimension, der Struktur, der Variablen und der Parameter des DAE-Systems. Ein Programmteil der Schnittstelle enthält Subroutinen zur Berechnung der Funktion und der Jacobi-Matrix des DAE-Systems. Zur Berechnung der Jacobi-Matrix wurden Routinen zur symbolischen Differentiation der Gleichungen des DAE-Systems implementiert. Mit ihrer Hilfe werden die Struktur der Jacobi-Matrix für den Datenteil der Schnittstelle und die Anweisungen zur Berechnung der Jacobi-Matrix des DAE-Systems erzeugt.
Im Berichtszeitraum hat sich der Simulator *BOP* u. a. bei der dynamischen Prozess-Simulation einer Klärschlammverbrennungsanlage der Berliner Wasserbetriebe bewährt. Die am Institut für Prozess- und Anlagentechnik der Technischen Universität Berlin modellierte Anlage führt auf ein hochgradig nichtlineares DAE-System mit mehr als 16 000 Gleichungen. Bei ihrer Simulation auf unserem Parallelrechner SGI Origin 2000 konnte im Vergleich zum kommerziellen Prozess-Simulator *SPEEDUP*^{TM} (Aspen Technology Inc.) eine Reduzierung der Laufzeit für die dynamische Rechnung auf 12 % erzielt werden. Bei dieser Rechnung erfolgte eine automatische Zerlegung des Gesamtsystems in vier Blöcke, wobei jeder Block Gleichungsanteile von mehreren der insgesamt 53 Units der Anlage umfasste.
Bei einem **heterogenen Simulationsansatz** ([3]) kann jeder Teilprozess in einer chemischen Anlage separat modelliert und numerisch gelöst werden. Dazu ist auf kleinen Zeitintervallen ein System zeitabhängiger algebraischer Kopplungsgleichungen zu lösen. Diese Gleichungen be-

stimmen die Stoff- und Energieströme zwischen den Teilprozessen der Anlage. Das Fließschema des Gesamtprozesses ist dadurch gekennzeichnet, dass jede Komponente des Vektors aller Ausgangsvariablen $v(t) = (v_1, ..., v_n)^T$ genau einer Eingangsvariablen des Vektors $u(t) = (u_1, ..., u_n)^T$ mit

$$u(t) = Pv(t) = PG(u(t)), \quad t \in [t_0, t_E],$$

zugeordnet ist, wobei die konstante Matrix P diese Zuordnung definiert. G repräsentiert die Gesamtheit aller, nur implizit gegebenen, Eingangs-Ausgangs-Abbildungen G_i der n Teilprozesse des Gesamtprozesses. Es ist

$$v_i(t) = G_i(u_i(t)), \quad i = 1, \ldots, n.$$

Dabei wird jede Abbildung G_i für ein Teilintervall des Simulationsbereiches $[t_0, t_E]$ durch den Aufruf der zugeordneten Simulationssoftware des i-ten Teilprozesses realisiert. Jeder Teilprozess kann dabei unabhängig modelliert und numerisch gelöst werden, was auch verteilt in einem Rechnernetzwerk erfolgen kann. Hierzu wird die vom Kooperationspartner Bayer AG, Leverkusen, bereitgestellte *Simulation Manager*-Software eingesetzt, die eine synchronisierte Lösung der Teilprozesse auf einem Teilintervall für eine vorgegebene Diskretisierung der Eingangsvariablen $u_i(t_j)$ initiiert und anschließend die diskreten Ausgangsvariablen $v_i(t_j)$ zur iterativen Lösung der Kopplungsgleichungen auf dem Zeitgitter bereitstellt.
Da kommerzielle Simulatoren i. Allg. keine Ableitungsinformationen zur Verfügung stellen und Differenzenapproximationen der Jacobi-Matrix des Kopplungssystems $J = I - P\partial v/\partial u$ zu aufwendig sind, wurden Quasi-Newton-Techniken betrachtet. Auf der Grundlage des klassischen Broyden-Verfahrens ergibt sich eine nicht strukturerhaltende Aufdatierungsformel

$$\left(\frac{\partial v}{\partial u}\right)^{k+1} = \left(\frac{\partial v}{\partial u}\right)^{k} \left(I - \frac{\Delta u^k (\Delta u^k)^T}{(\Delta u^k)^T \Delta u^k}\right) + \frac{\Delta v^k (\Delta u^k)^T}{(\Delta u^k)^T \Delta u^k}, \qquad (\Delta u^k)^T \Delta u^k \neq 0,$$

für die Sensitivitätsmatrix des Gesamtsystems. Mit $\Delta u^k \equiv u^{k+1} - u^k$ werde die Störung der Eingangsvariablen während der k-ten Iteration und mit $\Delta v^k \equiv v^{k+1} - v^k$ die resultierende Änderung der Ausgangsvariablen bezeichnet. Für das unten dargestellte Prozessmodell ergaben sich bei Verwendung einer Startmatrix $J = I$ Rechenzeiteinsparungen von bis zu 50 % im Vergleich zu einer Fixpunktiteration.
Eine lokale Aufdatierungsformel

$$\left(\frac{\partial v}{\partial u}\right)^{k+1}_i = \left(\frac{\partial v}{\partial u}\right)^{k}_i \left(I - \frac{\Delta u_i^k (\Delta u_i^k)^T}{(\Delta u_i^k)^T \Delta u_i^k}\right) + \frac{\Delta v_i^k (\Delta u_i^k)^T}{(\Delta u_i^k)^T \Delta u_i^k}, \qquad (\Delta u_i^k)^T \Delta u_i^k \neq 0,$$

erhält man, wenn die Eingangsstörung des $i-ten$ Teilprozesses verwendet wird. Hier entstehen Sensitivitätsblöcke für die Teilprozesse und nur innerhalb der Blöcke geht die Besetztheitsstruktur verloren.
Ein nichtisothermes dynamisches Prozessmodell (siehe S. 66, Abb. 2) zur Herstellung von 1,2-Dichlorethen wurde erarbeitet, das zerlegt in drei Teilprozesse (Reaktor, Wärmetauscher, Trennstufe) als Testmodell dient. Die Teilprozesse werden dabei unabhängig voneinander mit Hilfe des kommerziellen Simulators *SPEEDUP* gelöst und über den *Simulation Manager* gekoppelt.

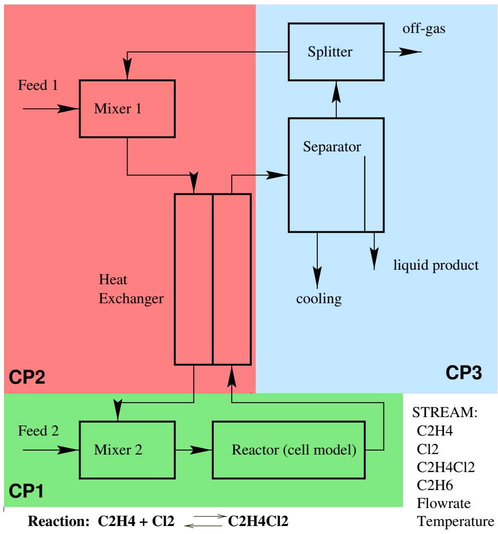


Abb. 2: Prozessmodell.

Unterschiedliche dynamische Szenarien können durch Variation der FEED-Zuführung bzw. durch Schaltvorgänge aufgeprägt werden. Ebenso können interne Ereignisse (z. B. Zünden oder Erlöschen der Reaktion) zu vorher nicht bekannten Zeitpunkten initiiert werden. Diese Beispielklasse ist deshalb gut für die Entwicklung einer adaptiven Zeitfenstersteuerung geeignet.

Literatur

1. J. BORCHARDT, K. EHRHARDT, F. GRUND, D. HORN, *Parallel modular dynamic process simulation*, in: Scientific Computing in Chemical Engineering II (F. Keil, W. Mackens, H. Voss, J. Werther, Hrsg.), Vol. 2, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1999, pp. 152–159.

2. J. BORCHARDT, F. GRUND, D. HORN, *Parallelized methods for large nonlinear and linear systems in the dynamic simulation of industrial applications*, Surveys Math. Indust., **8** (1999), No. 3/4, pp. 201–211.

3. K. EHRHARDT, J. BORCHARDT, F. GRUND, D. HORN, *Divide and conquer strategies in large scale dynamic process simulation*, Comput. Chem. Engng., **23** (1999), Suppl., pp. S335–S338.

4. F. GRUND, *Direct linear solvers for vector and parallel computers*, in: Vector and Parallel Processing — VECPAR'98, Third International Conference, Porto, Portugal, June 1998 (J. M. L. M. Palma, J. Dongarra, V. Hernández, Hrsg.), Lecture Notes in Computer Science, Vol. 1573, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1999, pp. 114–127.

5. 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, Vol. 1541, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1998, pp. 38–42.

Gittergenerierung

Bearbeiter: J. Fuhrmann, I. Schmelzer, M. Uhle

Im Rahmen der am Institut durchgeführten Projektarbeiten erweist es sich immer mehr, dass die Gittergenerierung insbesondere im 3D-Fall strategische Bedeutung für die Fähigkeit des Instituts hat, Anwendungsprojekte zu realisieren. Aufgrund dieser Tatsache wurde eine Diversifizierung der Arbeiten zur Gittergenerierung vorgenommen, ohne den bisherigen Hauptschwerpunkt — die Entwicklung von COG — aufzugeben.

COG

Die Arbeiten am Geometrie- und Gittergenerierungspaket COG wurden fortgesetzt. Hauptarbeitsgebiete waren hierbei:

- Verbesserung der Gitterqualität insbesondere bei Gittern, in denen verschiedene Teilgitter vereinigt werden, die mit Hilfe krummliniger Koordinatensysteme erzeugt wurden;
- spezielle Implementierung für Dreiecks- und Prismengeometrien als Standardgeometrien; Damit vereinfacht sich sowohl die Nutzerschnittstelle für die Eingabe solcher Geometrien als auch die Sicherheit der korrekten Darstellung der Ecken.
- die Erzeugung von Gittern für Anwendungen in der Geologie (siehe S. 56); Solche Anwendungen sind extrem anisotrop. Ihre besondere Schwierigkeit für die Gittergenerierung sind schräge dünne Schichten. Dies führt im bisherigen COG genau wie in anderen Delaunay-Gittergeneratoren *(triangle)* zu sehr hohen Knotenzahlen. Hierfür wurde ein Algorithmus entwickelt und in 2D implementiert, der mit erheblich weniger Knoten auskommt, allerdings auf Kosten der Delaunay-Eigenschaft für einige Randdreiecke.

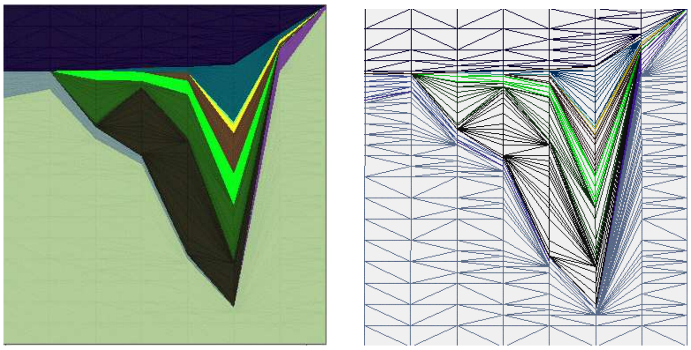


Abb. 1: Geometrie und geometriekonformes Nicht-Delaunay-Gitter in einer geologischen Anwendungssituation (stark verzerrt).

lbg

Der Gittergenerator *lbg* wurde durch neue graphische und numerische Funktionen qualitativ verbessert.

Für zweidimensionale Gebiete ist durch Änderung der Eingabeparameter mit Hilfe der zur Verfügung stehenden interaktiven Kommandos ein Dreiecksgitter mit Delaunay-Eigenschaft in den meisten Fällen erzielbar.
Im dreidimensionalen Fall werden automatisch Tetraedergitter mit Delaunay-Eigenschaft für den Fall erzeugt, dass ausschließlich rechteckige Grundgebiete die vorgegebene Geometrie beschreiben.
Die Dokumentation des Programmes *lbg* ([1]) wurde durch die Beschreibung der neuen Funktionen vervollständigt.
Der Gittergenerator *lbg* wurde in mehreren Projekten, u. a. Modellierung, Analyse und Simulation des Widerstands-Impulsschweißens (siehe S. 130) und 3D-Simulation von Halbleiterdetektoren (siehe S. 133), angewandt.

triangle

Der bisher am WIAS verfolgte zwei- und dreidimensionale Ansatz zur Gittergenerierung, welcher sich durch eine sehr flexible (nicht nur polygonbasierte) Möglichkeit der Geometriebeschreibung auszeichnet, gehört zu den Nicht-Steiner-Algorithmen und ermöglicht entweder die Geometrieapproximation unter Verlust der für die Konstruktion von Finite-Volumen-Verfahren sowie das diskrete Maximumprinzip wünschenswerten konformen Delaunay-Eigenschaft oder generiert Gitter mit Delaunay-Eigenschaft unter Verlust der Geometrieapproximation. Für viele Geometrien und bei Akzeptanz lokaler Korrekturen in der Diskretisierungsmatrix erscheint dieser Ansatz ausreichend.
Die gewünschte konforme Delaunay-Eigenschaft lässt sich nur unter Hinzufügen von so genannten Steiner-Punkten erreichen. Ein entsprechender Gittergenerator für den zweidimensionalen Fall liegt für nichtkommerzielle Projekte mit *triangle* vor und ist auf http://netlib.org verfügbar. Dieser Code wurde offline an *pdelib* angekoppelt. Damit lassen sich einerseits Projekte absichern, die von den oben genannten Anforderungen abhängen (siehe S. 56), andererseits lassen sich nun Arbeiten zur Verifizierung von Verfahren zur Matrixkorrektur für COG-Gitter ausführen.

Literatur

1. M. UHLE, *lbg – Layer Based Grid Generator*, http://www.wias-berlin.de/~pdelib/doc/lbg.html-dir/index.html, 1999.

2. J. FUHRMANN, *triangle*, http://www.wias-berlin.de/~pdelib/doc/triangle.html-dir/index.html, 1999.

3. I. SCHMELZER, COG – *Geometrie- und Gittergenerierungspaket*, http://www.wias-berlin.de/~pdelib/doc/cog.html-dir/index.html, 1999.

4. M. BERN, D. EPPSTEIN, *Mesh generation and optimal triangulation*, tech. rep., Xerox Corporation, Palo Alto Research Center, 1992, CSL-92-1.

5. J. R. SHEWCHUK, *Triangle: Engineering a 2D quality mesh generator and Delaunay triangulator*, in: Applied Computational Geometry: Towards Geometric Engineering (M. C. Lin, D. Manocha, Hrsg.), Lecture Notes in Computer Science, vol. 1148, Springer-Verlag, 1996, pp. 203–222.

Präsentation und Visualisierung von numerischen Simulationen

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

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

Zur Unterstützung der visuellen Auswertung von Zwischen- und Endergebnissen bei der Berechnung großer numerischer Probleme der Forschungsgruppen wurde zu den bisherigen bewährten Techniken der Visualisierung die Bilderzeugung mittels der OpenGL-Bibliothek in der Umgebung der Programmiersprache C, basierend auf der als freie Software vorliegenden GLUT-Bibliothek[1], eingeführt. Diese Technik wurde vor allem zur Darstellung mathematischer Zusammenhänge genutzt, wie z. B. bei der Sichtbarmachung von Eigenwerten und Ausbreitungskonstanten, die im Schnitt von Mengen liegen, die von Lemniskaten, Hyperbeln und Kreisen begrenzt werden (siehe S. 60).
Mit den Möglichkeiten der OpenGL-Bibliothek wurden allgemeine Animationsmöglichkeiten geschaffen, bei denen durch Effekte wie Rotation, Translation oder Skalierung der räumliche Charakter dreidimensionaler Gebilde deutlicher wahrgenommen werden kann. Die Animationseffekte können als eine Sequenz von Bildern abgespeichert und damit als Basis für Videos in den verschiedenen Formaten verwendet werden.

Die Transformation der verschiedenen Videoformate (AVI-movies, Quicktime, SGI-movies, FLCs, MPEGs) wurde durch Installation und Nutzung entsprechender Software ermöglicht, wobei die Arbeiten in diesem Bereich auf die Betriebssysteme Windows98 und Windows NT ausgeweitet wurden.

Für die Beschreibung von Videobändern im VHS-Format hat sich die im letzten Jahr eingeführte Hardware bewährt, die eine unkomprimierte Datenübertragung zwischen Computer und Videorecorder zulässt und damit einen Informationsverlust bei jedem übertragenen Bild ausschließt.
Bei der Erzeugung von komplexeren Animationen wurde neu installierte digitale Video-Schnittsoftware verwendet.

Die OpenGL-basierte Visualisierungstoolbox *gltools*[2] wurde auf der Grundlage eines frei verfügbaren Quellcodefragments[3] von M. Kilgard um die Möglichkeit der Ausgabe von Vektor-Postscript-Daten unter Benutzung des Feedback-Buffers von OpenGL erweitert. Damit lässt sich für Publikationen eine höhere Darstellungsqualität als mit den vorher üblichen ppm-Dumps erreichen.
Bei einer Zusammenarbeit zwischen dem WIAS (FG1) und BMW-Rolls Royce (Dr. Anders)[4] fand eine visuelle Auswertung mit einer Animation statt, die eine Änderung der numerischen Simulation zur Folge hatte. (Es zeigte sich, dass wichtige Effekte sich erst am Ende der ursprünglichen Simulation entfalteten.)

Im Rahmen der nationalen Zusammenarbeit besuchte ein Mitarbeiter der Universität Bonn das WIAS zur Vertiefung der Nutzung des Visualisierungspaketes GRAPE. Die Kooperation mit der Abteilung Multimedia der Humboldt-Universität zu Berlin wurde in bewährter Weise fortgeführt.

[1] http://reality.sgi.com/mjk_asd/OpenGLforX.html
[2] http://www.wias-berlin.de/~gltools
[3] http://reality.sgi.com/opengl/tips/Feedback.html
[4] http://www.wias-berlin.de/publications/annual_reports/98/node21.html

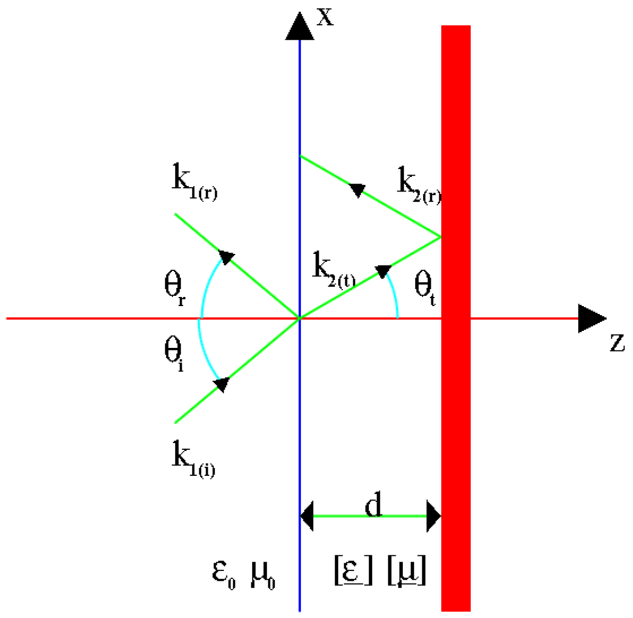


Abb. 1: Mit Routinen der OpenGL-Bibliothek in einem Programm in der Programmiersprache C dargestellter Sachverhalt (Reflexion und Transmission bei PML-Randbedingungen).

Berechnung von 3D-Wirbelstromverteilungen

Bearbeiter: J. Fuhrmann, M. Uhle

Kooperation: O. Biro (Technische Universität Graz, Österreich), A. Kost, L. Jänicke (Technische Universität Cottbus), M. G. Pantelyat (Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Kharkov)

Diese Aufgabenstellung dient zur Simulation von induktiven Erwärmungsprozessen in der Metall verarbeitenden Industrie ([1]).

Im Rahmen des Projektes ist eine Software entstanden, die es gestattet, dreidimensionale Berechnungen von Wirbelstromverteilungen im Zeitbereich in metallischen Leitern durchzuführen. Zur Berechnung der Wirbelströme wird eine Vektorpotentialformulierung auf der Basis des magnetischen Vektorpotentials mit Coulomb-Eichung verwendet.

Schwerpunkt der durchgeführten Arbeiten war die Untersuchung von Algorithmen zur Lösung der linearen Gleichungssysteme. Dabei wurden Varianten für Vorkonditionierer des CG-Verfahrens untersucht, die auf der Basis automatisch erzeugter tridiagonaler Blockstrukturen arbeiten. Diese Algorithmen gestatten eine parallele Lösung der linearen Teilsysteme und somit die Senkung der dabei auftretenden hohen Rechenzeiten. Diese Untersuchungen sollen durch die Einbeziehung der Ergebnisse von Chizhonkov ([3]) bei der Anwendung des Arrow-Hurwitz-Algorithmus zur Lösung linearer Systeme bei stationären Navier-Stokes-Gleichungen weitergeführt werden.

Neben Phasenumwandlungsprozessen in Metallen ([1]) sind für die Praxis Simulationen von mechanischen Deformationen bei induktiven Erwärmungsprozessen von großer Bedeutung. Dazu können Modelle benutzt werden, die bereits an 2D-Strukturen ([2]) von M. G. Pantelyat erfolgreich getestet wurden. Die begonnene gemeinsame Arbeit soll fortgesetzt werden.

Weitere Aufgaben im Rahmen dieses Projektes sind die Intensivierung der Kooperationsbeziehungen mit R. Hiptmair (Universität Tübingen) und Arbeiten zur Vervollkommnung der grafischen Darstellungen von elektromagnetischen Feldern im 3D-Fall.

Literatur

1. J. FUHRMANN, D. HÖMBERG, M. UHLE, *Numerical simulation of induction hardening of steel*, COMPEL, **18** (1999), No. 3, pp. 482–493.

2. M. G. PANTELYAT, *Application of the finite element method for coupled eddy current, Thermal and mechanical problems*, in: 6. Internationales IGTE Symposium, Technische Universität Graz, Österreich, 1994.

3. E. V. CHIZHONKOV, *Über die Konvergenz des Arrow-Hurwitz-Algorithmus für algebraische Systeme vom Stokes'schen Typ*, in: Berichte der Akademie der Wissenschaften, Band 361, No. 5 (in Russisch), 1998, pp. 600–602.

4.4 Forschungsgruppe Nichtlineare Optimierung und Inverse Probleme

4.4.1 Zusammenfassung

Die Forschungsgruppe ging im Jahr 1999 aus der vormaligen Forschungsgruppe „Integralgleichungen und Pseudodifferentialgleichungen“ (Leitung S. Prößdorf†) hervor. Die gegenwärtige Zusammensetzung wurde erst im September ’99 komplettiert mit dem Dienstantritt des aktuellen Leiters, V. Schulz. Infolgedessen gestalteten sich die Forschungsaktivitäten der FG in diesem Jahr relativ heterogen.
Im Berichtszeitraum wurde die Forschung in folgenden Schwerpunktbereichen vorangetrieben:

- Numerische Methoden zur Optimierung bei diskretisierten Modellen,
- Direkte und inverse Probleme für diffraktive Strukturen in der Optik,
- Optimierungsprobleme mit zufälligen und nichtglatten Daten.

Diese wurden in Drittmittelprojekten vom BMBF und der DFG gefördert. Darüber hinaus wurden auch in weiteren Bereichen interessante Ergebnisse erzielt, die im Folgenden zusammen mit den oben genannten Schwerpunkten näher dargestellt werden.

4.4.2 Projekte

Numerische Verfahren zur Parameterschätzung bei Pasten und zur Formoptimierung

Bearbeiter: V. Schulz

Kooperation: D. Logashenko, G. Wittum (Universität Heidelberg)

Förderung: BMBF

Das Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung eines numerischen Verfahrens zur Bestimmung von Modellparametern für das Strömungsverhalten von Bingham-Fluiden und darauf aufbauend die Entwicklung optimaler Messdüsengeometrien. Bingham-Materialien gehören zur Klasse der nicht-Newton'schen Fluide. Diese unterscheiden sich von Newton-Fluiden dadurch, dass ihre Zähigkeit vom augenblicklichen Fließzustand abhängt. In technischen Prozessen zeigen diese viskoplastischen Fluide eine weitere Eigenschaft, die in der Rheologie als Wandgleiten bekannt ist. Damit wird ein Phänomen beschrieben, das auf reibungsbedingte Strukturveränderungen des Materials zurückgeführt werden kann.
Beide Gesetzmäßigkeiten werden durch Gleichungen beschrieben, die von a priori unbekannten Parametern abhängen. Diese Systemparameter sollen aus Druckmessungen am Strömungsrand bestimmt werden (vgl. Abb. 1 zum Messaufbau).

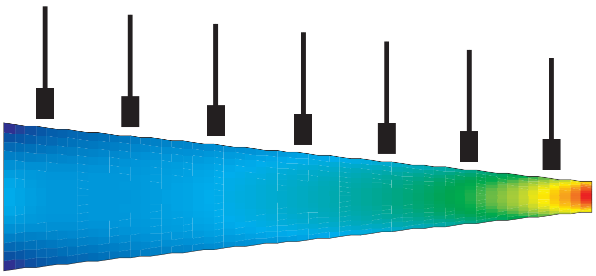


Abb. 1: Messaufbau zur Parameterschätzung bei Pasten.

Hierbei wird als Lösungszugang der Output-least-squares-Ansatz gewählt, der den Vorteil hat, auch eine statistische Interpretation und Bewertung der erhaltenen Parameterschätzung über die Berechnung einer Kovarianzmatrix der geschätzten Parameter zu ermöglichen.
Als Lösungsverfahren für den Diskretisierungsanteil haben wir aufgrund seiner optimalen Komplexität ein Mehrgitterverfahren in einer nichtlinearen Variante eingesetzt ([2]). Zur Lösung dieses Optimierungsproblems ist für eine einfache 2D-Konfiguration ein erstes SQP-Verfahren implementiert worden (vgl. Abb. 1). Endziel des Projektes ist ein gesamtes Parameterschätzverfahren im Rahmen des Simultanoptimierungsansatzes ähnlich wie bei anderen, vergleichbar gelagerten Problemstellungen ([1], [3]). Ein weiteres Ziel des Projektes ist es, durch Geometrieänderung die Identifizierbarkeit aller unbekannten Modellparameter sicherzustellen. Hierfür wird die Zuverlässigkeit der Parameterschätzung, also ein Funktional der oben erwähnten Kovarianzmatrix optimiert.

Literatur

1. T. Dreyer, B. Maar, V. Schulz, *Multigrid optimization in applications*, WIAS-Preprint No. 554, 2000, erscheint in: J. Comput. Appl. Math.

2. B. Maar, *Nicht-Newtonsche Fluide – Mehrgitterverfahren für Bingham-Strömungen,* Dissertation, Universität Stuttgart, 1997.

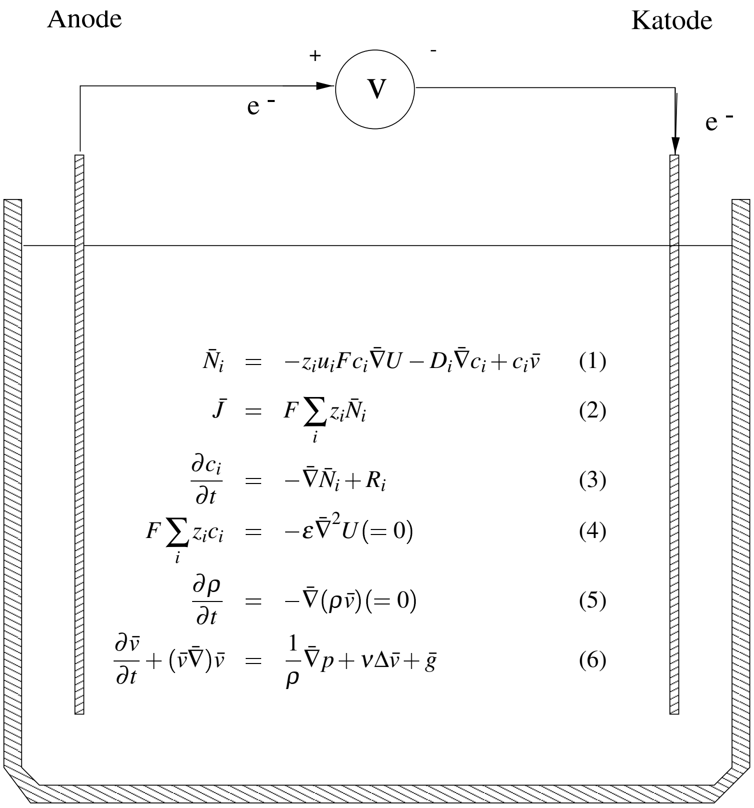
3. G. Wittum, V. Schulz, *Transforming smoothers for optimization saddlepoint problems*, Preprint No. 99–07, IWR, Universität Heidelberg, 1999, eingereicht.

Optimierung von Elektrolyseprozessen

Bearbeiter: V. Schulz, I. Bremer

Kooperation: J. Deconinck (Freie Universität Brüssel, Belgien)

Produkte der Elektrochemie finden vielfältigen Einsatz – angefangen von Metallbeschichtungen bis hin zu Elektrolytlösungen für die Elektro- und Autoindustrie. Die numerische Behandlung elektrochemischer Prozesse steht dabei insbesondere im Bereich Parameterschätzung und Prozessoptimierung noch am Anfang.



$$
\begin{aligned}
\bar{N}_i &= -z_i u_i F c_i \bar{\nabla} U - D_i \bar{\nabla} c_i + c_i \bar{v} && (1)\\
\bar{J} &= F \sum_i z_i \bar{N}_i && (2)\\
\frac{\partial c_i}{\partial t} &= -\bar{\nabla} \bar{N}_i + R_i && (3)\\
F \sum_i z_i c_i &= -\varepsilon \bar{\nabla}^2 U (=0) && (4)\\
\frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\bar{\nabla}(\rho \bar{v})(=0) && (5)\\
\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + (\bar{v}\bar{\nabla})\bar{v} &= \frac{1}{\rho}\bar{\nabla} p + \nu \Delta \bar{v} + \bar{g} && (6)
\end{aligned}
$$

Bei der Modellierung finden die folgenden Gesetzmäßigkeiten Beachtung: die Gleichung für den Flux, der sich aus den Anteilen der Konvektion, der Diffusion und der Ionenmigration, bedingt durch das elektrische Feld, zusammensetzt (1), die Stromdichteverteilung (2), das Massenerhaltungsgesetz (3), die Poisson-Gleichung (4), die Kontinuitätsgleichung (5) und das 2. Newton'sche Gesetz.
Zur Vervollständigung dieses Systems von partiellen Differentialgleichungen werden noch Randbedingungen an den Elektroden und den Gefäßgrenzen formuliert.
Insbesondere die Randbedingungen an den Elektroden führen auf hochgradige Nichtlinearitäten. Es wurden erste Voruntersuchungen zur Parameterschätzung und Prozessoptimierung in diesem wirtschaftlich sehr bedeutenden Anwendungsgebiet durchgeführt.

Literatur

1. J. Deconinck, L. Bortels, B. Van den Bossche, *Transport in dilute solutions – the theory behind –* , VUB, Technical Report 2, 1993.

2. R. Holze, *Leitfaden der Elektrochemie*, Teubner Studienbücher: Chemie, B. G. Teubner, Stuttgart, Leipzig, 1998.

3. I. Rubinstein, *Electro-Diffusion of Ions*, SIAM Stud. Appl. Math., **11** (1990).

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 und vertiefte Modellierung direkter und inverser Beugungsprobleme für optische Gitter, die in Schichtsystemen eingebettet sind. Solche mikrooptischen Elemente realisieren optische Eigenschaften und Funktionen, die mit traditionellen optischen Elementen nicht erreichbar sind. Anwendungsfelder ergeben sich beispielsweise durch die Wirkungsgradsteigerung von beschichteten Solarzellen, durch die Verlängerung der Lebenserwartung von Lasern infolge der Verwendung beschichteter Spiegel, durch Möglichkeiten zur berührungsfreien Temperaturmessung, durch effektivere Einleitung von Energie in Lichtleiter, durch Möglichkeiten der langfristigen Speicherung von Daten auf optischen Medien, verbesserte Möglichkeiten der zerstörungsfreien Materialprüfung und vieles andere mehr.
Konkret werden im Fall der Beugungsgitter die charakterisierenden Größen der reflektierten und transmittierten Moden gesucht, die durch die Beugung einer zeitharmonischen Welle an einer periodischen Struktur entstehen. Ausgangspunkt zur Bestimmung der entsprechenden Rayleigh-Koeffizienten und Wellenvektoren sind die zeitharmonischen Maxwell-Gleichungen im dreidimensionalen Ganzraum mit den bekannten Stetigkeitsbedingungen an den Materialgrenzen und Ausstrahlungsbedingungen im Unendlichen, die in vielen technisch relevanten Fällen auf die Lösung von Variationsproblemen mit nichtlokalen Randbedingungen in einer beschränkten zweidimensionalen Zelle reduziert werden können ([3]).

1. Direkte Probleme:
Die konische Diffraktion wird durch ein System von verallgemeinerten Helmholtzgleichungen, die über Stetigkeitsbedingungen an den Materialgrenzen gekoppelt sind, modelliert. Die Berechnung der Beugungseffektivitäten basiert auf einer verallgemeinerten FE/BE-Diskretisierung in einem beschränkten Gebiet, wobei die Ausstrahlungsbedingungen durch nichtlokale Randintegraloperatoren realisiert werden. Die Konvergenzanalysis des Verfahrens und die Implementierung von direkten und iterativen Gleichungslösern wurde abgeschlossen. Die Untersuchungen von in Dünnschichtsystemen eingebetteten Multilevel-Gittern unter konischem Welleneinfall sind fortgeschritten.
Die analytischen Untersuchungen der Gleichungen für die klassische Diffraktion konzentrierten sich auf den praktisch sehr interessanten Resonanzfall, der eng mit der Wood-Anomalie und dem Auftreten von Oberflächenwellen verknüpft ist. Hierbei geht es um die nichttriviale Lösbarkeit von homogenen Problemen, deren Nachweis für die Beugung in der Nähe von Rayleigh-Frequenzen Erfolg versprechend erscheint. In Anlehnung an Ergebnisse von I. V. Kamotskiĭ und S. A. Nazarov ([1]), die diesen Fall für die Beugung akustischer Wellen an harten, periodischen Oberflächen behandeln konnten, wurden entsprechende Untersuchungen für die Transmissionsprobleme in der diffraktiven Optik begonnen.
Schließlich wurde zusammen mit V. Kozlov (Linköping) begonnen, endlich ausgedehnte Gitter zu behandeln. Erste Korrekturformeln gegenüber den üblicherweise betrachteten unendlich ausgedehnten Gittern konnten mit Methoden der asymptotischen Analysis verifiziert werden.

2. Inverse Probleme:
Die auf Abstiegsverfahren beruhenden Algorithmen zum optimalen Design von Beugungsgittern erfordern die Berechnung der Gradienten der Rayleigh-Koeffizienten bezüglich Änderung der Gitterparameter. Die in [2] erhaltenen analytischen Gradientenformeln waren jedoch auf den Fall schwacher Lösungssingularitäten beschränkt. Um den praktisch wichtigen Fall mehrerer zusammenstoßender Materialien und beliebiger Singularitäten behandeln zu können, wurde in [4] ein neuer Zugang zum gestörten TM-Diffraktionsproblem bei Variation von nichtglatten Gitterprofilen und Grenzflächen entwickelt. Dieser Zugang erlaubt die Berechnung der Ableitungen der Diffraktionskoeffizienten durch wegunabhängige Kurvenintegrale sowohl für binäre diffraktive Elemente als auch für allgemeinere (stückweise glatte) Profile.
Ein weiteres praktisch relevantes inverses Problem ist die Rekonstruktion des Gitterprofils aus den gemessenen Fernfelddaten, das z. B. bei der Inspektion diffraktiver Strukturen auftritt. Dabei ist der Nachweis der lokalen Stabilität solcher Probleme von zentraler Bedeutung. Aufbauend auf den in [4] entwickelten Methoden konnten erste Stabilitätsresultate für das inverse Diffraktionsproblem im Fall nichtglatter Gitterprofile erzielt werden ([5]).

3. Erweiterung des Programmsystems DIPOG zur Lösung direkter und inverser Diffraktionsprobleme bei binären und Multilevel-Gittern:
Die Programme zur Berechnung von Beugungseffektivitäten bei klassischer und konischer Diffraktion wurden zusammengeführt und durch zusätzliche Möglichkeiten zur Dateneingabe und Auswertung erweitert. Die bisher implementierten Algorithmen zur Lösung der direkten Probleme wurden so erweitert, dass Rechnungen auch in von Anwendern häufig benutzten strahlbezogenen Koordinatensystemen durchgeführt werden können. Neben den Beugungseffektivitäten können weitere Kenngrößen diffraktiver Strukturen wie z. B. das elektromagnetische Nahfeld und Phasenverschiebungen einzelner Ordnungen berechnet und graphisch ausgewertet werden. Durch die Wahl von Vorkonditionierern, die bei weitgehender Berücksichtigung der Gittergeometrie die Anwendung der FFT gestatten, konnte die Effektivität des GMRES-Verfahrens zur Lösung der diskretisierten Variationsgleichungen mit den nichtlokalen Randbedingungen erhöht werden. Da unsere Partner auch am Verhalten diffraktiver Elemente in sehr großen Temperaturbereichen interessiert sind, wurden bei der Modellierung der Beugungsgitter sowohl die Temperaturabhängigkeit der Brechungsindizes als auch die Wärmeausdehnung der Gittermaterialien berücksichtigt.
In das Programm zum optimalen Entwurf von Beugungsgittern für die klassische Diffraktion wurde neben der direkten auch die iterative Lösung der bei der Gradientenberechnung auftretenden linearen Systeme integriert, was bei einer Vielzahl der heute technologisch relevanten Gitter zu beträchtlichen Einsparungen an Rechenzeit führt. Bei der Gradientenberechnung wurden die in [4] abgeleiteten effektiven Formeln für beliebige Lösungssingularitäten und mehrere zusammenstoßende Materialien implementiert. Zur Bestimmung der lokalen Minima der das optimale Design charakterisierenden Zielfunktionen werden zwei verschiedene Verfahren angeboten. Beim gemeinsam mit R. Henrion bereits implementierten Gradientenverfahren wurden die Methoden zur Bestimmung von Suchrichtung und Schrittweitensteuerung erweitert. Als Alternative zu diesem Optimierungszugang wurde in Zusammenarbeit mit V. Schulz eine nichtlineare Innere-Punkt-Methode implementiert. Dabei werden die geometrischen und technologischen Restriktionen in das Zielfunktional aufgenommen und dessen lokales Minimum mittels Quasi-Newton-Methode und BFGS-Update der Hesse-Matrix bestimmt.

Literatur

1. I. V. Kamotskiĭ, S. A. Nazarov, *Wood's anomalies and surface waves in the problem of scattering by a periodic boundary*, Sb. Math., **190** (1998), I: pp. 111–141, II: pp. 205–231.

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

3. J. Elschner, R. Hinder, F. Penzel, G. Schmidt, *Existence, uniqueness and regularity for solutions of the conical diffraction problem*, WIAS-Preprint No. 400, 1998, erscheint in: Math. Models Methods Appl. Sci.

4. J. Elschner, G. Schmidt, *Diffraction in periodic structures and optimal design of binary gratings. Part II: Gradient formulas for TM polarisation*, WIAS-Preprint No. 538, 1999.

5. ——, *Local stability of inverse diffraction problems for periodic structures*, in Vorbereitung.

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, Ungarn)

Förderung: DFG-Schwerpunktprogramm „Echtzeitoptimierung großer Systeme“

Schwerpunkt der Arbeit ist die Fortführung des gemeinsam mit G. Wozny (TU Berlin) und 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 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.

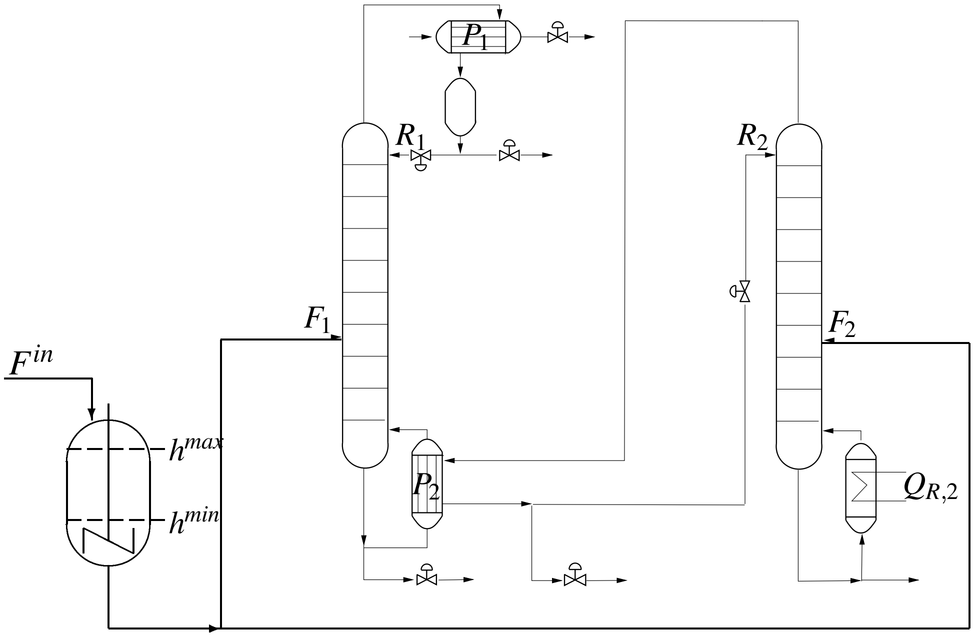


Abb. 1: Fließbild der Versuchsanlage im Parallelbetrieb.

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. 1) 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).

Der Schwerpunkt der Tätigkeit im Berichtszeitraum lag auf der Implementierung verschiedener Modellannahmen zur Stochastik des Feeds innerhalb des SQP-Verfahrens SNOPT ([1]) zur Bestimmung der optimalen Steuerung des Destillationsprozesses. Hierbei wurde zunächst ausschließlich die Zuflussrate zum Feed-Tank als stochastisch angenommen. Für diese Rate dienten als zwei Grundmodelle ein Gauß'scher Prozess einerseits bzw. ein Prozess mit stochastischen Lageparametern andererseits. Im ersten Fall ergeben sich nach Diskretisierung so genannte explizite Wahrscheinlichkeitsrestriktionen unter multivariater Normalverteilung, die durch Kopplung einer Methode von Szántai ([4]) an SNOPT behandelt werden können.
Im zweiten Fall (stochastische Lageparameter) bleiben die Wahrscheinlichkeitsrestriktionen implizit, was ihre Bearbeitung deutlich erschwert. Als erster, vereinfachter Zugang kam der Ansatz einer determinierten und konstanten Zuflussrate mit determinierter Prozessdauer aber stochastischem Prozessbeginn in Betracht. Hierzu wurden für zeitpunktweise Wahrscheinlichkeitsrestriktionen die resultierenden Nebenbedingungen hergeleitet. Eine Implementierung ist in Vorbereitung.
Wie bereits im vorangegangenen Bericht dargelegt, stehen Fragen zur Stabilität mengenwertiger Abbildungen in enger Beziehung zu Optimierungsproblemen mit zufälligen und nichtglatten Daten, wie es z. B. auf das zuvor beschriebene Projekt zutrifft. In diesem Zusammenhang wurde gemeinsam mit J. Outrata (UTIA Prag), der zu einem einmonatigen Gastaufenthalt am WIAS weilte, die Fragestellung untersucht, inwieweit sich das für die Pseudo-Lipschitzstetigkeit von mengenwertigen Abbildungen bekannte Ko-Ableitungskriterium von Mordukhovich ([3]) im Falle der schwächeren, so genannten Calmness-Eigenschaft auf ein entsprechend schwächeres Kriterium reduzieren lässt ([2]).

Literatur

1. 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.

2. R. HENRION, J. OUTRATA, *A subdifferential criterion for the calmness of multifunctions*, WIAS-Preprint No. 553, 2000.

3. B. MORDUKHOVICH, *Complete characterization of openness, metric regularity and Lipschitzian properties of multifunctions*, Trans. Amer. Math. Soc., **340** (1993), pp. 1–35.

4. 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.

Zur Regularisierung einiger Integralgleichungen erster Art

Bearbeiter: G. Bruckner

Kooperation: M. Yamamoto (Universität Tokio, Japan), J. Cheng (Universität Shanghai, China)

Ziel der Untersuchungen ist es, für einige ausgewählte Klassen von Integralgleichungen erster Art Regularisierungsverfahren zu entwickeln. Diese Verfahren beinhalten die Diskretisierung des Problems und sind stabil gegenüber Störungen im Operator und der rechten Seite.
In [2] wurden für eine Klasse linearer Volterra'scher Integralgleichungen vom Konvolutionstyp Approximationsverfahren mit Hilfe der Methode der Regularisierung durch Diskretisierung entwickelt. Als Anwendung wurden Punktquellen einer eindimensionalen Schwingung aus Messungen der Auslenkung in einem fixierten Punkt numerisch identifiziert.
Bei der Lösung vieler Probleme der nichtinvasiven Diagnostik mit Hilfe von akustischen, elastischen oder elektromagnetischen Wellen spielen als mathematische Modelle Integralgleichungen erster Art mit analytischem Kern eine große Rolle. Diese Aufgabenklasse ist wegen der starken Schlechtgestelltheit (die Singulärwerte fallen exponentiell) numerisch schwer zu behandeln.
Als Beispiel für eine Integralgleichung erster Art mit analytischem Kern wurde als erster Schritt in [1] und [3] die Gleichung mit logarithmischem Kern

$$\int_0^1 \log(x-t) f(t) dt = g(x), \;\; x \in [2,3] \,,$$

untersucht. Aus Stabilitätsbetrachtungen wurde eine logarithmische Fehlerabschätzung für die Tikhonov'sche Regularisierung abgeleitet. Die entwickelten Näherungsverfahren wurden implementiert und an synthetischen Daten getestet.

Literatur

1. G. BRUCKNER, J. CHENG, *Tikhonov regularization for an integral equation of the first kind with logarithmic kernel*, WIAS-Preprint No. 463, 1998, eingereicht.

2. G. BRUCKNER, M. YAMAMOTO, *On a noisy operator equation and the identification of point-sources in the 1-D wave equation* (entspricht WIAS-Preprint No. 441, 1998), eingereicht.

3. G. BRUCKNER, *On the regularization of the first kind integral equation with analytical kernel of logarithmic type*, WIAS-Preprint No. 523, 1999.

Adaptive Multiskalenmethoden zur Lösung von Randelementmethoden

Bearbeiter: A. Rathsfeld

Kooperation: R. Klees, R. H. N. Haagmans, M. van Gelderen (Technische Universität Delft, Niederlande), W. Keller (Universität Stuttgart), G. Reinhardt (FG 3)

Förderung: DFG: „Adaptive Multiskalenmethoden zur Lösung von Randelementmethoden"

Im Mittelpunkt der diesjährigen Arbeit stand die Fortführung der Untersuchungen zur Entwicklung optimaler Quadraturalgorithmen für Waveletmethoden. Die Algorithmen für Randelementmethoden mit minimalen Glattheitsvoraussetzungen ([1], [2]) konnten durch den globalen Einsatz der Duffy-Transformation verbessert werden. Hiermit und durch verfeinerte Beweise konnten günstigere Fehlerabschätzungen gezeigt werden. Zu den Waveletmethoden basierend auf den hierarchischen Dreipunktbasen ([3]) und zu den Quadraturmethoden wurden verschiedene numerische Tests durchgeführt. Für Doppel- und Einfachschichtpotentialoperatoren zur Laplace- oder Helmholtzgleichung über glatt berandeten Gebieten konnten die Verbesserung der Kondition des Gleichungssystems und die vorhergesagten Quadraturfehlerabschätzungen bestätigt werden.
Als typisches Beispiel für die neuen Algorithmen haben wir die Berechnung des Erdgravitationsfeldes aus Messdaten an der Erdoberfläche getestet. Hierzu muss eine singuläre Integralgleichung auf der Erdoberfläche gelöst werden. Die Tests unserer Algorithmen mit realistischen Daten zeigten hohe Kompressionsraten und kleine Quadraturfehler. Neben diesem Problem haben wir auch ein schlecht gestelltes Problem betrachtet, bei dem Messdaten von Satelliten genutzt werden sollen. Wie erwartet, können für diese Integralgleichung nur geringe Kompressionen erzielt werden, die aber aufgrund fehlender Speicherkapazität wichtig sind. Als Regularisierungsmethode hat sich ein abgebrochenes GMRes-Verfahren als günstig erwiesen.

Literatur

1. S. Ehrich, A. Rathsfeld, *Piecewise linear wavelet collocation on triangular grids, Approximation of the boundary manifold and quadrature*, WIAS-Preprint No. 434, 1998.

2. A. Rathsfeld, *Quadrature methods for 2D and 3D problems*, WIAS-Preprint No. 512, 1999, erscheint in: J. Comput. Appl. Math.

3. ——, *On a hierarchical three point basis of piecewise linear functions over smooth boundaries*, erscheint in: Proceedings of TMP '99.

Integralgleichungsmethoden für Probleme der mathematischen Physik

Bearbeiter: J. Niebsch, G. Schmidt

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

Förderung: INTAS

Die Arbeiten zur theoretischen Untersuchung des Konvergenzverhaltens von Zeitschrittverfahren zur Lösung von nichtlinearen Evolutionsgleichungen mit nichtlokalen Operatoren, die auf einer von V. Maz'ya vorgeschlagenen Approximationsmethode für Integraloperatoren beruhen ([2] enthält einen Überblick dieser Methode), wurden im Wesentlichen abgeschlossen ([1]). Betrachtet wird u. a. ein explizites Zeitschritt-Verfahren zur Lösung des Cauchy-Problems für Gleichungen der Gestalt

$$u_t - P_1(D_x)u = P_2(D_x)F(x,t,u,P_3(D_x)u)\ ,\ t > 0\ ,\ x \in I\!R^d\ , \quad u(x,0) = \varphi(x)\ ,$$

mit Pseudodifferentialoperatoren $P_i(D_x)$ und einer glatten Funktion F. Die Werte der Näherungslösung $u_n(x) = u(x,n\tau)$ werden aus den Gleichungen

$$\begin{aligned}\tau^{-1}(u_n - u_{n-1}) - \theta_1 P_1(D_x)u_n - (1-\theta_1)P_1(D_x)u_{n-1}&\\ = P_2(D_x)[((1+\theta_2)F_{n-1}(x) - \theta_2 F_{n-2}(x)]&\end{aligned}$$

bestimmt, wobei $F_n(x) = F(x,n\tau,u_n,P_3(D_x)u_n)$ und $0 < \theta_i \leq 1$ sind. Mit den Bezeichnungen

$$\mu = \tau\theta_1\ ,\ y = u_n + (\theta_1^{-1} - 1)u_{n-1}\ ,\ f = \theta_1^{-1}u_{n-1}\ ,\ g = \tau[(1+\theta_2)F_{n-1} - \theta_2 F_{n-2}]$$

ergibt sich das lineare Problem

$$-\mu P_1(D_x)y + y = f + P_2(D_x)g\ ,\ x \in I\!R^d\ ,$$

mit der Lösung $y = f + (R-I)f + P_2Rg$, $R = (I - \mu P_1)^{-1}$. Bei den vorgeschlagenen Näherungsverfahren erfolgt die räumliche Approximation durch Quasi-Interpolanten

$$(\mathcal{M}_h f)(x) = \mathcal{D}^{-d} \sum_{m \in \mathbb{Z}^d} f(mh)\eta\big(\frac{x-mh}{\mathcal{D}h}\big)\ ,$$

wobei die Basisfunktion η und ihre Fouriertransformierte hinreichend schnell fallen und gewisse Momentenbedingungen erfüllen. Die Näherungslösung wird gesucht in der Form

$$y_h = f + (R-I)\mathcal{M}_h f + P_2 R\mathcal{M}_h g\ ,$$

so dass sich die Werte von y_h auf dem gleichmäßigen Gitter $x_k = kh$ als endliche Linearkombinationen der Werte der Faltungsoperatoren

$$(R\eta)\big(\frac{k-m}{\mathcal{D}}\big) \quad \text{und} \quad (P_2R\eta)\big(\frac{k-m}{\mathcal{D}}\big)$$

ergeben. In vielen relevanten Fällen ist es möglich, die Integrale analytisch zu berechnen oder die beschränkte Anzahl dieser Werte durch eindimensionale Quadraturen im Voraus zu berechnen. Somit erhält man folgende Vorschrift zur Berechnung der Näherungslösung $u_{n,h}$ des Cauchy-Problems:

$$u_{n,h} = u_{n-1,h} + \theta_1^{-1}(R-I)\mathcal{M}_h u_{n-1,h} + \tau P_2 R\mathcal{M}_h[(1+\theta_2)F_{n-1} - \theta_2 F_{n-2}]\ .$$

Es konnte gezeigt werden, dass z. B. für $\theta_1 = \theta_2 = 1/2$ die Ordnung dieses Diskretisierungsschemas $O(\tau^3 + \tau h^N)$ beträgt, wobei N durch η bestimmt wird. So liefert z. B. die Wahl

$$\eta(x) = \pi^{-d/2} L_m^{(d/2)}(|x|^2)\exp(-|x|^2)$$

mit den verallgemeinerten Laguerre'schen Polynomen $L_m^{(d/2)}$ den Exponenten $N = 2m+2$. Damit wurden die numerischen Resultate, über die in [3] für verschiedene Klassen von Gleichungen mit nichtlokalen Operatoren berichtet wurde, theoretisch untersetzt. Des Weiteren wurde nachgewiesen, dass der bei der Approximation und Kubatur auftretende Sättigungsfehler bei genügend großem $\mathcal{D}$ keinen Einfluss auf den Diskretisierungsfehler hat.
Im Fall beschränkter Gebiete oder unstetiger Anfangswerte ist bei diesen Verfahren die effektive Berechnung von Integraloperatoren mit unstetigen Dichten notwendig. In [5] wurden die in [4] vorgeschlagene Methode der Gitterverfeinerung auf anisotrope Gitter verallgemeinert und effektive Formeln zur Kubatur von Potentialen über Polyedergebieten untersucht, wobei gleiche Approximationseigenschaften wie im Fall glatter Funktionen und gleichmäßig verteilter Knotenpunkte erzielt werden.

Literatur

1. J. NIEBSCH, *Solving evolution equations with approximate approximations*, Poster, 9th International Meeting of European Women in Mathematics, Kloster Loccum, 1999.

2. G. SCHMIDT, *Approximate Approximations and their applications*, in: The Maz'ya Anniversary Collection, Vol. 1 (J. Rossmann, P. Takác, G. Wildenhain, Hrsg.), Oper. Theory Adv. Appl., **109**, Birkhäuser, Basel, 1999, pp. 111–136.

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

4. T. IVANOV, V. MAZ'YA, G. SCHMIDT, *Boundary layer approximations and cubature of potentials in domains*, Adv. Comput. Math., **10** (1999) No. 3/4, pp. 311–342.

5. ——, *Boundary layer approximate approximations for the cubature of potentials*, in: Mathematical Aspects of Boundary Element Methods (M. Bonnet, A.-M. Sändig, W. L. Wendland, Hrsg.), Chapman & Hall/CRC Res. Notes Math., London, 1999, pp. 165–177.

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. Dabei wurden einige neue Schwerpunkte erschlossen: In der Theorie ungeordneter Systeme wurden verstärkt die dynamischen Aspekte betrachtet, und in der Theorie wechselwirkender Verzweigungsprozesse wurden erstmals symmetrisch miteinander wechselwirkende Prozesse untersucht. Damit soll weiter das Ziel verfolgt werden, Methoden zur Behandlung möglichst realistischer und damit anwendungsrelevanter Modelle zu entwickeln.

Besonders erfreulich war auch in diesem Jahr die Entwicklung des fremdfinanzierten Mitarbeiterpotentials der Forschungsgruppe. So wurden im Rahmen des Schwerpunktprogrammes „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“ der DFG 1,5 Stellen bewilligt, eine weitere Doktorandenstelle wurde im Normalverfahren von der DFG eingeworben. Im Weiteren wurden ein Doktorand und zwei Postdoktoranden aus dem Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“ sowie ein weiterer Postdoktorand im HCM-Programm „Stochastic Analysis“ in der Gruppe betreut.

Im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms „Interagierende Stochastische Systeme von hoher Komplexität“ war die Forschungsgruppe an der Organisation eines Internationalen Workshops „Stochastic models in physics“ an dem neu gegründeten Institut EURANDOM in Eindhoven beteiligt; darüber hinaus war das WIAS wieder Gastgeber eines Kolloquiums dieses Programms.

Im Folgenden werden die in diesem Jahr erzielten wissenschaftlichen Ergebnisse näher dargestellt.

4.5.2 Projekte

Tieftemperaturphasen in Modellen mit langreichweitiger Wechselwirkung

Bearbeiter: A. Bovier, C. Külske

Kooperation: M. Zahradník (Karls-Universität Prag, Tschechische Republik)

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

Eine Einführung in die allgemeine Thematik dieses Projektes wurde im Jahresforschungsbericht 1997 gegeben.

In diesem Jahr wurden erhebliche Fortschritte in Richtung auf die Herleitung von Methoden der Clusterentwicklung und der Pirogov-Sinai-Theorie für Modelle mit schwacher langreichweitiger Wechselwirkung erzielt. Eine Arbeit, in der diese Resultate dargestellt werden, steht kurz vor der Fertigstellung ([1]). Damit werden dann die nötigen Techniken zur Untersuchung des Random-Field-Kac-Modells bereitstehen. In diesem Zusammenhang wurde als Nebenresultat eine sehr einfache allgemeine Methode zur Kontrolle partieller Entwicklungen von Polymer-Modellen veröffentlicht ([2]), die in der Folge bei der iterativen Behandlung ungeordneter Modelle sehr hilfreich sein wird.

Bei der Untersuchung von Modellen langreichweitiger Wechselwirkungen ist es von Bedeutung, eine Blockapproximation durch ein Modell auf einer mesoskopischen Skala zu finden. Am Beispiel des Kac-Modells im Zufalls-Magnetfeld wurde gezeigt, wie dieses mesoskopische Modell durch ein zufälliges Gibbs-Maß mit explizit konstruierbarem zufälligen Potential beschrieben werden kann.

Aus der Theorie der zufälligen Gibbs-Maße wurde ferner folgendes allgemeine Problem untersucht, für das ein nichttriviales Beispiel durch das Ising-Modell im Zufallsmagnetfeld geliefert wird. Es ist motiviert durch konkrete Anwendungen in der physikalischen Literatur ([3], [4]) und ebenso von innermathematischem Interesse.

Man betrachte ungeordnete Gitterspinmodelle mit Gibbs-Maßen $\mu_\Lambda[\eta](d\sigma)$ im endlichen Volumen. Hier bezeichnet σ die Gitterspin-Variable und η eine Gitter-Zufallsvariable mit Produkt-Verteilung. η bezeichnet die eingefrorene Unordnung des Modells. Können nun die gemeinsamen Maße $\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{Z}^d} P(d\eta)\mu_\Lambda[\eta](d\sigma)$ als Gibbs-Maße auf dem Produkt von Spin-Raum und Raum der Unordnung aufgefasst werden? Falls nicht, gelingt dies, wenn man den Begriff des Gibbs-Maßes verallgemeinert? Diese Fragestellung hat eine gewisse formale Analogie zur Untersuchung der Gibbs-Eigenschaft bei den Bildmaßen von Niedrig-Temperatur-Spin-Modellen unter Renormierungsgruppen-Abbildungen, zu dem bereits eine reichhaltige Literatur existiert.

In [5] wurden nun allgemeine Kriterien für die Gibbs-Eigenschaft bewiesen, die auf der negativen Seite zeigen, dass in einer Vielzahl von Fällen die betrachteten Maße nicht-Gibbs'sch sind. Darüber hinaus ist häufig sogar die schwächere fast-sichere Gibbs-Eigenschaft verletzt. Auf der positiven Seite beweisen wir jedoch ([6]), dass immer ein Wechselwirkungs-Potential (als Funktion von Spins und Unordnungsvariablen) existiert, das absolut auf einer Menge vom Maß eins (hinsichtlich des betrachteten gemeinsamen Maßes) konvergiert („schwache Gibbs-Eigenschaft“). Eine schöne Illustration für dies liefert das Ising-Modell im Zufalls-Magnetfeld. Für dieses zeigen wir das Vorliegen [Nicht-Vorliegen] der fast-sicheren Gibbs-Eigenschaft in der Ein- [Mehr-] Phasenregion des Phasendiagramms.

Außerdem wurden Kriterien bewiesen für die Konvergenz von Vakuum-Potentialen, Kriterien für den Abfall von Potentialen und weitere Anwendung auf Modelle mit zufälligen Kopplungen (vom ferromagnetischen oder Spin-Glas-Typ) diskutiert.

Literatur

1. A. BOVIER, M. ZAHRADNÍK, in Vorbereitung.

2. ——, *A simple inductive approach to the problem of convergence of cluster expansions of polymer models*, WIAS-Preprint No. 536, 1999.

3. R. KÜHN, *Critical behavior of the randomly spin diluted 2D Ising model: A grand ensemble approach*, Phys. Rev. Lett., **73** (1994), pp. 2268–2271.

4. A. C. D. VAN ENTER, C. KÜLSKE, C. MAES, *Comment on [3]*, eingereicht.

5. C. KÜLSKE, *(Non-) Gibbsianness and phase transitions in random lattice spin models*, Markov Proc. Rel. Fields, **5** (1999) pp. 357–383.

6. ——, *Weakly Gibbsian representations for joint measures of quenched lattice spin models*, WIAS–Preprint No. 411, 1999, erscheint in: Probab. Theory Related Fields.

Stochastische Dynamik

Bearbeiter: A. Bovier, B. Gentz

Kooperation: N. Berglund (School of Physics, Georgia Tech, Atlanta, USA), V. Gayrard (CPT–Marseille, Frankreich), M. Klein, M. Eckhoff (Universität Potsdam)

Die im Jahresforschungsbericht 1998 beschriebene Thematik der stochastischen Dynamik wurde 1999 intensiv weiterbetrieben und als thematischer Schwerpunkt ausgebaut, wobei sich sowohl eine Reihe neuer Resultate als auch zahlreiche neue Anwendungsperspektiven eröffnet haben.
Zunächst wurde in [1] für eine sehr große Klasse von Markov-Prozessen, die die in [2] behandelten reversiblen Prozesse als Spezialfall enthalten, ein Prinzip Großer Abweichungen im Pfadraum bewiesen. Die wesentliche Schwierigkeit, derentwegen bekannte Resultate nicht ohne weiteres greifen, liegt in fehlenden Regularitätsvoraussetzungen an den Rändern sowie, zum geringeren Teil, an expliziten Abhängigkeiten von Übergangswahrscheinlichkeiten vom kleinen Parameter des Problems.
Ganz erhebliche Fortschritte für den in [2] behandelten reversiblen Fall wurden in Richtung auf ein besseres Verständnis des Zusammenhangs zwischen der Spektraltheorie einerseits und dem Phänomen der Metastabilität andererseits erhebliche Fortschritte erzielt. Diese betreffen auf abstraktem Niveau ganz allgemein Markov-Ketten, deren Zustandsraum in Gebiete zerfällt, zwischen denen Übergänge sehr unwahrscheinlich sind, während andererseits ausgezeichnete Punkte in jedem Gebiet stets „sehr schnell“ besucht werden. Unter zusätzlichen Generizitätsannahmen kann dann jedem solchen Gebiet eine „metastabile“ Austrittszeit τ_i zugeordnet werden, welche dann mit großer Genauigkeit als Inverse eines der Eigenwerte der Übergangsmatrix identifiziert wird. Insgesamt wird damit dem Spektrum der Übergangsmatrix nahe bei eins eine präzise physikalische Interpretation gegeben. Im konkreten Fall von diskreten Diffusionsprozessen in einem „multi-well“-Potential, wie sie in [2] behandelt wurden, können dann mittels der spezifischen Resultate aus [2] sehr genaue Abschätzungen für alle diese Größen als Funktion des Potentials gegeben werden. Darüber hinaus lassen sich dann äußerst scharfe Abschätzungen an die Verteilungsfunktion der Austrittszeiten herleiten. Eine Veröffentlichung dieser Ergebnisse ist in Vorbereitung ([3]).
Wie sich herausstellt, sind Resultate dieser Art von erheblichem Interesse bei der numerischen Behandlung von Problemen der Molekulardynamik, wie sie am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) behandelt werden ([4]). Es wird daher geplant, die bisher erhaltenen Resultate unter in solchen Situationen natürlichen Annahmen zu verallgemeinern. Hierzu bestehen inzwischen Kontakte mit entsprechenden Arbeitsgruppen am ZIB.

Ebenfalls von erheblichem praktischem Interesse sind Dynamische Systeme mit langsam variierendem Parameter unter dem Einfluss stochastischer Störungen. Dabei sind solche Systeme von besonderem Interesse, bei denen das ungestörte System interessante Effekte wie Bifurkationen und Hysterese aufweist. Während hier die Einflüsse der Zeitabhängigkeit auf das singuläre Verhalten in einigen Fällen recht genau untersucht sind ([5]), ist über das Zusammenspiel mit stochastischen Störungen wenig bekannt. Zunächst haben wir am Beispiel einer dynamischen Pitchfork-Bifurkation $\varepsilon\dot{x}_t = f(x_t,t)$ den Einfluss eines kleinen additiven Rauschens auf dynamische Bifurkationen untersucht. Dabei lässt sich die Lösung der zugehörigen stochastischen Differentialgleichung (SDGL)

$$dx_t = \frac{1}{\varepsilon} f(x_t,t)\,dt + \frac{\sigma}{\sqrt{\varepsilon}}\,dW_t, \qquad t \in [-T,T],$$

pfadweise kontrollieren. Es zeigt sich, dass für kleines Rauschen die Lösung der SDGL bis zu einer Zeit der Ordnung $\sqrt{\varepsilon}$ mit hoher Wahrscheinlichkeit in einer kleinen Umgebung der Lösung des entsprechenden deterministischen Systems liegt. Danach zeigt sich, dass die zufällige Störung die im deterministischen Fall auftretende so genannte Bifurkationsverzögerung zerstört, sofern das Rauschen nicht exponentiell klein ist. Bereits nach einer Zeit der Ordnung $(\varepsilon |\log \varepsilon|)^{1/2}$ folgen die Lösungen mit hoher Wahrscheinlichkeit einem der Gleichgewichtszweige.
Im Weiteren sollen mit den entwickelten Methoden Hysterese-Effekte und stochastische Resonanz untersucht werden.

Literatur

1. A. BOVIER, V. GAYRARD, *Sample path large deviations for Markov processes with slowly varying transition probabilities*, WIAS-Peprint No. 487, 1999.

2. A. BOVIER, M. ECKHOFF, V. GAYRARD, M. KLEIN, *Metastability in stochastic dynamics of disordered mean-field models*, WIAS-Preprint No. 416, 1998, erscheint in: Probab. Theory Related Fields (2000).

3. ——, *Metastability and low-lying eigenvalues for Markov chains*, in Vorbereitung.

4. CH. SCHÜTTE, *Conformational dynamics: Modelling, theory, algorithm, and application to biomolecules*, Preprint Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) SC 99-18, 1999.

5. N. BERGLUND, *Adiabatic dynamical systems and hysteresis*, Dissertation, EPF Lausanne, 1998.

Katalytische Verzweigungsstrukturen

Bearbeiter: K. Fleischmann

Kooperation: D. A. Dawson (The Fields Institute, Toronto, Kanada), J.-F. Delmas (ENCPC-CERMICS, Marne La Vallée, Frankreich), A. M. Etheridge (University of Oxford, Großbritannien), A. Klenke (Universität Erlangen-Nürnberg), C. Mueller (University of Rochester, USA), L. Mytnik (Technion Haifa, Israel), E. A. Perkins (University of British Columbia, Vancouver, Kanada), V. A. Vatutin (Steklov Mathematical Institute, Moskau, Russland), J. Xiong (University of Tennessee, Knoxville, USA)

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

Katalytische Verzweigungsprozesse beschreiben die Evolution von zweierlei Arten von Materialien (oder Populationen), Katalysator und Reaktant genannt. Der Katalysator entwickelt sich autonom und beeinflusst den Reaktanten. Die „Individuen“ beider Substanzen sind Veränderungen durch Bewegung, Wachstum (Teilung) und „Tod“ unterworfen. Einen Überblick über dieses stark in Entwicklung befindliche mathematische Gebiet haben wir kürzlich in [2] gegeben.
Eins der zentralen Modelle hierzu ist ein *stetiger Super-Brown'scher Reaktant* X^ρ *mit einem Super-Brown'schen Katalysator* ρ. Dieses Modell ist schon recht gut untersucht (siehe z. B. [5]), das Bild wurde aber in diesem Jahr ergänzt ([6]): Wir haben nachgewiesen, dass der dreidimensionale Reaktant nach unendlicher Zeit eine abzählbar *lokal unendliche Biodiversität* (genetische Abundanz) besitzt, im Unterschied zur lokal endlichen Biodiversität der klassischen Gleichgewichtszustände der Super-Brown'schen Bewegung. Diese unendliche Biodiversität ist letztlich darin begründet, dass der dreidimensionale Reaktant sich mit *unendlicher* Geschwindigkeit im Raum ausbreitet. Diese überraschende Eigenschaft wird auch benutzt, um nachzuweisen, dass jede (nicht verschwindende) endliche Reaktantenmasse zu jeder endlichen Zeit noch „Nachkommen“ hat, auch im Unterschied zur klassischen Super-Brown'schen Bewegung. Allerdings sterben zwei- und dreidimensionale endliche Reaktantenmassen schließlich nach unendlicher Zeit aus, im Kontrast zur persistenten Konvergenz im Eindimensionalen.
Um das Verständnis für den Einfluss variierender Medien auf Super-Brown'sche Bewegungen zu vertiefen, haben wir das Aussterbeverhalten in Abhängigkeit einer raumabhängigen zusätzlichen Massenproduktion untersucht ([4]): Es gibt eine kritische Schwellenfunktion, unterhalb der in endlicher Zeit ein Aussterben bzw. ein lokales Aussterben stattfindet. Dabei tritt in Dimensionen größer als sechs ein *Phasenübergang* auf.
Unserer langfristigen Konzeption folgend wurden die Bemühungen verstärkt, zu *wechselseitigen katalysierenden Verzweigungsstrukturen* überzugehen. Hier wirkt umgekehrt auch der Reaktant auf den Katalysator zurück („Symmetrisierung“). Dadurch wird die Grund-Unabhängigkeits-Annahme der Verzweigungstheorie vollständig außer Kraft gesetzt, wodurch insbesondere auch der bisher so wertvolle Zusammenhang zu Reaktions-Diffusions-Gleichungen verloren geht. Deshalb sind vollständig neuartige Methoden gefragt. Nach den Pionierarbeiten von Dawson, Mytnik und Perkins ([3], [9]), die ein solches Modell im d-dimensionalen Gitter und auf der reellen Achse R begründeten und untersuchten, wurden vereint große Anstrengungen unternommen ([1]), auch im kontroversen Fall des R^2 die nichttriviale Existenz einer wechselseitig katalytischen Super-Brown'schen Bewegung nachzuweisen. Es ist zu erwarten, dass diese Bemühungen im folgenden Jahr erfolgreich sein werden.

Ein natürliches Anliegen besteht darin, mehr als nur zwei Substanzen zu betrachten. Ein zyklischer Ansatz ist dabei naheliegend: $K \geq 2$ viele Typen von Materialien sind zyklisch angeordnet, und die Verzweigung eines jeden Typs wird durch die lokale Massenkonzentration des benachbarten Typs gesteuert. Für $K \geq 3$ ist bereits die Grundfrage der nichttrivialen Existenz eine Herausforderung, da ein zentrales technisches Mittel der wechselseitigen katalysierenden Verzweigungsprozesse, nämlich Mytniks *Selbstdualität* ([9]), hier nicht mehr zur Verfügung steht. In [7] ist es uns gelungen, hierzu einen Ausweg zu finden: In Verallgemeinerung von Methoden von Stroock und Varadhan ([10]), entwickelt für endlich-dimensionale Diffusionen, kann schließlich über ein Optimierungsverfahren eine *streng Markov'sche* Lösung des unendlich-dimensionalen Martingalproblems konstruiert werden. Die so erhaltene *zyklisch katalysierende Super-Brown'sche Bewegung* in R hat ein interessantes Langzeitverhalten: Wenn man mit endlichen Massen startet, werden benachbarte Typen *global segregiert* (Nichtkoexistenz benachbarter Typen). Andererseits ist es in Abhängigkeit von der konkreten Wahl der endlichen Anfangszustände möglich, dass entweder alle Typen jede endliche Zeit überleben oder dass ein gegebener Typ ab einer gegebenen Zeit mit hoher Wahrscheinlichkeit ausgestorben ist. Dies verallgemeinert Resultate und verfeinert Methoden von Dawson, Mueller und Perkins ([3], [8]).

Literatur

1. D. A. DAWSON, A. M. ETHERIDGE, K. FLEISCHMANN, L. MYTNIK, E. A. PERKINS, J. XIONG, *Mutually catalytic super-Brownian motion in* R^2, in Vorbereitung.

2. D. A. DAWSON, K. FLEISCHMANN, *Catalytic and mutually catalytic branching*, WIAS-Preprint No. 510, 1999.

3. D. A. DAWSON, E. A. PERKINS, *Long-time behavior and coexistence in a mutually catalytic branching model*, Ann. Probab., **26** (1998), No. 3, pp. 1088–1138.

4. J. ENGLÄNDER, K. FLEISCHMANN, *Extinction properties of super-Brownian motions with additional spatially dependent mass production*, WIAS-Preprint No. 486, 1999, erscheint in: Stochastic Process Appl., 2000.

5. K. FLEISCHMANN, A. KLENKE, *Smooth density field of catalytic super-Brownian motion*, Ann. Appl. Probab., **9** (1999), No. 2, pp. 298–318.

6. ——, *Biodiversity of catalytic super-Brownian motion*, WIAS-Preprint No. 501, 1999, erscheint in: Ann. Appl. Probab., 2000.

7. K. FLEISCHMANN, J. XIONG, *A cyclically catalytic super-Brownian motion*, WIAS-Preprint No. 528, 1999.

8. C. MUELLER, E. PERKINS, *Extinction for two parabolic stochastic PDE's on the lattice*, Preprint, Univ. Rochester, 1999.

9. L. MYTNIK, *Uniqueness for a mutually catalytic branching model*, Probab. Theory Related Fields, **112** (1998), No. 2, pp. 245–253.

10. D. W. STROOCK, S. R. S. VARADHAN, *Multidimensional diffusion processes*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1979.

Elektronentransport in ungeordneten Materialien

Bearbeiter: A. Liemant

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

In Zusammenarbeit mit der Universität Potsdam wurden die Untersuchungen zum Hoppingtransport von Ladungsträgern in ungeordneten Materialien weiter betrieben. Eine zentrale Aufgabe bei der Untersuchung des Transportes von Ladungsträgern in ungeordneten Materialien ist die Bestimmung von effektiven Eigenschaften wie Leitfähigkeit, Beweglichkeit und Diffusivität aus der Kenntnis der mikroskopischen Struktur des Materials. Der physikalische Hintergrund der mikroskopischen Dynamik ist ein Hoppingtransport der Ladungsträger auf einem ungeordneten Gitter (räumlich und energetisch lokalisierte Energiezustände) unter Berücksichtigung des Ausschlussprinzips, das Mehrfachbesetzungen nicht zulässt. Mittels eines Ansatzes für die Sprungintensitäten wurden sowohl die thermischen Fluktuationen als auch die Einwirkungen eines elektrischen Feldes modelliert. Durch eine vereinfachte Beschreibung der Dynamik mittels einer Hoppingratengleichung für die 1-Partikelverteilungsfunktion wurde bisher eine Drift-Diffusionsgleichung für die Ladungsdichte $\rho = \rho_t(x)$ gewonnen,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot [D \nabla \rho + \sigma \nabla \varphi] \, (\varphi\text{-elektrisches Potential}). \tag{1}$$

Der Diffusionskoeffizient $D = D(\rho)$ und die Leitfähigkeit $\sigma = \sigma(\rho)$ hängen explizit von den Materialcharakteristiken ab. Diese sind die räumliche und die energetische Zustandsdichte N und $g(E)$ und die Hoppingrate w.

Es wurde die eindimensionale Variante der nichtlinearen partiellen Differentialgleichung (1) — gekoppelt mit einer Poissongleichung — unter verschiedensten Anfangs- und Randbedingungen numerisch gelöst und damit wurden unterschiedliche experimentelle Bedingungen für den Ladungstransport in einer dünnen Schicht simuliert. Im Zusammenspiel von Computersimulation und theoretischen Überlegungen konnten Ergebnisse über den Zusammenhang von Messdaten wie Transitzeit, Gesamtstrom u. a. mit den Materialcharakteristiken erzielt werden. Unter anderem gelang es auch, ein inverses Problem zu lösen: die Bestimmung der Energiezustandsdichte $g(E)$ aus den stationären Lösungen $\rho(x)$ einer bestimmten Randwertaufgabe von (1).

Effektive Steuerung von stochastischen Partikelverfahren für Strömungen in verdünnten Gasen

Bearbeiter: W. Wagner, I. Matheis

Kooperation: S. Caprino (Università di Roma „Tor Vergata“, Rom, Italien), A. Garcia (San Jose State University, San Jose, USA), M. Pulvirenti (Università di Roma „La Sapienza“, Rom, Italien), S. Rjasanow (Universität des Saarlandes, Saarbrücken)

Förderung: Volkswagenstiftung (RiP-Programm Oberwolfach)

In wichtigen Anwendungsbereichen wie Raumfahrt oder Vakuumtechnologie erfolgt die mathematische Beschreibung der zugrunde liegenden 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

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

mit

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

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.
Aufgrund 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

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

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 Arbeiten der vergangenen Jahre wurde ein auf einem neuartigen Wechselwirkungsmechanismus basierender Zugang zu dem oben skizzierten Problem der Varianzreduktion entwickelt. In [1] wurden diese Ergebnisse erfolgreich auf eine räumlich zweidimensionale Testkonfiguration

mit starken Dichtegradienten angewendet. Des Weiteren konnte ein neues Verfahren zur Behandlung von Randbedingungen entwickelt werden, welches geeignete Steuerungsmechanismen für den Teilchenstrom beinhaltet. Bei der Bestimmung verschiedener Funktionale wurde eine Effektivitätssteigerung von mehreren Größenordnungen erzielt.
Neben der zu einem entsprechenden numerischen Fehler führenden endlichen Anzahl von Simulationsteilchen beinhalten stochastische Verfahren zur Behandlung der Gleichung (1) weitere Approximationsparameter. Ein solcher Parameter ist die Zeitschrittweite, die dazu benutzt wird, die Prozesse der freien Bewegung und der Kollisionen zu entkoppeln. In einer weiteren Arbeit ([2]) wurden Untersuchungen zur Konvergenzordnung bezüglich dieses Parameters angestellt. Für verschiedene einfache Strömungen konnte Konvergenz zweiter Ordnung bezüglich der Zeitschrittweite bei der Bestimmung von unterschiedlichen Transportkoeffizienten nachgewiesen werden. Diese Untersuchungen wurden sowohl für transiente als auch für stationäre Strömungen durchgeführt.

Literatur

1. S. RJASANOW, W. WAGNER, *Simulation of rare events by the stochastic weighted particle method for the Boltzmann equation*, WIAS-Preprint No. 502, 1999.

2. A. L. GARCIA, W. WAGNER, *Time step truncation error in direct simulation Monte Carlo*, WIAS-Preprint No. 522, 1999.

Stochastische Partikelsysteme als numerische Verfahren für Probleme der Aerosoldynamik

Bearbeiter: W. Wagner, A. Eibeck

Kooperation: H. Babovsky (Technische Hochschule Ilmenau), A. Kolodko (Institut für Numerische Mathematik, Novosibirsk, Russland), K. Sabelfeld (FG 6)

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

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

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 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 V in der Gleichung (1) charakterisiert. In der Arbeit [1] wurden Untersuchungen zur Behandlung des räumlich inhomogenen Falls durchgeführt. Anhand numerischer Experimente wurde der Einfluss des zufälligen Mediums auf wichtige Charakteristika des Koagulationsprozesses, wie mittlere Teilchenanzahl oder Größenverteilung der Teilchen, untersucht.
In der Arbeit [2] wurde eine neue Klasse stochastischer Algorithmen zur numerischen Behandlung der räumlich homogenen Koagulationsgleichung entwickelt. Diese Verfahren basieren auf der Einführung einer geeigneten fiktiven Wechselwirkung sowie auf Techniken zur effizienten Modellierung der dabei entstehenden Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Die mathematische Fundierung der Algorithmen basiert auf den im Vorjahr gewonnenen Konvergenzresultaten.
Ein bei stark wachsenden Koagulationsraten K auftretendes Phänomen von sowohl theoretischem als auch praktischem Interesse stellt die Gelation dar. Im Rahmen der analytischen Beschreibung durch die Gleichung (1) wird dieser Effekt durch einen Masseverlust der Lösung widergespiegelt. Eine entsprechende Interpretation in der Sprache der stochastischen Teilchensysteme ist die Bildung sehr großer Teilchen (proportional zur Größe des Gesamtsystems) in endlicher Zeit. Mittels der oben beschriebenen stochastischen Algorithmen wurde es ermöglicht, den Gelationseffekt für unterschiedliche Kerne quantitativ zu untersuchen.

Literatur

1. A. Kolodko, K. Sabelfeld, W. Wagner, *A stochastic method for solving Smoluchowski's coagulation equation*, Math. Comput. Simulation, **49** (1999), No. 1–2, pp. 57–79.

2. A. Eibeck, W. Wagner, *An efficient stochastic algorithm for studying coagulation dynamics and gelation phenomena*, WIAS-Preprint No. 473, 1999.

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-, Ingenieur- und Lebenswissenschaften. Insbesondere geht es um die Modellierung komplexer Zusammenhänge mit Methoden der Nichtparametrischen Statistik, um die Risikobewertung 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.
Bei der Untersuchung von Anwendungsproblemen wächst der Bedarf an effektiven datenadaptiven Verfahren, die für komplexe statistische Modelle mit unbekannter Struktur anwendbar sind. Nichtparametrische statistische Verfahren, deren Komplexität und Genauigkeit sich anhand der Daten adaptiv bestimmt, haben sich in der Vergangenheit als sehr erfolgreich bei der stochastischen Modellierung in Wirtschafts- und Ingenieurwissenschaften erwiesen und werden daher derzeit intensiv entwickelt. Auch stochastische numerische Verfahren für komplexe stochastische Modelle 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

- Statistische Verfahren für Ökonometrie und Finanzmathematik, Value-at-Risk,
- Modellierung von Aktien-, Zins- und Wechselkursen und Bewertung von Zinsderivaten,
- 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 von besonderer Bedeutung.

4.6.2 Projekte

Inferenz für komplexe statistische Modelle

Bearbeiter: P. Mathé, H.-J. Mucha, J. Polzehl, V. Spokoiny

Kooperation: D. Auer (Max-Planck-Institut für Psychiatrie München), K. Hahn (GSF-IBB, München), F. Godtliebsen (Universität Tromsø, Norwegen), G. Sebastiani (CNR/IAC Rom, Italien), F. Baumgart, T. Kaulisch (Leibniz-Institut für Neurobiologie, Magdeburg), H. Reindell (circuLAB reindell & partner, Frankfurt/Main), A. Juditski (INRIA Grenoble, Frankreich), M. Hristache (Universität Rennes, Frankreich), L. Dümbgen (Medizinische Universität Lübeck), J. Horowitz (University of Iowa, USA), S. Sperlich (Universität Carlos III, Madrid, Spanien), B. Grund (University of Minnesota, USA), O. Bunke, B. Droge, W. Härdle, H. Herwartz, G. Teyssière (SFB 373, Humboldt-Universität zu Berlin), E. Heimerl (Universität Salzburg, Österreich), S. Hizir, D. Mercurio (Humboldt-Universität zu Berlin), M. Nussbaum (Cornell University, USA), S. V. Pereverzev (Ukrainische Akademie der Wissenschaften, Kiew, Ukraine)

Förderung: SFB 373 „Quantifikation und Simulation Ökonomischer Prozesse“, Humboldt-Universität zu Berlin; Volkswagen-Stiftung, RiP-Programm in Oberwolfach

Viele interessante Anwendungen statistischer Verfahren in Ökonomie, Finanz-, Natur- und Lebenswissenschaften basieren auf komplexen hochdimensionalen Modellen und teilweise großen Datenmengen. Aufgabe der statistischen Analyse ist entweder eine qualitative Beschreibung der Daten oder eine Reduktion der Dimensionalität als Ausgangspunkt für eine weitere Analyse der Daten.
Inferenz für komplexe statistische Modelle beinhaltet eine Vielzahl von Problemstellungen und Anwendungen. Diesem Schwerpunkt sind die Teilprojekte

- Anwendung adaptiver nichtparametrischer Verfahren in der medizinischen Bildverarbeitung,
- Effektive Dimensionsreduktion hochdimensionaler Daten,
- Statistische Inferenz für Finanzzeitreihen,
- Diskriminanzanalyse,
- Clusteranalyse,
- Modellwahl und Goodness-of-Fit-Probleme und
- Numerik statistischer schlechtgestellter Probleme

zugeordnet.

Adaptive Verfahren der Bildverarbeitung (Bearbeiter: V. Spokoiny, J. Polzehl).
Moderne Untersuchungsmethoden in Technik, Medizin, Umweltschutz, Meteorologie und Geologie liefern vielfach Daten in Form von zwei- und dreidimensionalen Bildern. Beispiele solcher Verfahren sind Satellitenaufnahmen, Ultraschall, Magnet-Resonanz (MR)-Aufnahmen.
In der Regel sind die gewonnenen Daten fehlerbehaftet, es entsteht das Problem, aus den beobachteten Bildern die wesentliche, zugrunde liegende Struktur herauszufiltern. Diese Aufgabenstellung ist von vielen Autoren unter Nutzung verschiedener statistischer Modellansätze für

verschiedene spezifische Anforderungen an das rekonstruierte Bild untersucht worden. Ziele der Rekonstruktion sind z. B. ein Entrauschen der Bilder, das Finden homogener Bereiche und das Verstärken von Kontrasten. Im Rahmen des Projektes wird ein neuartiges lokal adaptives Glättungsverfahren (AWS, Adaptive Weights Smoothing) entwickelt, dass 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 (siehe [26]). Abb. 1 illustriert die Ergebnisse beim Entrauschen einer freundlicherweise von F. Godtliebsen bereitgestellten MR-Aufnahme.

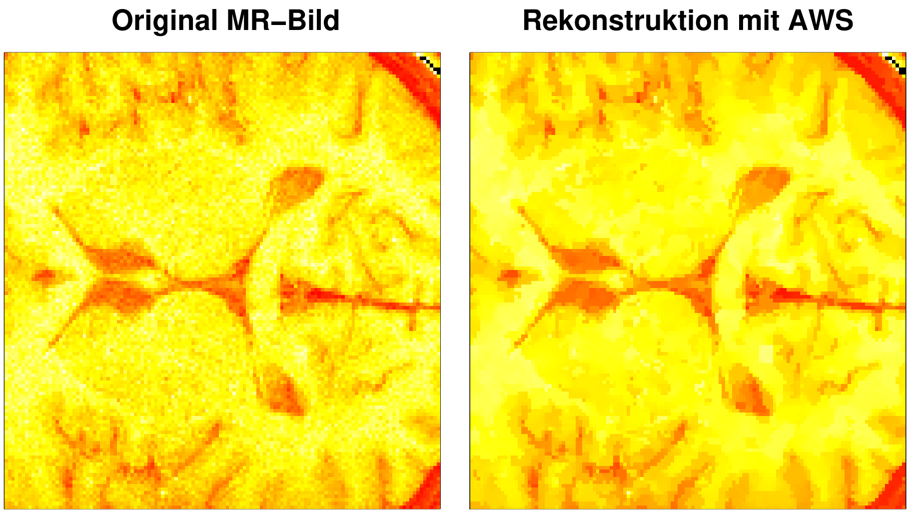


Abb. 1: Original und Rekonstruktion einer MR-Aufnahme.

Die AWS zugrunde liegenden 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. Die Qualität der Einzelbilder ist aufgrund der kurzen Zeitabstände zwischen den Aufnahmen relativ schlecht. Gegenüber der häufig verwendeten voxelweisen Analyse ermöglicht unsere Herangehensweise eine erhöhte Sensitivität durch eine zusätzliche räumlich adaptive Glättung. Die in [27] vorgeschlagene Methodik kombiniert die in [26] entwickelte Idee adaptiver Gewichte mit einer Reduktion (in Zeitrichtung) der Dimensionalität der Daten unter Erhalt der für die Problemstellung wichtigen Information.

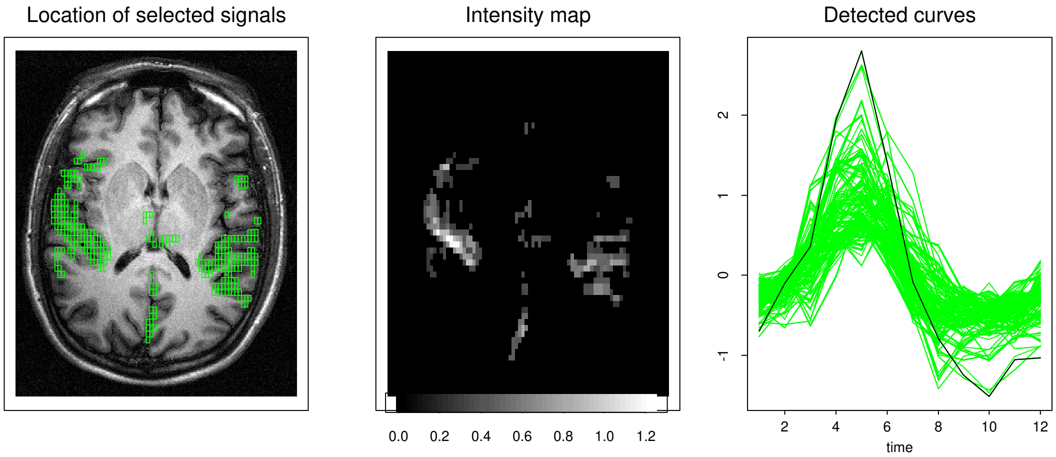


Abb. 2: Signalerkennung in fMRI.

Abb. 2 zeigt die detektierten Signale für einen fMRI-Datensatz (912 Bilder à 64x128 Voxel, MPI für kognitive Neurowissenschaften Leipzig). Eine Anwendung der gleichen Methodik auf die Klassifikation von Gewebe anhand der zeitlichen Wirkung eines Kontrastmittels in dynamischen MR-Experimenten wird ebenfalls in [27] beschrieben. Erste Untersuchungen in Zusammenarbeit mit H. Reindell betreffen Segmentierung und Konturdetektion für Ultraschallbildsequenzen.

Effektive Dimensionsreduktion bei hochdimensionalen Daten (Bearbeiter: V. Spokoiny). Single- und Multi-Index-Modelle werden in multivariaten Problemen häufig benutzt, um das so genannte „curse of dimensionality“-Problem zu vermeiden. Diese Modelle verallgemeinern die klassischen linearen Modelle und können als guter Kompromiss zwischen oft zu restriktiven linearen Modellen und zu variablen rein nichtparametrischen Modellen angesehen werden. Interessierende Parameter der statistischen Analyse in diesen Modellen sind typischerweise Index-Vektoren. Derartige Indices dienen häufig zur Beschreibung makroökonomischer Daten in Ökonomie und Finanzwirtschaft. Typische Beispiele sind Börsenindices wie DAX oder Dow-Jones. Große Banken berücksichtigen 5 000–10 000 Finanzprodukte. Eine Dimensionsreduktion durch Zusammenfassung dieser Produkte zu Indices ermöglicht sowohl eine Risikobewertung als auch eine Optimierung von Portfolios. Die existierenden Schätzmethoden für Index-Vektoren können als direkt und indirekt klassifiziert werden. Für indirekte Methoden, wie z. B. die nichtparametrische Kleinste-Quadrat-Schätzung oder die nichtparametrische Maximum-Likelihood-Schätzung, ist deren asymptotische Effizienz gezeigt worden. Die praktische Anwendbarkeit dieser Methoden ist allerdings sehr beschränkt, da die Berechnung der Schätzungen auf ein hochdimensionales Optimierungsproblem führt, siehe [12]. Im Gegensatz dazu sind direkte Methoden, wie z. B. Average-Derivative-Schätzungen oder Sliced Inverse Regression (SIR), einfach zu berechnen. Effizienzresultate gelten für diese Schätzungen allerdings nur unter sehr restriktiven Modellannahmen, siehe u. a. [3, 30, 32].
Eine andere Methode zum Schätzen des Index-Vektors im Single-Index-Modell wird in [11] vorgeschlagen. Diese Methode kann als rekursive Verbesserung der Average-Derivative-Schätzung angesehen werden. Die vorliegenden Resultate zeigen, dass nach einer logarithmischen Anzahl von Iterationen die sich ergebende Schätzung root-n-konsistent ist. Die Methode ist voll adaptiv hinsichtlich des Versuchsplans und der unbekannten Glattheitseigenschaften der Link-Funktion. Die Resultate gelten unter sehr schwachen Modellannahmen.
Eine Verallgemeinerung der Methode für den Fall eines Multi-Index-Modells erlaubt gleichzeitig eine effektive Reduktion der Dimensionalität und das Schätzen des zugehörigen Index-Raumes.

Statistische Inferenz für zeitinhomogene Finanzzeitreihen (Bearbeiter: V. Spokoiny, J. Polzehl).

Log-Returns R_t erhält man als Logarithmus des Quotienten zweier aufeinanderfolgender Werte eines zugrunde liegenden Preisprozesses. Der Prozess der Log-Returns wird üblicherweise mittels der *Conditional Heteroscedasticity*-Annahme

$$R_t = \sigma_t \varepsilon_t$$

beschrieben, wobei ε_t ein Fehlerprozess (z. B. weißes Rauschen) und σ_t der *Volatilitäts*-Prozess ist. Ein typisches Ziel der statistischen Analyse ist eine Kurzzeitvorhersage des Volatilitätsprozesses. Dieser Prozess wird meist mittels einer parametrischen Annahme modelliert ([5]). Beispiele solcher Modellannahmen sind ARCH, verallgemeinerte ARCH (GARCH) oder stochastische Volatilitätsmodelle. Alle diese Modelle sind zeithomogen und daher nicht in der Lage, strukturelle Änderungen des zugrunde liegenden Prozesses nachzuvollziehen. Wir entwickeln alternative Methoden, die auf der Annahme lokaler Zeithomogenität basieren. Das heißt wir nehmen an, dass der zugrunde liegende Prozess innerhalb eines unbekannten Zeitintervalls annähernd zeithomogen ist. Diese Annahme führt zu Verfahren, die anhand der Daten ein Intervall annähernder Homogenität bestimmen. Diese Intervalle können dann zum Schätzen oder zur Vorhersage der Volatilität benutzt werden, siehe [9, 17, 29]. Abb. 3 demonstriert das Verhalten einer für zeitinhomogene ARCH-Modelle entwickelten AWS-Methode.

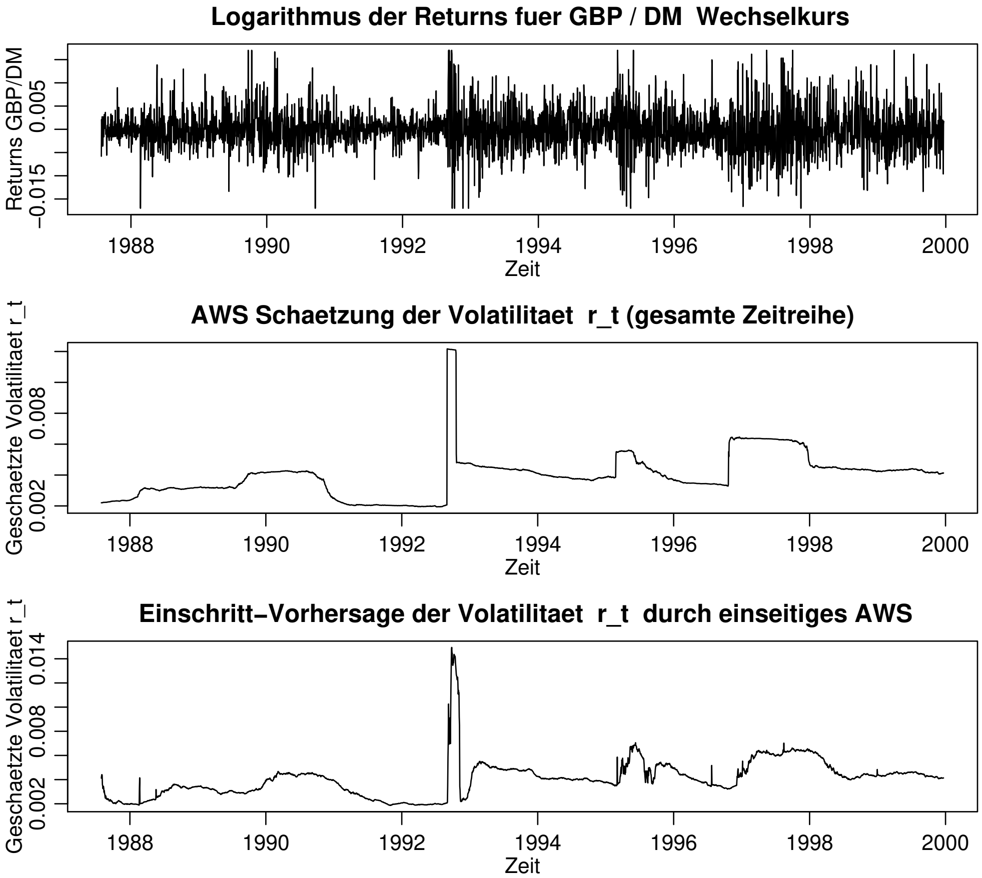


Abb. 3: Logarithmische Returns, Schätzung und Vorhersage der Volatilität der täglichen GBP/DM-Wechselkurse im Zeitraum 1988 – 2000.

Die Arbeit [7] betrachtet die Modellierung der Volatilität multipler Preisprozesse in spekulativen Märkten. Dies schließt Probleme der Dimensionsreduktion und Datentransformation ein.

Diskriminanzanalyse (Bearbeiter: V. Spokoiny, J. Polzehl).
Ziel der Diskriminanzanalyse ist die Zuordnung von Objekten zu bekannten Populationen. Die Beschreibung der Populationen erfolgt in der Regel anhand von Trainingsstichproben, d. h. von Beobachtungen bekannter Populationszugehörigkeit, auf Grundlage der Beobachtung einer großen Anzahl von Merkmalen. Die Zuordnung eines neuen Objektes zu einer Population wird anhand seiner Merkmalsausprägungen und eines statistischen Modells vorgenommen. Derartige Probleme treten in natürlicher Weise in verschiedensten Anwendungsfeldern (Ökonomie, Finanzwirtschaft, Risikomanagement, Lebenswissenschaften) auf.
Das zugrunde liegende Problem reduziert sich im Wesentlichen auf das Schätzen von Dichten bzw. Dichtequotienten für die verschiedenen Populationen aus den Trainingsstichproben. Die ursprünglich in [26] für Regressions- und Bildverarbeitungsprobleme vorgeschlagene Adaptive-Weights-Smoothing-(AWS)-Methode erweist sich durch ihre Dimensionsfreiheit und Adaptivität hinsichtlich der unbekannten Glattheitseigenschaften des zugrunde liegenden Modells als eine mögliche Schätzmethode in diesem Kontext. Eine Version der AWS-Methode für Diskriminanzanalyse-Probleme mit zwei und mehr Gruppen liegt vor ([28]).

Modellwahl und Goodness-of-Fit-Probleme (Bearbeiter: V. Spokoiny, J. Polzehl).
Jede statistische Analyse basiert auf Annahmen über das zugrunde liegende Modell. Damit stellen sich sofort zwei grundlegende Fragen:

1. Im Fall mehrerer alternativer Modellannahmen entsteht die Frage, wie anhand der Daten das für die Problemstellung, z. B. Anpassung oder Vorhersage, geeignetste Modell zu wählen ist;

2. zu überprüfen, ob die Daten den getroffenen Annahmen entsprechen.

Das Hauptproblem vieler Anwendungen liegt in der hohen Komplexität des zu beschreibenden Zusammenhanges. Dies bedingt, dass die zu überprüfenden Annahmen mit Sicherheit nicht gelten. Die zu untersuchende Frage kann folgendermaßen formuliert werden: Ist die Abweichung zwischen tatsächlichem und hypothetischem Modell signifikant für die aufgrund der statistischen Analyse zu treffenden Entscheidungen, und welches der alternativen hypothetischen Modelle ist das geeignetste?
Wir entwickeln verschiedene datenbasierte Modellselektions- und Testverfahren für verschiedene Anwendungen, einschließlich

- Modellwahl für Finanzzeitreihen, u. a. Modellierung von Volatilitäten ([17]),

- Goodness-of-Fit-Tests für lineare Hypothesen in Regression ([31]), Median-Regression ([10]) und Hazard-Regression ([6]),

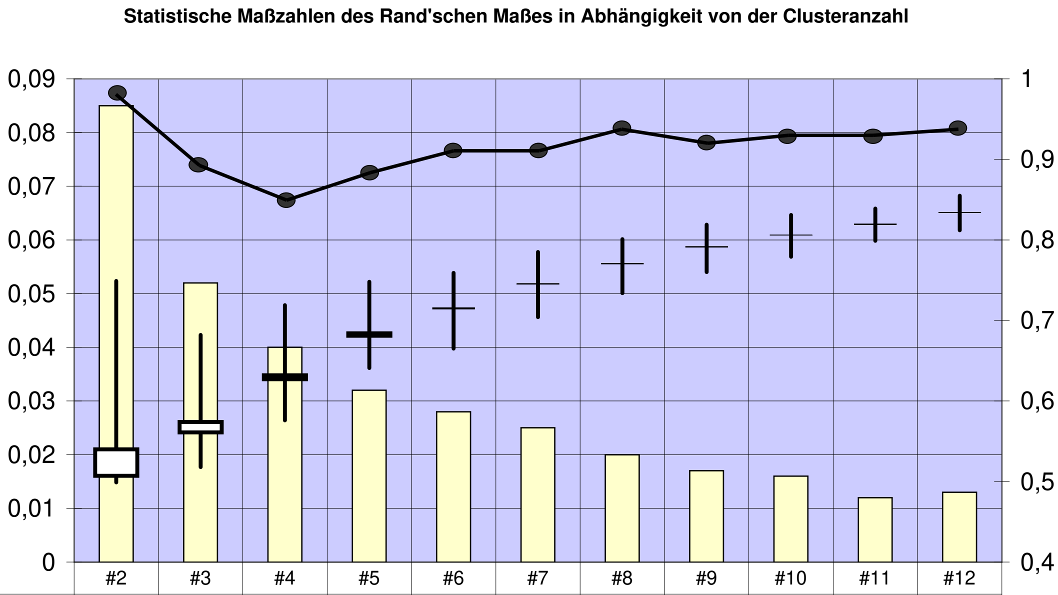
- Analyse von Komponenten in additiven Modellen mit Anwendungen auf ökonomische Probleme ([8]),

- Testen qualitativer Hypothesen wie z. B. Positivität, Monotonie, Konkavität ([4]),

- Modellwahl unter alternativen nichtlinearen Regressionsmodellen ([1]).

Clusteranalyse (Bearbeiter: H.-J. Mucha).
Die Statistik-Software `ClusCorr98`® zur automatischen Klassifikation, statistischen Datenanalyse und multivariaten Visualisierung wurde weiterentwickelt. Auf der weltgrößten Computermesse CeBIT'99 in Hannover konnte die auf die statistische Clusteranalyse von Massendaten

gerichtete Arbeit mit dem Ausstellungsexponat „Data Mining mit `ClusCorr98`®“ im Rahmen des Forschungsmarktes Berlin erfolgreich präsentiert werden. Einige der zahlreichen Kontakte mündeten in Zusammenarbeit an konkreten Praxisproblemen und sollen in Projekten weitergeführt werden, siehe auch [19].
Ziel des Data Mining ist, in sehr umfangreichen Sammlungen numerischer und alphanumerischer Daten versteckte nützliche Information zu extrahieren. Der Zugriff auf interne oder externe Datenbanken erfolgt über eine Excel-Umgebung. Wesentliche Fortschritte bei der Datenanalyse mit `ClusCorr98`® betreffen die Entwicklung und Programmierung rechenzeiteffektiver Simulationstechniken. Die numerischen und graphischen Simulationsergebnisse werden in einer einzigen Darstellung zusammengefasst:



	#2	#3	#4	#5	#6	#7	#8	#9	#10	#11	#12
StDev	0,085	0,052	0,04	0,032	0,028	0,025	0,02	0,017	0,016	0,012	0,013
Median	0,507	0,561	0,627	0,681	0,716	0,746	0,771	0,792	0,806	0,82	0,834
Upp5%	0,749	0,682	0,719	0,748	0,759	0,785	0,801	0,819	0,831	0,839	0,855
Low5%	0,499	0,518	0,576	0,641	0,665	0,704	0,734	0,76	0,779	0,799	0,812
Average	0,54	0,574	0,632	0,684	0,714	0,745	0,77	0,791	0,806	0,819	0,834

Abb. 4: Simulationsergebnisse für einen Datensatz aus der Archäologie.

Abb. 4 beschreibt ausführlich die Referenzverteilung des gewählten Stabilitätsmaßes für verschiedene Clusteranzahlen unter Normalverteilung (nichtinformativ). Die rechte Skale beschreibt die .05-, .5- (Median) und .95-Quantile und die Mittelwerte, während die linke Skale zur Standardabweichung der Mittelwerte korrespondiert. Für den Test/Vergleich mit den konkreten Daten wird in der Regel der Median der zugehörigen Simulationsergebnisse zusätzlich in die Darstellung aufgenommen (Linie im oberen Teil). Auf diese automatische Validierung der Ergebnisse der Clusteranalyse aufbauend wurde eine Entscheidungshilfe zur Metrik- und Methodenwahl in der Clusteranalyse bereitgestellt. Die an den Anwender gegebenen Empfehlungen können durch Simulationsuntersuchungen unterstützt werden. Den Praxisanforderungen entsprechend wurden auch neue Clusteranalysemodelle und Graphikvarianten verfügbar gemacht. Die Statistiksoftware `ClusCorr98`® ist in Visual Basic for Applications geschrieben und unter Windows oder Windows NT lauffähig.

Numerik statistischer schlecht gestellter Probleme (Bearbeiter: P. Mathé).
Beim Entwurf numerischer Verfahren zur Lösung konkreter Probleme ist es wichtig, gegebene *a priori*-Informationen effektiv (optimal) zu nutzen. Dieser Aspekt hat Bedeutung sowohl bei der Festlegung von Diskretisierungen als auch bei der Wahl geeigneter Algorithmen bei gegebener Diskretisierung, da sich hier entscheidet, ob mit den diskreten Daten effizient gearbeitet wird oder ob ein unnötiger „computational overhead“ erzeugt wird. In Zusammenarbeit mit S. V. Pereverzev ist dieser Problemkreis anhand schlecht gestellter, insbesondere statistischer Probleme

$$y_\delta = Ax + \delta\xi,$$

beziehungsweise der Diskretisierung

$$y_{\delta,i} = \langle y_\delta, \varphi_i\rangle = \langle Ax, \varphi_i\rangle + \delta\xi_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

untersucht worden, wobei A injektiv und kompakt entlang einer Hilbert-Skale wirkt und $\delta > 0$ das Rauschniveau der fehlerbehafteten Daten $y_{\delta,i}$ beschreibt. Üblicherweise wird ξ als Gauß'sches weißes Rauschen angenommen. Derartige Fragen sind in der Statistik oft untersucht worden, siehe etwa [2, 13, 23]. Die vorgeschlagenen numerischen Verfahren basierten in der Regel auf als bekannt vorausgesetzten Singulärwertzerlegungen des Operators A, siehe in [15]. Eine Ausnahme bildete die Arbeit [25], in der Histogramme als Daten angenommen wurden. Dies war Anlass, die Effizienz von voll diskreten numerischen Verfahren zu untersuchen, wenn die Daten $y_{\delta,i}$ in Form von Werten auf gegebenem orthogonalen Design $\{\varphi_1, \dots, \varphi_n\}$ vorliegen. Im Rahmen eines von der Volkswagenstiftung geförderten RiP-Aufenthalts in Oberwolfach wurde der oben skizzierte Problemkreis untersucht, siehe [16]. Für Probleme in Hilbertskalen gelang es, einheitlich für deterministisches und stochastisches Rauschen

- den Grad der Schlechtgestelltheit (degree of ill-posedness) anhand der Problemdaten explizit zu charakterisieren,
- voll-diskrete Regularisierungsverfahren anzugeben, die die gegebenen Daten $y_{\delta,i}, i = 1, \dots, n$ optimal nutzen,
- das Diskretisierungslevel zu bestimmen, welches erforderlich ist, um eine gegebene Genauigkeit zu realisieren.

Literatur

1. O. Bunke, B. Droge, J. Polzehl, *Model selection, transformations and variance estimation in nonlinear regression*, Statistics, **33** (1999), pp. 197–240.

2. D. L. Donoho, *Nonlinear solution of linear inverse problems by wavelet-vaguelette decomposition*, Appl. Comp. Harmonic Analysis, **2** (1995), pp. 101–126.

3. N. Duan, K.-C. Li, *Slicing regression: A link-free regression method*, Ann. Statist., **19** (1991), pp. 505–530.

4. L. Dümbgen, V. Spokoiny, *Optimal nonparametric testing of qualitative hypotheses,* Discussion paper No. 99, 1999, Sonderforschungsbereich 373, Humboldt-Universität zu Berlin, eingereicht.

5. C. Gourieroux, *ARCH Models and Financial Applications*, Springer, New York, 1997.

6. B. GRUND, J. POLZEHL, *Semiparametric lack-of-fit tests in an additive hazard regression model*, Discussion paper No. 98, 1999, Sonderforschungsbereich 373, Humboldt-Universität zu Berlin.

7. W. HÄRDLE, H. HERWARTZ, V. SPOKOINY, *Multiple volatility modelling,* in Vorbereitung.

8. W. HÄRDLE, S. SPERLICH, V. SPOKOINY, *Component analysis for additive models*, Discussion paper No. 52, 1997, Sonderforschungsbereich 373, Humboldt-Universität zu Berlin, eingereicht.

9. W. HÄRDLE, V. SPOKOINY, G. TEYSSIÈRE, *Adaptive estimation for a time inhomogeneous stochastic-volatility model*, Discussion paper No. 6, 2000, Sonderforschungsbereich 373, Humboldt-Universität zu Berlin.

10. J. HOROWITZ, V. SPOKOINY, *On adaptive, rate-optimal test of a parametric model against a nonparametric alternative*, WIAS-Preprint No. 542, 1999, erscheint in: Econometrica.

11. M. HRISTACHE, A. JUDITSKI, V. SPOKOINY, *Direct estimation of the index coefficients in a single-index model*, WIAS-Preprint No. 409, 1999, eingereicht.

12. R. L. KLEIN, R. H. SPADY, *An efficient semiparametric estimator for binary response models*, Econometrica, **61** (1993), pp. 387–421.

13. A. P. KOROSTELEV, A. B. TSYBAKOV, *Minimax Theory of Image Reconstruction*, Lecture Notes in Statist., **82**, Springer, New York, 1993.

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

15. B. A. MAIR, F. H. RUYMGAART, *Statistical inverse estimation in Hilbert scales*, SIAM J. Appl. Math., **56** (1996), No. 5, pp. 1424–1444.

16. P. MATHÉ, S. V. PEREVERZEV, *Optimal discretization of inverse problems in Hilbert scales. Regularization and self-regularization of projection methods*, Manuskript, 1999, eingereicht.

17. D. MERCURIO, V. SPOKOINY, *Statistical inference for time-inhomogeneous volatility models,* in Vorbereitung.

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

19. H.-J. MUCHA, J. DOLATA, H.-G. BARTEL, *Klassifikation von 613 Proben als Referenzen für die Herstellungsprovenienzen römischer Baukeramik im nördlichen Obergermanien,* Mainzer Arch. Zeitschr., im Druck.

20. H.-J. MUCHA, S. HIZIR, *Cluster Analysis,* Arbeitspapier, Berlin, 1999.

21. H.-J. MUCHA, *Classification and Multivariate Graphics: Models, Software and Applications,* WIAS-Report No. 10, (H.-J. Mucha, H. H. Bock, Hrsg.), Berlin, 1996, pp. 97–105.

22. ——, *Entscheidungshilfe zur Metrik- und Methodenwahl in der Clusteranalyse,* in: Datenanalyse und numerische Klassifikation, Hamburger Beiträge zur Modellierung und Simulation, Heft 139, Hamburg, 2000, pp. 53–66.

23. M. NUSSBAUM, *Degrees of ill-posedness in stochastic and deterministic noise models,* in: Algorithms and Complexity for Continuous Problems, Dagstuhl-Seminar-Report No. 101, 1994.

24. M. NUSSBAUM, S. V. PEREVERZEV, *The degree of ill-posedness in stochastic and deterministic noise models,* WIAS-Preprint No. 509, 1999.

25. D. W. NYCHKA, D. D. COX, *Convergence rates for regularized solutions of integral equations from discrete noisy data,* Ann. Statist., **17** (1989), No. 2, pp. 556–572.

26. J. POLZEHL, V. SPOKOINY, *Adaptive weights smoothing with applications to image restoration*, erscheint in: J. Roy. Statist. Soc., Ser. B.

27. ——, *Vector adaptive weights smoothing with applications to MRI*, WIAS-Preprint No. 519, 1999.

28. ——, *Discrimination analysis by adaptive weights smoothing*, in Vorbereitung.

29. ——, *Volatility modelling by adaptive weights smoothing,* in Vorbereitung.

30. J. L. POWELL, J. M. STOCK, T. M. STOKER, *Semiparametric estimation of index coefficients*, Econometrica, **57** (1989), pp. 1403–1430.

31. V. SPOKOINY, *Data-driven testing the fit of linear models*, WIAS-Preprint No. 472, 1998.

32. T. M. STOKER, *Consistent estimation of scaled coefficients*, Econometrica, **54** (1986), pp. 1461–1481.

Angewandte Finanzmathematik

Bearbeiter: D. Baum, S. Jaschke, O. Reiß, J. Schoenmakers, J.-H. Zacharias-Langhans

Kooperation: J. Breckling (Insiders GmbH, Mainz), B. Coffey (Merrill Lynch, London, Großbritannien), H. Föllmer, U. Küchler (Humboldt-Universität zu Berlin), H. Haaf (Dresdner Bank AG, Frankfurt am Main), A. W. Heemink, G. J. Olsder, H. van der Weide (Technische Universität Delft, Niederlande), P. Kloeden (Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt am Main), J. Kremer, C. März (Bankgesellschaft Berlin AG, Berlin), O. Kurbanmuradov (Akademie der Wissenschaften Turkmenistans, Aschchabad), G. N. Milstein (Ural State University, Ekaterinburg, Russland), W. Schmidt (Deutsche Bank AG, Frankfurt am Main), M. Schweizer (Technische Universität Berlin), U. Wystup (Commerzbank AG, Frankfurt am Main)

Förderung: Rabobank London, SWON (Holländische Forschungsgemeinschaft), Bankgesellschaft Berlin AG

Die Abteilung „Angewandte Finanzmathematik" der Forschungsgruppe „Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik" befasst sich mit der stochastischen Modellierung von Prozessen in Finanzmärkten, der Bewertung von derivativen Instrumenten (Optionen) und Methoden zur Risikobewertung. Die Implementierung der Modelle sowie die Anwendung in der Praxis sollen in Zusammenarbeit mit Kreditinstituten erfolgen. In diesem Rahmen wird zur Zeit mit der Bankgesellschaft Berlin AG kooperiert. Auf der Tagung „Workshop on Computational Finance and Insurance", die gemeinsam mit der Johann Wolfgang Goethe-Universität und der Firma Insiders GmbH organisiert wurde, sind weitere Kontakte mit Personen aus der Finanzwirtschaft entstanden.
Statistische Fragestellungen im Bereich der Risikomodellierung werden ebenfalls innerhalb des Projektes „Inferenz für komplexe statistische Modelle" untersucht. Hinsichtlich dieser Fragestellungen gibt es eine enge Zusammenarbeit mit den an diesem Projekt Beteiligten. Für verschiedene Simulationsverfahren der jeweiligen Modelle werden ausgiebig die Kompetenzen der Gruppe „Numerik komplexer stochastischer Modelle" in Anspruch genommen.
Die Forschung zum Thema „LIBOR Zinsderivate, Zinsmodelle und Kalibration" wurde im Berichtszeitraum fortgesetzt. In der zweiten Jahreshälfte begann eine engere Kooperation mit der Bankgesellschaft Berlin, die zu dem Thema „Bewertung von Optionen in Hinblick auf ein Risikomanagementsystem" führte. Die damit verbundenen Untersuchungen sind sehr umfangreich und befinden sich derzeit noch in der Anfangsphase. Für ein Risikomanagementsystem ist die flexible Bereitstellung von statistischen Daten erforderlich. Hierzu wurde die unten genannte Datenbank „StatisticsDB" implementiert.

LIBOR Zinsderivate, Zinsmodelle und Kalibration (begonnen 1998, Bearbeiter: O. Reiß, J. Schoenmakers).
Im letzten Jahr wurde ein Multi-Faktor-LIBOR-Zinsmodell ([3, 7, 9]) mit bestimmter Korrelationsstruktur vorgeschlagen. Dieses Modell wurde weiter untersucht ([16]). Es hat sich erwiesen, dass sich dieses Modell stabil gegen Marktpreise von „Caps" und „Swaptions" kalibrieren lässt. Darüber hinaus ist die dabei erhaltene Korrelationsstruktur konsistent mit einer historisch geschätzten Korrelationsmatrix.
Für dieses Multi-Faktor-LIBOR-Modell wurden log-normale Approximationsverfahren entwickelt, die die schnellere Bewertung exotischer Derivate ermöglichen. Dazu wurde eine bekannte

Approximation von [3] verbessert, getestet und mit Hilfe einer Random-Field-Methode implementiert ([10]). In Zusammenarbeit mit G. Milstein wurde ein Monte-Carlo-Verfahren entwickelt, das mit einer geeigneten Kontrollfunktion sowohl die Varianz für den Optionspreis als auch die Varianz aller Optionssensitivitäten („Griechen“) reduziert. Es wurde gezeigt, wie dieses Verfahren im Prinzip auf LIBOR-Bewertungsmodelle angewendet werden kann ([11]).
Im Rahmen eines neuen Forschungsthemas werden Abhängigkeiten zwischen Zins- und Aktienmarkt untersucht und modelliert. Ausgehend von einem vollständigen Aktienmarkt wird ein Zinsstrukturmodell erzeugt, das die in der Praxis beobachteten Korrelationen zwischen Zinsen und Aktien auf natürliche Weise beschreibt.

Bewertung von Optionen in Hinblick auf ein Risikomanagementsystem (Bearbeiter: D. Baum, S. Jaschke, O. Reiß, J. Schoenmakers, J.-H. Zacharias-Langhans).
Von der Bank für Internationale Zusammenarbeit (Basle Committee) wurden Grundsätze entwickelt, die innerhalb eines Risikomanagementsystems einer Bank eingehalten werden müssen. Im Zentrum dieser Beschlüsse steht der Begriff „Value at Risk“, der eine Kenngröße des Marktpreisrisikos eines Portfolios von Wertpapieren ist. Nach den Baseler Richtlinien berechnet sich aus dem Value at Risk das Eigenkapital, mit dem eine Bank dieses Risiko absichern muss. Allein aus diesem Grund ist für eine Bank die genaue Kenntnis ihres Value at Risk von großer Bedeutung.
In Zusammenarbeit mit der Bankgesellschaft Berlin AG wird ein Projekt bearbeitet, dessen langfristiges Ziel der Aufbau eines solchen Risikomanagementsystems ist. So ein System erfordert eine effiziente Bewertung aller Finanzinstrumente, insbesondere die schnelle Bewertung von Derivaten. In diesem Zusammenhang wurden verschiedene Algorithmen entwickelt, die die jeweiligen Eigenschaften der speziellen Option berücksichtigen. Dabei wurden praxisrelevante Probleme wie Dividendenzahlungen von Aktien oder Zinsstrukturkurven mit einbezogen.
Die entwickelten numerischen Verfahren werden auch für andere Finanzinstrumente Anwendung finden. Geplant ist insbesondere eine Behandlung von Wandelanleihen unter Berücksichtigung des Ausfallrisikos des Emittenten. Weiterführend wird dann auch das Kreditrisiko genauer analysiert. Bei Wandelanleihen kommt hinzu, dass die Korrelation zwischen Zinsen und der betroffenen Aktie einen wesentlichen Einfluss auf die Preisfindung haben kann.
Das längerfristige Ziel besteht in der Risikobewertung großer Portfolios unter Verwendung von Monte-Carlo-Verfahren [2, 4, 6]. Dabei können innerhalb der Forschungsgruppe Synergien genutzt werden. Des Weiteren ist die Schätzung von Korrelationen einzelner Risikofaktoren notwendig [5, 13], die über Zeitreihenanalysen durchgeführt wird und dieses Projekt mit dem Projekt „Inferenz für komplexe statistische Modelle“ unserer Forschungsgruppe verbindet.
Ein erstes konkretes Ergebnis der Zusammenarbeit mit der Bankgesellschaft ist die Statistics-Datenbank, die im Rahmen eines Werkvertrages von S. Jaschke vor Ort für die Bankgesellschaft implementiert wurde. Sie dient als Zwischenspeicher für Tageszeitreihen und Kovarianzschätzungen. Sie verarbeitet Daten der Dividendendatenbank und der Tick-Datenbank und speichert Stammdaten, tägliche Daten (für Aktien, Aktienderivate, Wechselkurse und Zinsen), bereinigte Kursgewinne (Returns) und Kovarianzen. Der Hauptnutzer der StatisticsDB ist das Programm zur Berechnung des Risikos. Weitere Anwendungen, die auf den Daten und Schnittstellen der StatisticsDB fußen, sind geplant, aber noch nicht konkretisiert (Volatilitätsflächen). Auch liegt es nahe, die entwickelten Verfahren zur adaptiven Schätzung von Kovarianzen (siehe [8]) in dieses Programmheft einzubauen.

Literatur

1. L. ANDERSEN, J. ANDREASEN, *Volatility skews and extensions of the LIBOR market model*, Arbeitspapier, General Re Financial Products, 1998.

2. P. ARTZNER, F. DELBAEN, J. M. EBER, D. HEATH, *Coherent measures of risk*, Math. Finance, **9** (1998), pp. 203–228.

3. A. BRACE, D. GATAREK, M. MUSIELA, *The market model of interest rate dynamics*, Math. Finance, **7** (1997), No. 2, pp. 127–155.

4. P. EMBRECHTS, C. KLÜPPELBERG, T. MIKOSCH, *Modelling Extremal Events*, Springer-Verlag, Berlin, 1997.

5. P. EMBRECHTS, A. MCNEIL, D. STRAUMANN, *Correlation: Pitfalls and alternatives*, RISK Magazine, 1999.

6. J. FRANKE, W. HÄRDLE, G. STAHL, *Measuring Risk in Complex Stochastic Systems*, erscheint in: Lecture Notes in Statist., Springer Verlag, Berlin.

7. P. GLASSERMAN, X. ZHAO, *Arbitrage-free discretization of lognormal forward LIBOR and swap rate models*, erscheint in: Finance and Stochastics.

8. W. HÄRDLE, H. HERWARTZ, V. SPOKOINY, *Multiple volatility modelling,* in Vorbereitung.

9. F. JAMSHIDIAN, *LIBOR and swap market models and measures*, Finance and Stochastics, **1** (1997), pp. 293–330.

10. O. KURBANMURADOV, K. K. SABELFELD, J. SCHOENMAKERS, *Lognormal random field approximations to LIBOR market models*, WIAS-Preprint No. 481, 1999.

11. G. N. MILSTEIN, J. G. SCHOENMAKERS, *Numerical construction of a hedging strategy against the multi-asset European claim*, WIAS-Preprint No. 507, 1999.

12. K. R. MILTERSEN, K. SANDMANN, D. SONDERMANN, *Closed-form solutions for term structure derivatives with lognormal interest rates*, J. Finance, **52** (1997), pp. 409–430.

13. R. B. NELSON, *An Introduction to Copulas*, Springer-Verlag, New York, 1999.

14. O. REIß, J. G. SCHOENMAKERS, M. SCHWEIZER, *Interest rate term structure dynamics induced by a multi stock market; Finite factor HJM models*, in Vorbereitung.

15. O. REIß, U. WYSTUP, *Efficient computation of option price sensitivities using homogeneity and other tricks*, in Vorbereitung.

16. J. G. SCHOENMAKERS, B. COFFEY, *LIBOR rate models, related derivatives and model calibration*, WIAS-Preprint No. 480, 1999.

17. J. SIDENIUS, *LIBOR market models in practice*, Skandinaviska Enskilda Banken, Copenhagen, 1997.

Numerik komplexer stochastischer Modelle

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

Kooperation: S. Orszag (Yale University, USA), T. Vesala (Universität Helsinki, Finnland), P. K. Yeung (Georgian Institute of Technology, USA), O. Kurbanmuradov (Physikalisch-Technisches Institut, Turkmenische Akademie der Wissenschaften, Aschchabad), I. A. Shalimova (Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Russische Akademie der Wissenschaften, Novosibirsk, Russland), G&W INSTRUMENTS (Berlin), Y. Kashtanov (Universität St. Petersburg, Russland)

Förderung: BMBF, INTAS, NATO

Dieses Projekt untersucht die Grundlagen der Modellierung und Numerik von komplexen physikalischen Phänomenen. Komplexe physikalische Zusammenhänge können oftmals durch stochastische Modelle so gut beschrieben werden, dass quantitative Voraussagen über deren Verhalten gemacht werden können. Typische Anwendungen hierfür sind Phänomene der Ausbreitung von Substanzen, Aerosolen in stark fluktuierenden physikalischen Feldern, aber auch der Wellenausbreitung in Medien mit vielen Streuzentren. Das Studium derartiger Modelle ist *algorithmisch orientiert*. Um in konkreten Anwendungen quantitative Vorhersagen machen zu können, ist eine effiziente, fundierte Numerik unerlässlich. Die numerischen Forschungen im Projekt konzentrieren sich sowohl auf Modelle des Transports von Substanzen und Aerosolpartikeln in turbulenten Medien, wie der Grenzschicht der Atmosphäre, als auch auf hochdimensionale Integrationsprobleme, bei denen eine direkte Simulation der zufälligen Einflüsse nicht möglich ist und nur asymptotisch erwartungstreue Schätzungen verfügbar sind (Markov Chain, Monte Carlo).

Stochastische Modelle für den Transport von Aerosolpartikeln in der Grenzschicht der turbulenten Atmosphäre (Bearbeiter: K. K. Sabelfeld).
Die Menschheit ist mit einer zunehmenden Anzahl von lokalen, regionalen und globalen Umweltproblemen konfrontiert, die mit erheblichen ökologischen, ökonomischen und sozialen Auswirkungen verbunden sind. Die Entwicklung dieser Umweltprobleme wird durch Wechselbeziehungen, Abhängigkeiten und Rückkopplungen geprägt, die ihrerseits die Wirkungskette zwischen Ursache und Folgen der einzelnen Umweltprobleme extrem komplex gestalten. Jede Inhomogenität im Gas kann zur Differenz von Geschwindigkeiten der Partikel führen. Das heißt die relative Geschwindigkeit zwischen zwei Partikeln ist positiv, es ergibt sich eine Kollision und danach eine Koagulation. Wir erwähnen folgende Phänomene, die zur Koagulation führen: Braun'sche Bewegung, Gravitationsfall, freie molekulare Kollision, turbulente Bewegung der tragenden Strömung, akkustische Wellen, die Gradienten der Dichte der Konzentration und der Temperatur, die elektrische Ladung. Folgende Schwerpunkte sind von besonderem Interesse in diesem Projekt:

- Entwicklung der stochastischen Modelle und Methoden für die Simulation der klassischen, völlig entwickelten turbulenten Strömungen und Studium des turbulenten Transports, der turbulenten Verbrennung, Nukleation und Koagulation von Partikeln in turbulenten Regimen,

- Numerische Simulation der stochastischen Phänomene für folgende industriell orientierten Probleme: turbulente Verbrennung in Motoren und Analyse der Formung von Aerosol-Partikeln im Auspuff, turbulenter Transport von Aerosol-Partikeln in der Atmosphäre und der Einfluss auf die Aufforstung.

Als aussichtsreiches Anwendungsgebiet, für das die entwickelten stochastischen Algorithmen und insbesondere die „Inverse Trajectory"-Technik effektiv sein sollten, wird das so genannte „Footprint-Problem" ([2], [7]) betrachtet. Dieses Problem kann so formuliert werden: Es ist nötig, den relativen Beitrag verschiedener Quellen der Aerosol-Partikel in einem fixierten Punkt zu berechnen. Dabei wird angenommen, dass die Quellen groß genug sind. (z. B. Auspuffgase). In diesem Fall simuliert man die Trajektorien rückwärts: Die Trajektorien starten aus dem Detektor und enden in den Quellen. Gegenstand des Projekts ist die Konstruktion und Entwicklung neuer stochastischer Modelle und Monte-Carlo-Methoden für die Modellierung des Transports von Substanzen und Aerosolpartikeln in der Grenzschicht der Atmosphäre mit Anwendungen bei der Aufforstung.
Die Aerosol-Partikel wachsen aus dem Gas in einem komplizierten Phasenübergang. Das erste Stadium, die Nukleation, wird mit zwei Hauptmethoden beschrieben; die erste ist die klassische thermodynamische Methode, die die kritische Größe der stabilen Monomeren liefert. Leider kann man mit dieser Methode nur einfachste Systeme behandeln. In der zweiten Methode benutzt man die Smoluchowski-Gleichung mit entsprechenden Verdampfungs- und Kondensations-Koeffizienten.
In beiden Verfahren verwendet man Monte-Carlo-Methoden. Das zweite Stadium ist die Koagulation: Die stabilen Monomeren wachsen über die Kondensation und Kollisionen mit anderen Partikeln. Die Zahl der Gleichungen im Smoluchowski-System ist enorm. Tatsächlich besteht ein Partikel von der Größe eines Mikrons aus etwa $10^9 - 10^{10}$ Atomen, und es ist praktisch nicht möglich, diese Information zu speichern (was aber bei deterministischen Methoden notwendig ist). Die stochastische Beschreibung hat hier den Vorteil, nicht alle Partikel zu behandeln und zu speichern. Ein wichtiges Problem stellt die Abschätzung der Konvergenzgeschwindigkeit des stochastischen Systems, das aus N Partikeln besteht, dar.
Die Geschwindigkeitskomponenten $u_i(\mathbf{x},t)$, $i = 1,2,3$, in turbulenten Strömungen werden in der statistischen Strömungsmechanik als zufällige Felder angesehen. Deshalb sind die Substanzkonzentrationen auch stochastische Felder. In Anwendungen ist man nicht an Realisierungen dieser Felder, sondern an Mittelwerten von Konzentrationen und ihren Flüssen interessiert. Man verwendet zwei grundlegende Methoden für die Berechnung dieser Mittelwerte:

(i) Die klassische halbempirische Beschreibung dieser Probleme basierend auf der Mittelwertbildung und dem Verschluss-Verfahren und
(ii) Lagrange'sche stochastische Simulationsmethoden.

Die halbempirische Betrachtung ist ausführlich untersucht und fortgeschritten in der Praxis, aber das Verschluss-Problem ist bis heute nicht gelöst. Außerdem sind die Anwendungsgebiete sehr beschränkt und sogar oft unklar. Die Haupteinschränkung der halbempirischen Betrachtung besteht darin, dass die räumlichen Maßstäbe der Turbulenz viel kleiner sein sollen als die räumlichen Maßstäbe der Substanzkonzentrationsfelder.
Die Lagrange'schen stochastischen Simulationsmethoden sind frei von der oben erwähnten Einschränkung, und das Verschluss-Problem taucht hier nicht auf. Das Hauptproblem besteht in der Berechnung der Lagrange'schen Übergangsdichte

$$p_L(\mathbf{x},t;\mathbf{x}_0,t_0) = \langle \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(t;\mathbf{x}_0,t_0)) \rangle,$$

wobei man durch $\mathbf{X}(t) = \mathbf{X}(t; \mathbf{x}_0, t_0)$, $t \geq t_0$, die Lagrange'sche Trajektorie bezeichnet, die im Punkt $\mathbf{x}_0$ zur Zeit $t = t_0$ startet, und die das folgende Problem löst:

$$\frac{d\mathbf{X}(t)}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{X}(t), t), \quad t > t_0, \quad \mathbf{X}(t_0) = \mathbf{x}_0 \ .$$

Hier bezeichnen wir durch $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = (u_1(\mathbf{x}, t), u_2(\mathbf{x}, t), u_3(\mathbf{x}, t))$ den Geschwindigkeitsvektor. Kennt man die Dichte $p_L(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0)$, so kann man die Mittelwerte von Konzentrationen und ihren Flüssen berechnen. Die Konzentration ist durch folgendes Integral gekennzeichnet ([7]):

$$\langle c(\mathbf{x}, t) \rangle = \bar{c}(\mathbf{x}, t) = \int_0^t dt_0 \int_D d\mathbf{x}_0 \, q(\mathbf{x}_0, t_0) p_L(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t), \tag{1}$$

wobei $q(\mathbf{x}_0, t_0)$ die Quelleverteilung ist.

Die wichtigste Frage ist daher: Wie kann man die Lagrange'sche Dichte $p_L(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t)$ bei stochastischen Verfahren konstruieren? Es gibt zwei grundlegende Methoden im Rahmen der stochastischen Beschreibung.

Die erste, die Euler'sche, basiert auf der Simulation der Euler'schen Geschwindigkeit mit gegebener Verteilung; man modelliert die Bewegung der Partikel-Trajektorien mit Hilfe zufällig generierter Geschwindigkeits-Samples. Im Lagrange'schen Schema simuliert man die Lagrange'schen Trajektorien wie einen stochastischen Prozess ([5]) (betrachtet als eine Lösung eines Systems stochastischer Differentialgleichungen).

In Euler'schen Methoden ist es im Prinzip möglich, die Geschwindigkeit bei der DNS-Methode (Direct Numerical Simulation Method) zu simulieren. Die Pionierarbeiten von S. Orszag, der die DNS-Methode vorschlug, behandelten Navier-Stokes-Gleichungen. Leider ist diese Methode nicht anwendbar, wenn die Reynolds-Zahl sehr groß ist. Das bedeutet, man kann die völlig entwickelte Turbulenz nicht mit DNS (wie auch nicht mit anderen numerischen Methoden) simulieren. Deshalb ist die stochastische Behandlung der völlig entwickelten Turbulenz sehr wichtig. Die stochastische Theorie der Turbulenz wurde wesentlich von Taylor, Richardson, Kolmogorov und Obukhov entwickelt.

Die stochastische Simulation des turbulenten Transports, die auf der Randomized-Spektral-Darstellung der Euler'schen turbulenten Geschwindigkeit basiert, wurde zuerst von R. Kraichnan betrachtet. Dieses Modell wurde von weiteren Autoren entwickelt, ausgerichtet und verallgemeinert, in [13] wurde eine weitere Methode, die so genannte „Backward Trajectory Technique" eingeführt. Diese Methode ermöglicht es, die Konzentration des Schadstoffes und die Lagrange'sche Korrelationsfunktion effektiv zu berechnen. Leider ist diese Methode, die auf Monte-Carlo-Simulation der Euler'schen Geschwindigkeit basiert, nur anwendbar, wenn die Geschwindigkeitsfelder homogen und gaußverteilt sind.

In praktischen Anwendungen, z. B. auf Schichten der Atmosphäre, sind die Geschwindigkeitsfelder im Wesentlichen inhomogen, deshalb sind Lagrange'sche Stochastische Modelle (LSM) entwickelt worden, die inhomogene wie auch nichtgaußsche Geschwindigkeitsverteilungen berücksichtigen.

Wir beschreiben nun die wichtigsten Prinzipien, auf denen die LSM-Methode basiert. In der LSM-Beschreibung wird die wahre Trajektorie $\mathbf{X}(t)$ durch eine simulierte Trajektorie $\hat{\mathbf{X}}(t)$ approximiert, die wie eine Lösung einer stochastischen Differentialgleichung des Ito-Typs konstruiert ist (siehe z. B. [6], [10], [15]):

$$d\hat{X}_i = \hat{V}_i dt, \quad d\hat{V}_i = a_i dt + b_{ij} dB_j(t), \quad i = 1, 2, 3, \tag{2}$$

wobei mit $\hat{V}_1, \hat{V}_2, \hat{V}_3$ die Komponenten der simulierten Lagrange'schen Geschwindigkeit und mit $B_1(t)$, $B_2(t), B_3(t)$ die unabhängigen Standard-Wiener-Prozesse bezeichnet sind; a_i und b_{ij} sind im Allgemeinen Funktionen von $(t, \hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{V}})$. Wir benutzen hier die Summen-Konvention.

Im idealen Fall wünscht man, dass wahre und simulierte Trajektorien identisch sind: $\hat{V}_i(t) = u_i(\hat{\mathbf{X}}(t), t)$. Die Konstruktion derartiger Modelle ist nicht realistisch. Daher benutzt man die folgenden wichtigen Prinzipien. Das *Consistency Principle* erfordert, dass die Statistik simulierter Trajektorien $\hat{\mathbf{X}}(t), \hat{\mathbf{V}}(t)$ und wahrer Trajektorien $\mathbf{X}(t), \mathbf{V}(t)$ die gleichen Eigenschaften hat. Die Lagrange'schen Geschwindigkeitskomponenten sind wie $\mathbf{V}(t) = \mathbf{u}(\mathbf{X}(t), t)$ definiert.
Nach der Kolmogorov'schen Analogie-Theorie gilt $\langle dV_i dV_j \rangle = \delta_{ij} C_0 \varepsilon dt, \quad i, j = 1, 2, 3$, wobei wir folgende Bezeichnungen benutzen: dV_i für die Wachstumskomponente der Lagrange'schen Geschwindigkeit, ε ist die Mittelrate der Dissipation der Turbulenzenergie, C_0 ist eine universelle Konstante ([8]) und δ_{ij} ist das Kronecker'sche Symbol. Durch $\langle \cdot \rangle$ bezeichnet man den Erwartungswert. Es heißt, dass (z. B. siehe [15]) in (2) die Koeffizienten b_{ij} durch $b_{ij} = \sqrt{C_0 \varepsilon} \delta_{ij}$ definiert sind.
Die „well-mixed condition“ ist in der folgenden Form gegeben ([15]):

$$\frac{\partial p_E}{\partial t} + u_i \frac{\partial p_E}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial u_i}(\phi_i) = 0. \tag{3}$$

Die Funktion $p_E(u_1, u_2, u_3; \mathbf{x}, t)$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte der Euler'schen Geschwindigkeit im Punkt $\mathbf{x}$ zur Zeit t. Es wird vorausgesetzt, dass diese Funktion gegeben ist. In der Praxis nimmt man häufig an, dass sie gaußverteilt ist. Die Gleichung (3) ist ein System für die unbekannte Vektorfunktion $\phi = (\phi_1, \phi_2, \phi_3)$, die die Driftglieder ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 nicht eindeutig definiert. Tatsächlich können wir eine ganze Reihe von Lösungen durch Addieren von ϕ zu einer beliebigen Vektorfunktion, deren Divergenz im Geschwindigkeitsraum null ist ([9]), bekommen. Es ist bekannt, dass die „well-mixed“-Bedingung nur in der Dimension eins das LS-Modell eindeutig definiert ([15]). Im mehrdimensionalen Raum besteht folgendes Problem, das *Eindeutigkeitsproblem* genannt wird: Gesucht sind zusätzliche mathematische Bedingungen, die auch physikalische Bedeutungen haben, und zusammen mit der „well-mixed“-Bedingung eindeutig die Funktionen ϕ_u, ϕ_v, ϕ_w bestimmen. Das heißt: Gesucht werden die Beschleunigungs-Koeffizienten a_u, a_v, a_w, die das LS-Modell eindeutig durch (3) definieren.
Wir haben in [6] das *Eindeutigkeitsproblem* gelöst und haben ein neues LS-Modell (KS-Modell) vorgeschlagen, das mit dem Thomson-Modell und den experimentellen Messungen gut übereinstimmt. Ausführliche Vergleiche mit anderen Modellen und experimentelle Messungen sind in Tabelle 1 dargestellt.

Tab. 1: Universelle Konstanten a, b, c und Pr (definiert in [8] und [6]), berechnet für verschiedene Modelle, verglichen mit experimentellen Messungen.

Model	C_0	a	b	c	Pr
Thomson [15]	3.	0.85	0.65	0.25	0.47
	4.	0.71	0.54	0.22	0.6
	5.	0.61	0.46	0.2	0.74
	7.	0.48	0.35	0.16	1.
Flesch & Wilson [2]	3.	0.85	0.65	0.26	0.45
	5.	0.61	0.46	0.2	0.8
	7.	0.48	0.35	0.16	0.9
KS [6]	3.	0.73	0.55	0.17	0.64
	4.	0.59	0.44	0.15	0.82
	5.	0.5	0.36	0.14	1.
	7.	0.37	0.27	0.11	1.43
Reynolds [11]	3.	0.13	0.09	0.04	5.26
	5.	0.18	0.13	0.06	3.3
	7.	0.21	0.15	0.07	2.86
MEASUREMENTS					
Garger & Zhukov [3]		0.58	0.44	0.19	
Chandhry & Meroney [1]			0.4		
Rider [12]					0.83
Gurvich [4]					1.25

Simulation der Ultraschallausbreitung (Bearbeiter: P. Mathé, W. Metzner, J.-H. Zacharias-Langhans).
Im Rahmen dieses BMBF-Projekts wurde untersucht, inwieweit sich Techniken aus der Laser-Tomografie auf Ultraschall-Untersuchungen übertragen lassen. Während herkömmliche Ultraschallverfahren lediglich reflektierende Grenzflächen auflösen können, soll das alternative Verfahren zu einer Charakterisierung des von der Schallwelle durchlaufenen Mediums führen. Unmittelbare Anwendungsmöglichkeiten bieten sich in der Medizin, z. B. bei der Krebsdiagnose, sowie in der Materialprüfung, z. B. bei Asbest-Sanierungen. Zwei verschiedene mathematische Modelle, die Telegrafengleichung und die Strahlungstransportgleichung, wurden untersucht, inwieweit sie einerseits die Pulsverformungen bei der Schallausbreitung richtig beschreiben und andererseits die vom Laser her bekannten Eigenschaften aufweisen.
Die bei den von R. Willenbrock und W. Metzner durchgeführten Messungen beobachteten deutlichen Signaldeformationen lassen sich weder durch die Telegraphengleichung noch durch die Randbedingungen, siehe [17], bei Materialübergängen erklären. Dies haben Simulationen, basierend auf der TLM-Methode, gezeigt. Vielmehr werden die Signalveränderungen vom Messgerät selbst und der Geometrie des Versuchsaufbaus bestimmt. Durch Einbeziehung einer (hypothetischen) Gerätefunktion in die Simulation und durch Vergleichsmessungen in Wasser wurde dies bestätigt.
Andererseits haben numerische Experimente mit zufälligen aber frequenzbandbeschränkten Dichte- bzw. Geschwindigkeitsprofilen gezeigt, dass die Signale charakteristische Deformationen erfahren können, zum Beispiel Pulsverbreiterung und Coda-Ausbildung. Wir sind der Ansicht, dass in diesem Bereich die gesuchte Analogie zur Lasertomografie gezogen werden kann.

Um dies zu bestätigen, müssen erheblich aufwendigere Messungen durchgeführt werden. Die technischen Voraussetzungen hierzu wurden von der Firma G&W-Instruments erst teilweise geschaffen.
Die mathematischen Untersuchungen zur Lösung der Telegraphengleichung mit Monte-Carlo-Methoden ([16, 18]) führten zur Analyse von stochastischen Prozessen auf Lie-Gruppen, die auf bestimmte Weise durch einen Poissonprozess gestört werden ([19]). Die dem gestörten Prozess entsprechende Differentialgleichung ist im Spezialfall die bereits früher untersuchte Strahlungstransportgleichung. Neben einer Entwicklung nach Potenzen des Störparameters ergibt sich durch diesen Zugang die Möglichkeit zur Analyse der Gleichung mit fourieranalytischen Methoden.

Dynamische Monte-Carlo-Verfahren (Bearbeiter: K. K. Sabelfeld, P. Mathé, J.-H. Zacharias-Langhans).
Viele physikalisch relevante Größen sind entweder Mittelwerte

$$I(f) := \int f(x) d\mu(x),$$

oder aber deren Bestimmung erfordert als Teilaufgabe Mittelwerte (Integralgleichungen, Transportgleichungen, statistische Physik). Oftmals ist die unmittelbare Simulation der die Mittel bestimmenden Verteilung nicht möglich. Genannt seien hier Mittel bezüglich Gibbs'scher Maße. In derartigen Anwendungen ist die Erzeugung von Zufallszahlen als Markovketten, die asymptotisch die gegebene Verteilung realisieren, ein Ausweg, der historisch in [25] begründet wurde. Dies führt auf Integrationsverfahren mittels Markovketten, wobei obiges Mittel $I(f)$ approximativ bestimmt wird durch

$$I(f) \approx \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} f(X_j),$$

mit $X_1, X_2, \ldots, X_N$ Realisierungen einer Markovkette. In konkreten Anwendungen gibt es viele Markovketten, die die gleiche asymptotische Verteilung realisieren. Dann kommt es darauf an, Eigenschaften und Parameter zu identifizieren, die die Konvergenzeigenschaften der Verfahren bestimmen. Im Mittelpunkt der Untersuchungen stand die Frage der Robustheit, d. h. der Gleichmäßigkeit der Konvergenz auf Klassen von Integranden, sowie der asymptotischen Varianz, des Monte-Carlo-Fehlers. Ergebnisse konnten erzielt werden für den Fall *gleichmäßig ergodischer Markovketten*, siehe [22]. Für derartige Ketten wurde gezeigt:

- Die typische Monte-Carlo-Fehlerrate ($N^{-1/2}$ bei Stichprobenumfang N) wird gleichmäßig auf Klassen von Integranden erreicht und die üblichen Mittel zur Varianzreduktion, insbesondere Präkonditionierung der Integranden, sind einsetzbar.

- Die Güte der Anfangsverteilung hat keinen nennenswerten Einfluss auf die Verfahrensgenauigkeit.

- Die entscheidende Kenngröße, die die Konvergenz beschreibt, ist die *Autokorrellationszeit*, ein Parameter, der die innere Abhängigkeitsstruktur der Stichprobe misst.

Für den Fall diskreter Zustandsräume sind ähnliche Untersuchungen früher gemacht worden, [21]. Im allgemeinen Fall, und erst da klaffen die verschiedenen Ergodizitätsbegriffe auseinander, sind derartige Ergebnisse neu. Erste Ergebnisse sind bei der Übertragung der gewonnenen

Resultate auf eine Verallgemeinerung, das *Single Histogram Sampling*, siehe ([20]), erzielt. Durch diesen Ansatz ist es möglich, effektive Aussagen über Mittel zu erhalten, wenn die Stichprobe einer nicht korrekten „Temperatur" entspricht (Extrapolation). Ziel ist es, wie im oben beschriebenem Sinne, geschlossene Fehlerabschätzungen anzugeben. Bisher sind nur einzelne Komponenten des Gesamtfehlers untersucht ([26]).
Eng verwandt mit Markov-Chain-Monte-Carlo-Verfahren ist *Latin Hypercube Sampling*, ein Monte-Carlo-Integrationsverfahren, siehe [24], [27], das im Hochdimensionalen durch gleichzeitige Stratifikation aller Richtungen die Varianz reduziert. Dies kann nur durch eine den Markovketten verwandte innere Abhängigkeit der Stichprobe erreicht werden. Eine detaillierte Analyse der numerischen Eigenschaften ([23]) ergab jedoch, dass die geringere asymptotische Varianz eng mit jedem einzelnen Integranden verknüpft, gleichmäßig auf Klassen nicht nachweisbar ist. Bei zusätzlichen Glattheitsannahmen ($H^1[0,1]^d$) kann die Gleichmäßigkeit jedoch erzwungen werden. Diese Untersuchungen ergänzen die bisherige, vorwiegend statistisch orientierte Forschung um numerische Aspekte.

Literatur

1. F. H. CHANDHRY, R. N. MORONEY, *A laboratory study of diffusion in stably stratified flow*, Atmos. Environ., **7** (1973), pp. 441–454.

2. T. K. FLESCH, J. D. WILSON, *A two-dimensional trajectory-simulation model for non-Gaussian, inhomogeneous turbulence within plant canopies*, Boundary Layer Meteorology, **61** (1992), pp. 349–374.

3. E. K. GARGER, G. P. ZHUKOV, *On vertical pollution dispersion from a local source in the atmospheric surface layer*, Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Fiz. Atmosfer i Okeana, **22** (1986), No. 2, pp. 115–123.

4. A. S. GURVICH, *Vertical profiles of the wind velocity and temperature in the atmospheric surface layer*, Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Fiz. Atmosfer i Okeana, **1** (1965), No. 1.

5. O. A. KURBANMURADOV, K. K. SABELFELD, *One-particle stochastic Lagrangian model for turbulent dispersion in horizontally homogeneous turbulence*, WIAS-Preprint No. 403, 1998.

6. ——, *Stochastic Lagrangian models for turbulent dispersion in atmospheric boundary layer*, WIAS-Preprint No. 535, 1999.

7. O. A. KURBANMURADOV, U. RANNIK, K. K. SABELFELD, T. VESALA, *Direct and adjoint Monte Carlo algorithms for the footprint problem*, Monte Carlo Methods and Applications, **5** (1999), No. 2, pp. 85–112.

8. A. S. MONIN, A. M. YAGLOM, *Statistical Fluid Mechanics*, **2**, M.I.T. Press, Cambridge, Massachusetts, 1975.

9. P. MONTI, G. LUEZZI, *A closure to derive a three-dimensional well-mixed trajectory model for non-Gaussian, inhomogeneous turbulence*, Boundary Layer Meteorology, **80** (1995), pp. 311–331.

10. S. B. POPE, *Lagrangian PDF methods for turbulent flows*, Annu. Rev. Fluid Mech., **26** (1994), pp. 23–63.

11. A. M. REYNOLDS, *On trajectory curvature as a selection criterion for valid Lagrangian stochastic dispersion models*, Boundary Layer Meteorology, **88** (1998), pp. 77–86.

12. N. E. RIDER, *Eddy diffusion of momentum, water vapour and heat near the ground*, Philos. Trans. Roy. Soc., London Ser. A, **246** (1954), pp. 481–501.

13. K. K. SABELFELD, *Monte Carlo Methods in Boundary Value Problems*, Springer Verlag, New York – Heidelberg – Berlin, 1991, 283 S.

14. K. K. SABELFELD, I. A. SHALIMOVA, *Spherical Means for PDEs*, VSP, Utrecht, The Netherlands, 1997.

15. D. J. THOMSON, *Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows*, J. Fluid. Mech., **180** (1987), pp. 529–556.

16. M. KAC, *Some stochastic problems in physics and mathematics,* Magnolia Petroleum Company Colloq. Lect. Pure Appl. Sci., No. 2, 1956.

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

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

19. H. ZACHARIAS-LANGHANS, *Perturbations by a Poisson process*, Vortrag im Seminar „Stochastische Algorithmen“, 1999.

20. A. M. FERRENBERG, R. H. SWENDSEN, *New Monte Carlo technique for studying phase transitions*, Phys. Rev. Lett., **61** (1988), pp. 2635–2638.

21. A. FRIGESSI, C.-R. HWANG, L. YOUNES, *Optimal spectral structure of reversible stochastic matrices, Monte Carlo methods and the simulation of Markov random fields*, Ann. Appl. Probab., **2** (1992), No. 3, pp. 610–628.

22. P. MATHÉ, *Numerical integration using Markov chains*, Monte Carlo Meth. Appl., **5** (1999), No. 4, pp. 325–343.

23. ——, *Hilbert space analysis of Latin Hypercube Sampling*, Manuskript, 1999.

24. M. D. MCKAY, W. J. CONOVER, R. J. BECKMAN, *A comparison of three methods for selecting values of output variables in the analysis of output from a computer code*, Technometrics, **21** (1979), pp. 239–245.

25. N. METROPOLIS, A. W. ROSENBLUTH, M. N. ROSENBLUTH, A. H. TELLER, E. TELLER, *Equations of state calculations by fast computing machines*, J. Chem. Phys., **21** (1953), pp. 1087–1092.

26. M. E. J. NEWMAN, R. G. PALMER, *Error estimation in the histogram Monte Carlo method*, Manuskript 1999, http://xxx.uni-augsburg.de/ps/cond-mat/9804306.

27. M. STEIN, *Large sample properties of simulations using Latin Hypercube Sampling*, Technometrics, **29** (1987), pp. 143–151.

4.7 Forschungsgruppe Kontinuumsmechanik

4.7.1 Zusammenfassung

Im Berichtszeitraum wurden Fortschritte auf folgenden Gebieten erzielt:

- Beschreibung von Kopplungseffekten in Adsorptions-Diffusions-Vorgängen für poröse Körper. Für mehrere Beispiele von Randwertaufgaben wurde bewiesen, dass die Adsorptions-Massenquelle eine nichtmonotone Funktion der Diffusionsgeschwindigkeit ist.

- Es wurde eine Serie von Untersuchungen zu Mikro-Makro-Übergängen und den hierbei möglichen Skalierungen begonnen. Erste Ergebnisse zeigen, dass sich relativ leicht nichttriviale Anfangswertprobleme aufstellen lassen, wo ein mikroskopisches Modell auf der Makroebene nicht durch ein einziges System von makroskopischen Feldgleichungen repräsentiert werden kann.

- Die Arbeiten auf dem Gebiet der Phasenübergänge wurden fortgesetzt. Bei der Anwendung des eigenen Phasenfeldmodells auf Entmischungsphänomene in binären Legierungen wurde eine internationale Zusammenarbeit mit Experimentatoren und Mathematikern entwickelt.

- Die Serie von Untersuchungen zur Wirkung von Anfangs- und Randwertproblemen hyperbolischer Systeme, wie sie beispielsweise in der erweiterten Thermodynamik auftreten, wurde fortgesetzt. Zu der bisher verwendeten Methode von Projektionsfunktionen zur Einbeziehung von Randwerten wurde eine flexiblere Alternative gefunden, die auf Stetigkeitsargumenten beruht.

- Mit Hilfe eines eigenen Modells wurden völlig neue Ergebnisse für die Ausbreitung von Oberflächenwellen in porösen Körpern produziert. Von besonderer Bedeutung sind dabei die Eigenschaften der Oberflächenwellen auf dem durchlässigen Rand des Skeletts. Bei der Untersuchung starker Singularitäten in porösen Körpern wurde als das erste wichtige Resultat erzielt, dass man keine zusätzlichen Randbedingungen für die Porositätsgleichung benötigt.

- Zu technischen Anwendungen poröser Körper wurde das Projekt „Direkt mit Methanol betriebene Brennstoffzellen“ erschlossen und die Bearbeitung im Auftrag des Forschungszentrums Jülich begonnen. Schwerpunkt ist die Ausweitung des Modellierungsrahmens.

Sowohl die Industriekooperation mit der Freiberger Compound Materials GmbH als auch die Kooperation mit der Heriot-Watt University, Edinburgh, mit dem Laboratory of Material Science, Delft, der Analysis-Gruppe der Universität Pavia und der Universität Moskau wurden in den oben erwähnten Forschungsbereichen vertieft. Die enge Zusammenarbeit mit der Forschungsgruppe von Prof. Ingo Müller an der Technischen Universität Berlin wurde fortgesetzt.

4.7.2 Projekte

Mikro-Makro-Übergänge und Skalierungen

Bearbeiter: W. Dreyer, M. Kunik

Sowohl in den industrierelevanten Projekten über Phasenübergänge als auch in den neu von Dreyer und Kunik entwickelten kinetischen Lösungen von Anfangs-Randwertproblemen hyperbolischer Systeme hat sich das Studium verschiedener Skalierungen von Zeit und Raum als derart bedeutsam erwiesen, dass sich hierfür mittlerweile ein eigenes Projekt herausgebildet hat.

Selbst bei ganz unterschiedlichen Mikro-Makro-Übergängen spielt das Skalenverhalten der resultierenden Makrosysteme bzgl. der Zeit- und Ortsvariablen und anderer physikalischer Größen eine zentrale Rolle. Wir erläutern dies an zwei Arten von Mikro-Makro-Übergängen für Riemann'sche Anfangswertprobleme. In einem Beispiel ist die Mikroebene durch die Newton'sche Mechanik des Vielteilchensystems eines eindimensionalen atomaren Festkörpers beschrieben und im anderen Fall durch die von Dreyer und Kunik in [1], [2] entwickelte kinetische Lösung der gasdynamischen Eulergleichungen auf Zeitintervallen, die der mittleren Dauer des freien Fluges der Gasatome entsprechen. In beiden Fällen resultieren makroskopische Systeme aus Erhaltungsgleichungen, in denen nur noch die Massendichte ρ, die mittlere Geschwindigkeit v und die Temperatur T als Feldgrößen auftreten. Für die atomare Kette erhalten wir für bestimmte Anfangsdaten hyperbolische Gleichungssysteme, die reine Wellenausbreitungen wie in Dreyer/Kunik [3] beschreiben, bzw. für das kinetische Euler-Schema ein parabolisches Gleichungssystem zur Beschreibung der Wärmeleitung im Gas.

a) Wir betrachten zunächst 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 Newton'schen Bewegungsgleichungen

$$m\ddot{x}^\alpha(t) = -\sum_{\beta\neq\alpha}^{N} \frac{\partial\varphi\left(|x^\beta - x^\alpha|\right)}{\partial x^\alpha}, \tag{1}$$

wo m die Masse eines Atoms ist und $\varphi\left(|x^\beta - x^\alpha|\right)$ das Potential bezeichnet, das zwischen den Atomen β und α besteht. In [3] wurden makroskopische Riemann'sche Anfangsdaten für ρ, v und T vorgegeben und deren mikroskopische Präparation für die Newton'schen Gleichungen beschrieben, die die Anfangspositionen und Geschwindigkeiten aller Atome in der Kette liefern, welche die Newtongleichungen verlangen.

Aus den Newton'schen Gleichungen wurden in [3] mit Hilfe einer allgemeinen Fensterfunktion in Zeit und Ort die folgenden allgemeinen Erhaltungsgleichungen gewonnen, in denen sich alle auftretenden thermodynamischen Makrogrößen wie ρ, v, Druck p, innere spezifische Energie u und der Wärmefluss q in eindeutiger Weise durch Mittelwerte aus den Teilchentrajektorien im

Träger der Fensterfunktion darstellen lassen:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \rho}{\partial t}+\frac{\partial \rho v}{\partial x}=0,\\
&\frac{\partial(\rho v)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho v^2+p\right)=0,\\
&\frac{\partial\left(\rho\left(\frac{1}{2}v^2+u\right)\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho\left(\frac{1}{2}v^2+u+\frac{p}{\rho}\right)v+q\right)=0.
\end{aligned} \tag{2}$$

Im Grenzfall unendlich großer Teilchenzahl $N\to\infty$ zeigt sich dann eine entsprechende Riemannlösung, die invariant bzgl. der folgenden Skalentransformation ist:

$$t=\lambda\,\bar{t},\ x=\lambda\,\bar{x}. \tag{3}$$

Von besonderer Bedeutung ist dabei, dass sich diese Invarianz dann einstellt, wenn man λ proportional zur Teilchenzahl N wählt.

Es wurde in [3] als Folge dieser Skaleninvarianz gezeigt, dass dann nur lokale Gleichgewichtszustände in der Kette auftreten. Diese werden durch orts- und zeitabhängige Verteilungen der Zufallsvariablen (r_α, c_α) beschrieben, wobei c_α die Geschwindigkeit des Atoms α ist und r_α sein Abstand vom rechten Nachbaratom. Je nach Art der Mikrobewegung ergeben sich dann unterschiedliche Abschlussbedingungen, die u, p und q als analytische Ausdrücke von ρ und T liefern. Mit Hilfe dieser Abschlussbedingungen konnten drei hyperbolische Feldgleichungssysteme aus (2) explizit gewonnen werden, die zu qualitativ ganz unterschiedlichen Gleichgewichtszuständen gehören und auch auf unterschiedliche analytische Beziehungen für die spezifische Entropie führen.

Darüber hinaus konnte gezeigt werden, dass gewisse Anfangsdaten zu Riemannlösungen führen, die sich nicht mit einer einzigen Art von Mikrobewegung beschreiben lassen und damit auch nicht auf ein hyperbolisches System für die Variablen ρ, v und T führen.

b) Zuvor hatten wir Mikro-Makro-Übergänge behandelt, die auf hyperbolische Systeme und reine Wellenausbreitungsphänomene führen. Im zweiten Beispiel betrachten wir reine Wärmeleitung für das in [1] und [2] behandelte kinetische Euler-Schema, wobei die Riemann'schen Anfangsdaten eine Kontaktunstetigkeit bilden sollen, d. h. die Druckdifferenz und die Geschwindigkeit ist zu Anfang auf beiden Seiten null. Dadurch ist sichergestellt, dass auf der großen Zeit-Orts-Skala keine Wellen entstehen. Die Diffusion entsteht hier aufgrund der Vorgabe einer freien Flugzeit $\tau_M=\tau_R>0$ der Gasatome und steht im Gegensatz zu dem in [1], [2] behandelten Euler'schen Grenzfall $\tau_M\to 0$, der weder Diffusion noch Wärmeleitung beschreiben kann.

Wir sehen hier einen endlichen Zeitstreifen der Länge $\tau_R>0$ als mikroskopischen Bereich an und lassen anstelle der Anzahl der Atome N im Falle der Kette die Anzahl n der Zeitschritte mit Länge $\tau_R>0$ gegen ∞ gehen. Wählt man dann einen Skalenparameter λ proportional zu $\sqrt{n}$, so erhält man eine asymptotische Grenzlösung, die invariant bzgl. der folgenden Skalentransformation ist:

$$t=\lambda^2\bar{t},\ x=\lambda\,\bar{x}. \tag{4}$$

Bei der Beschränkung auf räumlich eindimensionale Lösungen, die aber kinetisch gesehen dreidimensional im Geschwindigkeitsraum der Gasatome sind, erhält man dann für die asymptotische Lösung $(\bar{\rho}, \bar{T})$ die folgenden Resultate:

(a) Der Druck $p=\bar{\rho}\bar{T}$ bleibt in Zeit und Ort konstant, obwohl dies zunächst nur für die Anfangsdaten vorausgesetzt worden ist.

(b) $\beta = 1/\bar{T}$ hängt nur von $\bar{x}/\sqrt{\bar{t}}$ ab und genügt der nichtlinearen Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial \beta}{\partial \bar{t}} = \frac{\tau_R}{2} \frac{\partial^2}{\partial \bar{x}^2} (\ln \beta) \,. \tag{5}$$

(c) Es lässt sich ein skaliertes Geschwindigkeitsfeld $\bar{v}(\bar{t},\bar{x}) = \lim_{n\to\infty} \sqrt{n}\, v(n\bar{t}, \sqrt{n}\bar{x})$ einführen, dass der Beziehung $\bar{v} = \frac{\tau_R}{2} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{x}}$ genügt sowie die folgende Impulsbilanz erfüllt:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\bar{v})}{\partial \bar{t}} + \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \left(\bar{\rho}\bar{v}^2 - \frac{\tau_R}{2} \bar{p} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{x}} \right) = 0 \,. \tag{6}$$

Wir schließen, dass das Euler-Schema mit $\tau_M = \tau_R > 0$ auch die Lösung für ein gekoppeltes System vom Typ Navier-Stokes-Fourier liefert.

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 Applications, **4** (1998), pp. 231–252.

3. ——, *Cold, thermal and oscillator closure of the atomic chain*, WIAS-Preprint No. 489, 1999, erscheint in: J. Phys. A.

Schadstofftransporte in porösen Materialien

Bearbeiter: B. Albers, K. Wilmański

Kooperation: W. Geiger (Universität GH Essen)

Mit diesem Projekt wurde die Forschung des letzten Jahres fortgesetzt.
Es wurden Massenaustauschprozesse in einem dreikomponentigen porösen Körper betrachtet. Zunächst wurde die in dem aus Massenbilanzen, Impulsbilanzen und Porositätsbilanz bestehenden kontinuumsmechanischen Modell auftretende Massenquelle spezifiziert. Sie hat die folgende Gestalt

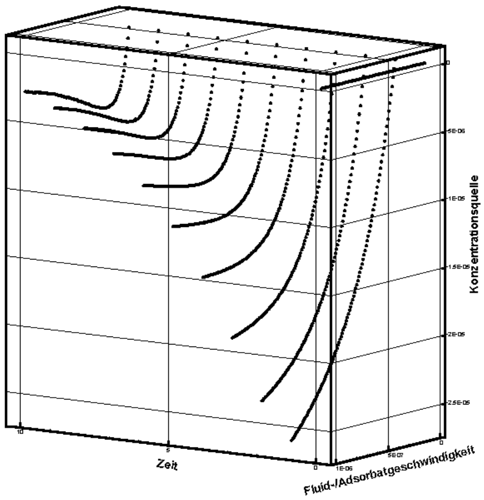
$$\hat{\rho}^A = -\frac{m^A}{V}\frac{d\left(\xi\, f_{int}\right)}{dt} = -\frac{m^A}{V}\left(f_{int}\frac{d\xi}{dt} + \xi\frac{d\,f_{int}}{dt}\right),$$

wobei ξ — gemäß der Adsorptionstheorie von Langmuir — den normierten Anteil der besetzten Plätze pro Einheitsvolumen bezeichnet. Dieses Feld kann als Anzahl der besetzten Plätze in einem repräsentativen Elementarvolumen (REV) interpretiert werden. Weiterhin bezeichnet f_{int} die innere Oberfläche der Poren im REV und m_A die Masse des Adsorbats pro Einheitsfläche dieser Oberfläche.

Das wichtigste Resultat dieses Projekts ist, dass aus den Ergebnissen die Kopplung zwischen Adsorption und Diffusion hervorgeht. Dies bedeutet, dass die adsorbierte Menge von der relativen Geschwindigkeit der Komponenten abhängt.
Bei der Untersuchung sind wir davon ausgegangen, dass sich das Skelett nicht bewegt. Dies hat zur Folge, dass die Fluid-/Adsorbatgeschwindigkeit für die relative Geschwindigkeit der Komponenten steht. Wie aus den Randbedingungen hervorgeht, wird diese Größe hauptsächlich durch den Oberflächendurchlässigkeitsparameter α bestimmt, es gilt nämlich am Rande

$$v^F = \mp\frac{\alpha\left(p^L - np_{l/r}\right)}{\rho^L}.$$

Auch im Körper ist α die führende Größe für die Geschwindigkeit. Wir steuern deshalb bei der Berechnung der Konzentrationsquelle die Geschwindigkeit mit dem Durchlässigkeitsparameter.
Die nebenstehende Abbildung zeigt die Ergebnisse für die Strömung eines Fluid-/Adsorbat-Gemischs durch einen porösen Körper. Sie zeigt, dass die Adsorptionsrate an die Diffusion, also die relative Geschwindigkeit der Komponenten, gekoppelt ist. Für moderate Geschwindigkeitsdifferenzen weist die Adsorptionsrate ein Maximum auf. Dies hat zur Folge, dass man bei Prozessen, bei denen die Geschwindigkeit gesteuert werden kann, Einfluss auf die adsorbierte Menge hat.



Literatur

1. B. ALBERS, *Makroskopische Beschreibung von Adsorptions-Diffusions-Prozessen in porösen Körpern*, Dissertation, Technische Universität Berlin, 2000.

Entmischungsphänomene in binären Legierungen

Bearbeiter: W. Dreyer, M. Kunik

Kooperation: W. H. Müller (Heriot-Watt University, Edinburgh, Großbritannien), P. Colli (Universität Pavia, Italien), S. Eichler (Freiberger Compound Materials GmbH), J. Sietsma, Y. van Leeuwen (Laboratory of Material Science, Delft, Niederlande)

Im Jahr 1997 wurde in Dreyer/Müller [1] ein Phasenfeldmodell vom Cahn-Hilliard-Typ aufgestellt, welches die Entstehung und das Wachstum von Ausscheidungen in binären Legierungen unter Einfluss lokaler Eigenspannungsfelder und bei anisotropen Phasengrenzflächen beschreiben kann.
Im Berichtszeitraum wurden für dieses Modell folgende Untersuchungen durchgeführt.

- Zur Anwendung auf in der Mikroelektronik eingesetzte Zinn-Blei-Lote wurden sämtliche erforderlichen Materialparameter des Modells aus realistischen Daten gewonnen. Insbesondere wurden nichtkonvexe freie Energien für das Zinn-Blei-System ermittelt.

- Die Mobilitäten für die Diffusion von Zinn in der bleireichen Phase und von Blei in der zinnreichen Phase wurden bestimmt und weisen Unterschiede von bis zu vier Größenordnungen auf. Es kann somit fast von einem unstetigen Übergang an einer Phasengrenzfläche gesprochen werden.

- Sprekels, Klein und Dreyer haben einige Vereinfachungen des Modells studiert, um dieses einer ersten rigorosen mathematischen Behandlung zuzuführen. Hierzu wurde eine Zusammenarbeit mit der Gruppe von Prof. Colli in Pavia begonnen.

- Ein Vergleich von numerisch gewonnenen Lösungen des Modells mit Experimenten hat gezeigt, dass der Einfluss der lokalen Spannungsfelder auf die Diffusion stärker sein müsste, als es bisher im Modell wiedergegeben wird. Eine der zentralen Größen des Modells ist der Diffusionsfluss
$$J_i = -M_{ij}\frac{\partial w_{jk}}{\partial x_k}. \tag{1}$$
In der bisher verwendeten Version des Phasenfeldmodells ist das Potential w_{jk} gegeben durch $w_{jk} = w\delta_{jk}$ mit
$$w = \left(\frac{\partial \psi(c)}{\partial c} - a_{ij}(c)\frac{\partial^2 c}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\partial}{\partial c}\left(\frac{1}{2}\left(\varepsilon_{ij} - \varepsilon^*_{ij}(c)\right)C_{ijmn}(c)\left(\varepsilon_{mn} - \varepsilon^*_{mn}(c)\right)\right)\right). \tag{2}$$
Hier bedeuten: M_{ik} – Matrix der Mobilitäten, c – das zu bestimmende Phasenfeld, welches repräsentiert wird durch die Konzentration der Komponente B, ψ – freie Energiedichte, a_{ij} – Matrix der Gradientenkoeffizienten, ε_{ij} – Komponenten des Verzerrungsfeldes, C_{ijmn} – Steifigkeitsmatrix, ε^*_{ij} – Komponenten des Eigenverzerrungsfeldes, welches durch unterschiedliche thermische Ausdehnungen der Phasen oder/und durch Kohärenzfelder erzeugt wird.
In einer begonnenen Untersuchung der Ursachen für den zu schwachen Einfluss der lokalen Spannungen auf die Diffusion haben wir eine Methode entwickelt, die es gestattet, das bisher im Modell verwendete Potential w mit einer entsprechenden Darstellung zu

vergleichen, die rigoros hergeleitet werden kann aus den mikroskopischen Bewegungsgleichungen von Teilchen der Sorten A und B einer binären Mischung.

Die mikroskopische Theorie liefert für das Potential w die Darstellung

$$
\begin{aligned}
&w_{jk}(t,\mathbf{x}) = \\
&-\int_0^\infty d\vartheta \Big(\sum_{\alpha=1}^{N} m\hat{c}(\alpha)\dot{x}_j^\alpha(\vartheta)\dot{x}_k^\alpha(\vartheta)\chi(\vartheta - t, \mathbf{x}^\alpha(\vartheta) - \mathbf{x}) + \\
&\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta=1}^{N} (\hat{c}(\alpha) + \hat{c}(\beta)) K_j^{\alpha\beta}(\vartheta) r_k^{\alpha\beta}(\vartheta) \int_0^1 \chi\left(\vartheta - t, \mathbf{x}^\alpha(\vartheta) - \mathbf{x} + \mu\mathbf{r}^{\alpha\beta}(\vartheta)\right) d\mu \Big).
\end{aligned}
\tag{3}
$$

In dieser Darstellung wird das Potential des makroskopischen Diffusionsflusses vollständig durch mikroskopische Größen der atomaren Ebene ausgedrückt. Es bedeuten: $x^\alpha(\vartheta), \dot{x}_i^\alpha(\vartheta), K_j^{\alpha\beta}(\vartheta), r_k^{\alpha\beta}(\vartheta)$ Orte, Geschwindigkeiten, Wechselwirkungskräfte und Relativabstände zur Mikrozeit ϑ der N Mikroteilchen, die mit griechischen Buchstaben indiziert werden. Ob ein Index α ein A- oder ein B-Teilchen charakterisiert, wird durch die Größe $\hat{c}(\alpha) \in \{0,1\}$ festgelegt. Die Verbindung zwischen den mikroskopischen Größen und den makroskopischen Größen im Zeit- und Raumpunkt (t,x) wird durch Bildung von Mittelwerten mit Hilfe einer Fensterfunktion $\chi(t,\mathbf{x})$ in Zeit und Raum hergestellt, siehe (2). In diese Bildung geht die Kenntnis der mikroskopischen Teilchentrajektorien ein. Eine explizite Auswertung der Darstellung 3 ist eine der Aufgaben für das Jahr 2000.

Im Berichtszeitraum haben sich durch Aufnahme zweier Kooperationen weitere Fragestellungen ergeben:

- Die Wärmebehandlung von einkristallinem Gallium-Arsenid führt zur unerwünschten Bildung von Gallium-Inseln. Um zu Kriterien zu kommen, damit dieses Phänomen nicht auftritt, soll der Ausscheidungsprozess mit dem Phasenfeldmodell simuliert werden.

- Der $\gamma \to \alpha$-Phasenübergang in Stahl wird initiiert durch Diffusion von Kohlenstoff, dessen Konzentration bei entsprechender Temperatur in ein Zweiphasengebiet eintritt. Dieser Phasenübergang geht ebenfalls einher mit der Bildung lokaler Spannungsfelder, so dass auch hier eine Simulation mittels des Phasenfeldmodells durchgeführt werden soll. Vorarbeiten haben bereits gezeigt, dass dies in einfacherer Weise möglich ist, als durch die Verwendung des bisher vom Kooperationspartner benutzten Modells mit scharfen Phasengrenzflächen.

Literatur

1. W. DREYER, W. H. MÜLLER, *On the coarsening of the eutectic structure in tin/lead solders*, Internat. J. Solids Structures, **37** (2000), pp. 3841–3871.

2. W. DREYER, M. KUNIK, *Cold, thermal and oscillator closure of the atomic chain*, WIAS-Preprint No. 489, 1999, erscheint in: J. Phys. A.

Kinetische Darstellung der Lösungen hyperbolischer Systeme

Bearbeiter: W. Dreyer, M. Kunik

Förderung: DFG: „Kinetische Behandlung von ausgewählten hyperbolischen Anfangs- und Randwertproblemen“

In diesem Projekt entwickeln wir Lösungsmethoden für nichtlineare hyperbolische Systeme erster Ordnung, die sich auf eine unter den Feldgleichungen liegende kinetische Betrachtung gründen. Im Berichtszeitraum haben wir hierzu mit der Bearbeitung von zwei neuen Fragestellungen begonnen.

- Bisher hatten wir das Anfangs- und Randwertproblem der Eulergleichungen durch mikroskopische Betrachtung der Teilchen-Wand-Wechselwirkung gelöst, siehe hierzu [2]. Die gesuchten Felder Dichte, Geschwindigkeit und Temperatur werden dann dargestellt durch Integrale über dem Raum der Mikrogeschwindigkeiten der beteiligten Gasteilchen. In diesen Integralen treten Projektionsfunktionen auf, die die möglichen Wandwechselwirkungen explizit berücksichtigen, und für die wir ein Berechnungsschema entwickelt haben.

  Die Methode der Berechnung von Projektionsfunktionen haben wir nun ersetzt durch eine Alternative, die flexibler zu handhaben ist und die auf Stetigkeitsbedingungen an der Wand basiert. Die erwähnten Integrale enthalten jetzt Hilfsfunktionen, von denen wir gezeigt haben, dass sie mit den gegebenen Randwerten über nichtlineare algebraische Gleichungen zusammenhängen. Diese Gleichungen resultieren aus Stetigkeitsbedingungen, die wir fordern, wenn wir bei festgehaltener Zeit den Limes „innerer räumlichen Punkt $\rightarrow$ Wandpunkt“ betrachten ([1]).

- Das im Jahr 1998 vorgestellte und gelöste Anfangs- und Randwertproblem zur Beschreibung von Wärmeleitung in Kristallen bei tiefer Temperatur ist vor allem aus mathematischer Sicht interessant. Hier haben wir bereits erfolgreich die Methode der Stetigkeitsbedingungen analytisch und numerisch aufgestellt und ausgewertet ([3]). Allerdings reicht die im verwendeten Feldgleichungssystem enthaltene Struktur nicht aus, um die reichhaltigen Phänomene, die im Zusammenhang mit der Ausbreitung von Wärmepulsen auftreten können, alle zu erfassen. Dies geht aber mit einer Erweiterung des alten Systems, die wir im Berichtszeitraum abgeleitet haben: Bisher betrachteten wir ein Feldgleichungssystem für die Variablen Energiedichte e und Wärmefluss Q_i, die wir in dem Feldvektor $u_A = (e, Q_i), A \in \{0,1,2,3\}$, zusammenfassen. Jetzt erweitern wir u_A gemäß $u_A = \left(e, Q_i, N_{<ij>}\right), A \in \{0,1,2,3,...,8\}$. Hier ist $N_{<ij>}$ der spurfreie Anteil des Impulsflusstensors der die Wärme übertragenden Phononen.

  Wir betrachten nun einen Normalbereich Ω bzgl. der Achse in der Raumzeit mit positiv orientiertem Flächenelement des Randes $\partial\Omega$. Die Bilanzgleichungen für die Variablen u_A lauten dann
  $$\oint_{\partial\Omega} (u_A, F_{Ak})\, d\vec{o} = \int_{\Omega} P_A dt d^3x, \tag{1}$$
  bzw. bei stetiger Differenzierbarkeit der Größen
  $$\frac{\partial u_A}{\partial t} + \frac{\partial F_{Ak}}{\partial x_k} = P_A. \tag{2}$$

Die Flüsse und Produktionen haben wir über das Maximum-Entropie-Prinzip und mittels eines einfachen Phonon-Gitter-Wechselwirkungsmodells mit den Variablen in Beziehung gesetzt. Wir haben gezeigt, dass gilt

$$u_A = -\frac{\partial h'}{\partial \Lambda_A}, \quad F_{Ak} = -\frac{\partial \varphi'_k}{\partial \Lambda_A}, \quad h' = \frac{\partial^2 I}{\partial \Lambda_0^2}, \quad \varphi'_k = \frac{\partial^2 I}{\partial \Lambda_0 \partial \Lambda_k}. \tag{3}$$

Die Größen $\Lambda_A = (\Lambda_0, \Lambda_k, ...)$ sind Lagrange-Multiplikatoren, und das Potential I ist eine explizit gegebene Funktion der Λ_A. Das resultierende Feldgleichungssystem ist vom symmetrisch hyperbolischen Typ.

Beide Fragestellungen werden in den beiden kommenden Jahren im Rahmen eines DFG-Projektes bearbeitet. Algebraische Stetigkeitsbedingungen für die kinetische Lösung des Anfangs- und Randwertproblems hyperbolischer Systeme deuten auf ein noch nicht gänzlich verstandenes allgemeines Lösungsprinzip hin.

Literatur

1. W. Dreyer, M. Kunik, *Kinetische Behandlung von ausgewählten hyperbolischen Anfangs- und Randwertproblemen*, DFG-Projektantrag.

2. ——, *Reflections of Eulerian shock waves at moving adiabatic boundaries*, Monte Carlo Methods Appl., **4** (1998), No. 3, pp. 231–252.

3. ——, *Initial and boundary value problems of hyperbolic heat conduction*, Contin. Mech. Thermodyn., **11** (1999), No. 4, pp. 227–245.

Randbedingungen für Sedimentationsvorgänge in geschlossenen Behältern mit geneigten Wänden

Bearbeiter: M. Kunik

Kooperation: R. Bürger (Universität Stuttgart)

Mathematische Modelle, die Absetzvorgänge von Feststoffsuspensionen in einer Flüssigkeit beschreiben, sind von großem Interesse in der Erzaufbereitung, der Abwasserreinigung und der Medizin. Obwohl in der Praxis verwendete Absetzbecken eine komplexe Geometrie aufweisen (geneigte Wände, Einbauten, Zu- und Abflüsse), kann das Materialverhalten der zu trennenden Suspensionen meist nur im eindimensionalen Absetzversuch studiert werden. Hierbei werden in der Regel zwei materialspezifische Modellfunktionen, die Driftflussfunktion (Feststoff-Flussdichtefunktion) und der Feststoff-Spannungsanteil bestimmt.
Die Beschreibung des Materialverhaltens der Suspension durch diese beiden Modellfunktionen ist jedoch nicht an eine Raumdimension gebunden, wenn im mehrdimensionalen Fall die Kontinuitätsgleichungen für beide Phasen um eine Impulsbilanz der Mischung erweitert werden. Ein besonders einfaches Beispiel für dieses Vorgehen ist das von Schneider in [7] beschriebene Sedimentationsmodell, das auf die Theorie so genannter kinematischer Wellen zurückgeführt wird. Ein ähnliches Modell, das Kynch-Modell, wurde im eindimensionalen Fall von Kunik ([6]) bereits analytisch gelöst.
Bürger und Kunik haben in [4] das nur auf der Driftflussfunktion beruhende Modell von Schneider, das etwa für Suspensionen von Glaskügelchen angemessen ist, auf ausgeflockte Suspensionen mit nicht verschwindendem Feststoff-Spannungsanteil erweitert. Die dabei entstehenden Modellgleichungen sind wie bei Schneider ([7]) geometrieabhängig und führen bei Vorhandensein einer geneigten Wand auf eine hyperbolisch-parabolisch entartete Gleichung für die Konzentration, die an eine gewöhnliche Differentialgleichung für die vertikale Komponente des Geschwindigkeitsfeldes der Mischung gekoppelt ist. Existenz und Eindeutigkeitsresultate sowie den entartenden Charakter solcher Systeme berücksichtigende Diskretisierungsverfahren sind erst vor kurzem erzielt bzw. entwickelt worden, siehe [2], [3].
Numerische Lösungen der in [4] aufgestellten Systeme geben die Zunahme der Sedimentationsgeschwindigkeit unter geneigten Wänden wieder, den so genannten Boykott-Effekt (siehe [1]), jedoch zeigt sich, dass die Strömungsfelder i. Allg. unrealistisch sind. Dies äußert sich etwa darin, dass das Modell selbst im stationären Fall starke Zirkulationsströmungen im Klarwasserbereich prognostiziert. Wie in [4] gezeigt wird, geht dieses Verhalten nicht auf die von Bürger und Kunik vorgenommene Erweiterung auf ausgeflockte Suspensionen zurück, sondern beruht auf der von Schneider verwendeten vereinfachten Impulsbilanz.
Wir erhoffen uns daher durch die geplante Fortsetzung dieser Studie mit einer verbesserten Impulsbilanz, etwa der in [5] eingeführten, auch eine korrekte Wiedergabe der Strömungsfelder. Hierfür sollten zunächst stark verdünnte Suspensionen in einer viskosen Flüssigkeit mit konsistenten Randbedingungen modelliert und gelöst werden.

Literatur

1. A. Acrivos, E. Herbolzheimer, *Enhanced sedimentation in settling tanks with inclined walls*, J. Fluid Mech., **92** (1979), pp. 435–457.

2. R. BÜRGER, S. EVJE, K. H. KARLSEN, *On strongly degenerate convection-diffusion problems modeling sedimentation-consolidation processes*, Applied Mathematics Report, University of Bergen, Bergen, Norway, 1999, eingereicht.

3. R. BÜRGER, S. EVJE, K. H. KARLSEN, K.-A. LIE, *Numerical methods for the simulation of the settling of flocculated suspensions*, erscheint in Sonderausgabe von: Separ. Purif. Technol.

4. R. BÜRGER, M. KUNIK, *On boundary conditions for multidimensional sedimentation-consolidation processes in closed vessels*, WIAS-Preprint No. 544, 1999.

5. R. BÜRGER, W. L. WENDLAND, F. CONCHA, *Model equations for gravitational sedimentation-consolidation processes*, Z. Angew. Math. Mech., **80** (2000), pp. 79–92.

6. M. KUNIK, *A solution formula for a non-convex scalar hyperbolic conservation law with monotone initial data*, Math. Meth. Appl. Sci., **16** (1993), pp. 895–902.

7. W. SCHNEIDER, *Kinematic-wave theory of sedimentation beneath inclined walls*, J. Fluid Mech., **120** (1982), pp. 323–346.

Wellenausbreitung in porösen Körpern

Bearbeiter: K. Wilmański

Kooperation: I. Edelman (Stipendiatin der Alexander von Humboldt-Stiftung, derzeit WIAS), E. Radkevich (Staatliche Universität Moskau, Russland), D. Kolymbas (Universität Innsbruck, Institut für Geotechnik und Tunnelbau)

In Bezug auf Ergebnisse für Schallwellen, die in den letzten Jahren für das eigene Modell für poröse Körper erzielt worden sind, wurden zwei Gebiete der Wellenausbreitung untersucht, nämlich

1. Oberflächenwellen für zweikomponentige gesättigte poröse Körper und
2. Riemann-Probleme für starke Singularitäten (kinkförmige Unstetigkeiten der Geschwindigkeiten).

Für Oberflächenwellen wurden zwei Teilaufgaben gelöst:

a/ Der poröse Körper befindet sich in Kontakt mit Vakuum, die Grenze ist für die flüssige Komponente undurchlässig.

b/ Der poröse Körper befindet sich in Kontakt mit einer Flüssigkeit, die durch den durchlässigen Rand ausfließt.

Die erste Aufgabe führt für kurze Wellen zu der folgenden dimensionslosen Dispersionsgleichung ([1])

$$-\frac{i\mu}{2\gamma_1\gamma_2}\left[-\left(\rho_0^S\frac{\omega^2}{\mu^S}-2\right)\gamma_1\left(2-\frac{\omega^2}{U_2^{S2}}\right)+\rho_0^F\frac{\gamma_2\omega^2}{\mu^S U_2^{S2}}-4\mu\frac{\gamma_1\gamma_2}{k^2}\right]=0,$$

$$\gamma_1:=|k|\sqrt{1-\frac{\omega^2}{U^{F2}}},\quad \gamma_2:=|k|\sqrt{1-\frac{\omega^2}{U_1^{S2}}},\quad \mu:=|k|\sqrt{1-\frac{\omega^2}{U_2^{S2}}},$$

wo U_1^S, U_2^S, U^F die dimensionslosen Ausbreitungsgeschwindigkeiten der P1-, S-, P2-Schallwellen bezeichnen, ρ_0^S, ρ_0^F sind Referenzmassendichten der beiden Komponenten, ω ist die dimensionslose Wellenfrequenz und k die Wellenzahl. Die asymptotische Analyse dieser Gleichung zeigt, dass sich zwei Arten von Oberflächenwellen ausbreiten: eine generalisierte Rayleigh-Welle, die durch Energieübertragung auf andere Wellen gedämpft ist und deren Geschwindigkeit größer als die Geschwindigkeit der P2-Wellen ist, und eine Stoneley-Welle, die die kleinste Ausbreitungsgeschwindigkeit besitzt und nicht gedämpft ist.
Die zweite Aufgabe basiert auf der Randbedingung für durchlässige Ränder, die in der Gruppe früher entwickelt worden ist. Es wurde bewiesen ([2]), dass in diesem Fall drei Oberflächenwellen möglich sind: außer zwei Arten, die für einen undurchlässigen Rand existieren, entsteht eine neue Pseudo-Stoneley-Welle. Diese Welle wird gedämpft und breitet sich mit einer Geschwindigkeit aus, die, ähnlich wie bei der Rayleigh-Welle, etwas größer ist als die Geschwindigkeit der P2-Welle. Die Eigenschaften dieser Wellen sind sehr stark vom Oberflächendurchlässigkeitsparameter α abhängig. Diese Arbeit wird im nächsten Jahr fortgesetzt. Es sollen numerische

Beispiele untersucht und Oberflächenwellen auf den Kontaktflächen zweier verschiedener poröser Körper beschrieben werden. Außerdem wird versucht, die Ergebnisse praktisch im Bereich der Bodenmechanik umzusetzen.
Dieses Projekt wird mit Hilfe eines *linearisierten* Modells durchgeführt, was für die Beschreibung von Oberflächenwellen völlig ausreichend ist. Das zweite Forschungsprojekt betrifft die Ausbreitung von starken Singularitäten, deren Existenz *nichtlineare* Beiträge im Modell verlangt. Für diese Aufgabe wurden erste Ergebnisse mit Hilfe von asymptotischen Methoden erzielt ([3]). Zum Beispiel wurde gezeigt, dass die Porositätsgleichung, die in dem eigenen Modell ein wesentlicher Beitrag ist, keine zusätzlichen Randbedingungen verlangt. Für kinkähnliche Geschwindigkeitswellen entstehen Pseudosolitonen für die dynamische Störung der Porosität. Diese Eigenschaft ist charakteristisch für Gleichungen mit Dispersion, wie zum Beispiel in der Korteweg-de-Vries-Gleichung. Pseudosolitonen degenerieren zu Dirac-δ-Singularitäten in der Null-Grenze des kleinen Parameters β (dynamische Kopplung der Komponenten).

Literatur

1. I. EDELMAN, K. WILMAŃSKI, E. RADKEVICH, *Surface waves at a free interface of a saturated porous medium*, WIAS-Preprint No. 513, 1999.

2. I. EDELMAN, K. WILMAŃSKI, *Surface waves at an interface separating a saturated porous medium and a liquid*, WIAS-Preprint No. 531, 1999.

3. E. RADKEVICH, K. WILMAŃSKI, *Riemann problem for poroelastic materials with the balance equation for porosity*, erscheint als WIAS-Preprint.

4.8 Gruppenübergreifende Projekte

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 technische Ziel des Projektes, durch Simulationsrechnungen für verschiedene Standardgeometrien und Metalllegierungen die notwendigen Schweißparameter zu bestimmen und den breiten Anwendungsbereich dieser Technologie unter Beweis zu stellen.
Das mathematische Modell, in dem mechanische, elektrische und thermische Effekte gekoppelt auftauchen, ist in [1] beschrieben. Mathematische Untersuchungen im Berichtszeitraum erstreckten sich vor allem auf das thermoelastische Kontaktproblem. Die Resultate sind in [2] dokumentiert.

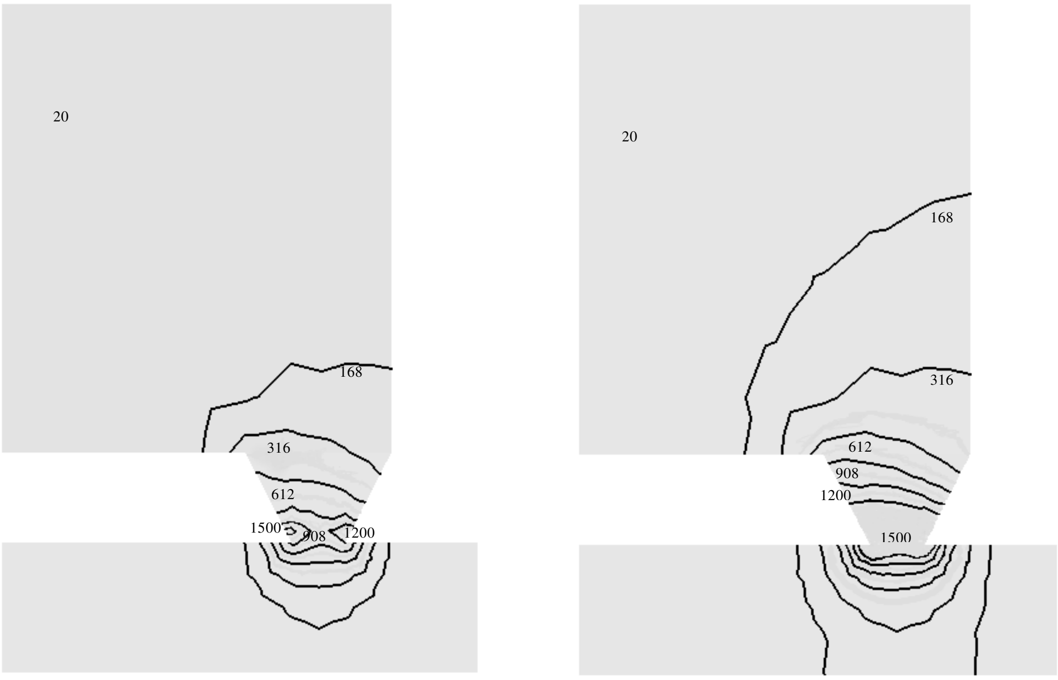


Abb. 1: Temperaturverteilung in °C in einem Bauteil mit Massivbuckel aus Stahl beim Verschweißen mit einer dünnen Stahlplatte. a) Isothermen zu Beginn des Aufschmelzens, b) Isothermen mit maximalem Schmelzbereich.

Das Modell wurde auf der Basis eines gemischten Finite-Element-Ansatzes im Rahmen der *pdelib* implementiert. Die vom Kooperationspartner vorgegebenen Bauteilgeometrien und Randbedingungen ließen die Behandlung als zweidimensionales Problem zu.

Die Abbildungen zeigen Resultate von Simulationsrechnungen auf der Basis der vom Kooperationspartner bereitgestellten Daten. Die gerechneten Temperaturverteilungen (Abb. 1) zeigen, dass die höchsten Temperaturen an den Rändern der Kontaktfläche auftreten. Dort bilden sich zunächst kleine Schweißlinsen aus, die innerhalb weniger hundert Mikrosekunden zur Mitte hin auf einen zusammenhängenden Schmelzbereich anwachsen.
Obwohl der in Abb. 1b dargestellte maximale Schmelzbereich ohne Berücksichtigung der deformierten Buckelgeometrie berechnet wurde, konnte die für das Impulsschweißen typische Beschränktheit des aufgeschmolzenen Bereichs und der sich daran anschließenden Wärmeeinflusszone simuliert werden. Beachtenswert ist die geringe Wärmeeindringtiefe in der unterliegenden Platte. Gerade durch diesen Effekt wird es möglich, dass Bauteile mit Buckeln auf beschichtete Platten geschweißt werden können.

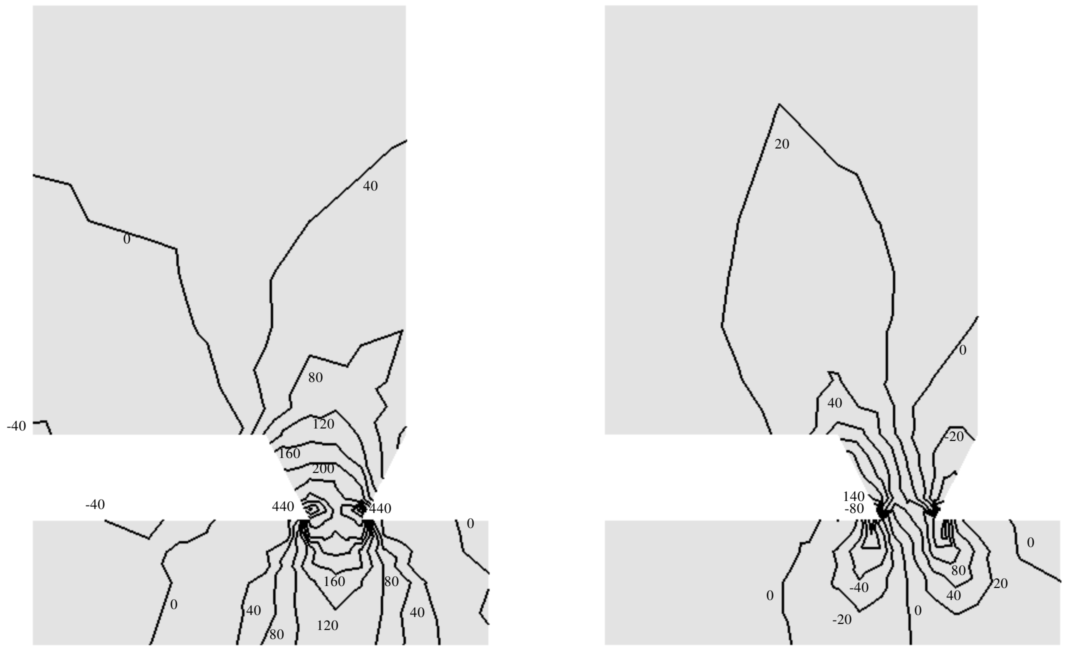


Abb. 2: Spannungsverteilung vor der Stromzufuhr in MPa. a) Druckspannung in Beanspruchungsrichtung, b) Schubspannung.

In Abb. 2 sind die berechneten mechanischen Spannungsverteilungen vor der elektrischen Stromzufuhr dargestellt. Es liegt eine rein elastische Deformation vor. Im oberen Bereich des Bauteils ist eine nahezu homogene Spannungsverteilung zu erkennen. In der Nähe des Buckels kommt es dann zu einem Anstieg der Druckspannungen.
Die Abb. 3a – d zeigen die Verteilung der Spannungen und der Verzerrungsraten in den Fügeteilen unmittelbar zu Beginn des vollständigen Durchschmelzens der Materialien. Die Isothermen verlaufen zwischen denen von Abb. 1a und Abb. 1b. Aufgrund der hohen Temperaturen liegt, lokal auf die Umgebung der Kontaktfläche begrenzt, entsprechend des Materialmodells viskoelastisches Verhalten vor. Das Material beginnt bei den vorliegenden Spannungen mit hoher Geschwindigkeit zu kriechen. Die negative Dehnrate nimmt mit der Verengung des Buckels zu und erreicht ihr Maximum etwas oberhalb der Kontaktfläche. Gleichzeitig findet in der Umgebung der Kontaktfläche eine Spannungsumverteilung statt. Insbesondere ist ein Abbau der Spannungsspitzen an den Buckelrändern oberhalb der Kontaktfläche zu beobachten. Die Gleitraten nehmen an den Buckelrändern ihre größten Werte an und erreichen oberhalb der Kontaktstelle ihr lokales Maximum bzw. Minimum. Eine geringe Umverteilung der Schubspan-

nungen lässt sich ebenfalls beobachten.

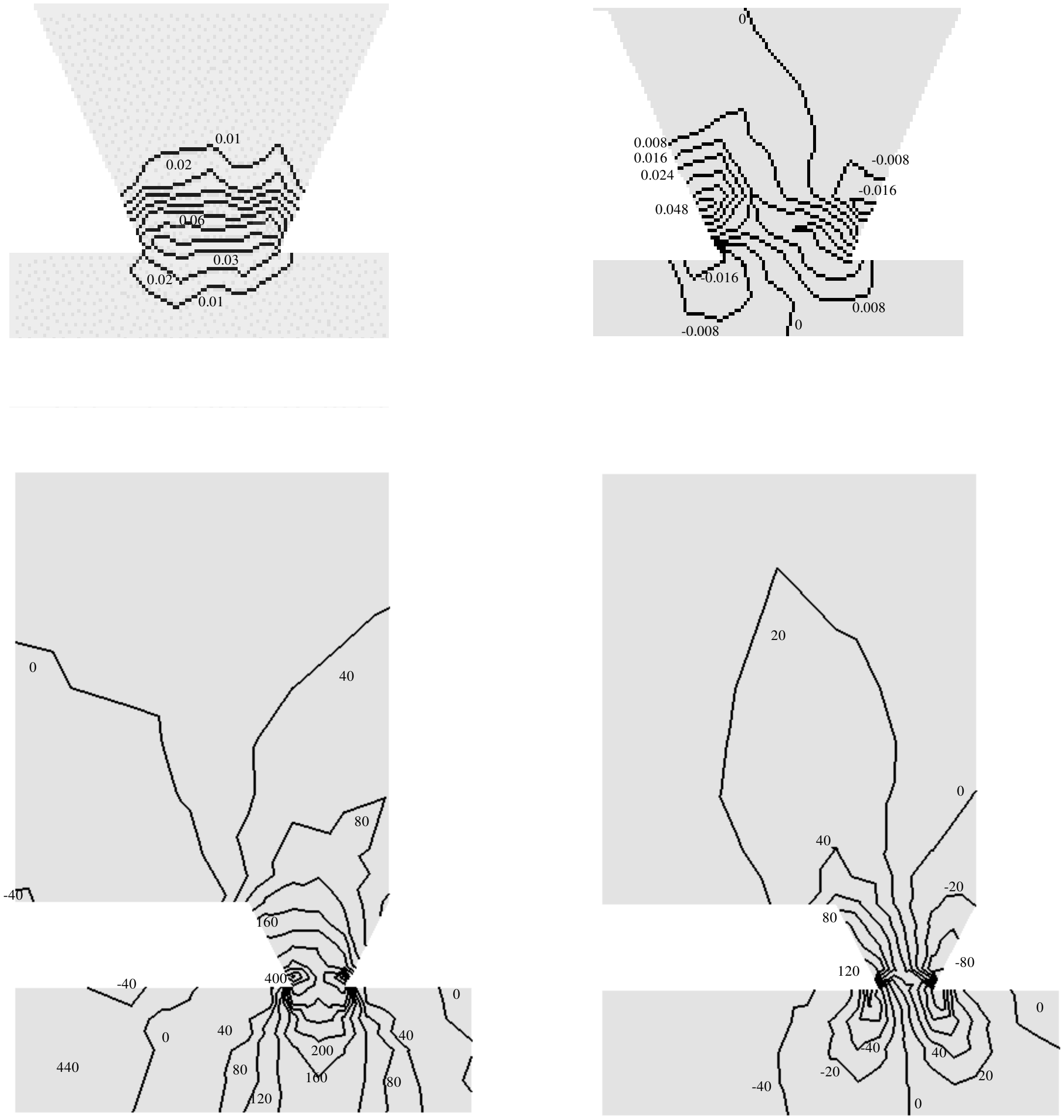


Abb. 3: Verzerrungsraten- und Spannungsverteilung zu Beginn der vollständigen Aufschmelzung der Kontaktfläche in s-1 bzw. MPa. a) Dehnraten in Beanspruchungsrichtung, b) Gleitraten, c) Druckspannungen in Beanspruchungsrichtung, d) Schubspannungen.

Literatur

1. W. DREYER, F. DUDERSTADT, D. HÖMBERG, *Finite-Element-Simulation des Kondensator-Impulsschweißens*, Technische Mechanik, **19** (1999), pp. 331–340.

2. D. HÖMBERG, A. KHLUDNEV, J. SOKOLOWSKI, *On an equilibrium problem for a cracked body with electrothermoconductivity*, WIAS-Preprint No. 476, 1999.

3D-Simulation von Halbleiterdetektoren

Bearbeiter: H. Gajewski (FG 1), H.-Chr. Kaiser (FG 1), H. Langmach (FG 3), R. Nürnberg (FG 1)

Kooperation: KETEK GmbH Halbleiter- und Reinraumtechnik, R. Richter (MPI-Halbleiterlabor München), L. Strüder (Max-Planck-Institut für Physik München)

Förderung: BMBF

Ziel des Projekts ist die Erweiterung des am WIAS für die 2D-Simulation von Halbleiterbauelementen entwickelten Programmsystems `WIAS-TeSCA` (Two and three dimensional Semi-Conductor Analysis package) zur räumlich dreidimensionalen Berechnung der funktionsbestimmenden Ladungstransportvorgänge in Detektorstrukturen. Dazu waren und sind analytisch fundierte Algorithmen zu begründen und zu implementieren, die eine hochauflösende, effiziente und zuverlässige numerische Simulation ermöglichen ([3, 4]). Stufenweise galt es, die bewährten Vorzüge von `WIAS-TeSCA`, wie die hohe Flexibilität in der Geometrie sowie die robuste und schnelle Numerik beim Übergang zu 3D-Gittern, zu erhalten und auszubauen, damit zeitabhängige Simulationen für große Strukturen auch unter Berücksichtigung von 3D-Effekten mit vertretbarem Aufwand erfolgen können.

Das Redesign von `WIAS-TeSCA` als von der Raumdimension des Simulationsgebiets unabhängiges Tool geht im Sinne strukturierter Programmierung objektorientiert ([5]) vor. Die Implementierung erfolgt in C, unter Einbindung vorhandener Fortran-Quellen, mit numerischen Kernen in Fortran. Auf alle die Portabilität behindernden Elemente, darunter auch spezielle C++ Konstrukte, wird verzichtet. Wir verwenden *pdelib*-Komponenten (siehe [1] und S. 58) wie die offene Schnittstelle zur Gitterverwaltung (*sxgrid*) und die Schnittstelle zur linearen Algebra (*mxlib*, *itlib*). Als interaktive Online-Graphik kommt *gltools* ([2]) zum Einsatz und es gibt eine Schnittstelle zur Eingabesprache *lua* ([6]).
In `WIAS-TeSCA` erfolgt eine Erweiterung des *pdelib*-Konzeptes hin zur Behandlung eines im Prinzip offenen Satzes von gekoppelten Gleichungen, die auf jeweils eigenen spezifischen Teilen des Gitters definiert und gelöst werden, sich aber dabei auf das Grundgitter des Simulationsgebietes beziehen und in Hinblick auf die selbstkonsistente Lösung des Gesamtsystems über dieses Grundgitter kommunizieren. Dazu korrespondierend erfolgt die Verwaltung von Materialeigenschaften.
Mit diesem Konzept ist zunächst die Lösung der nichtlinearen Poissongleichung zur Berechnung des elektrostatischen Potentials in einer dotierten (dreidimensionalen) Halbleiter-Heterostruktur bei räumlich variabel vorgegebenen Quasi-Fermi-Potentialen der Ladungsträgerdichten realisiert. Dabei wurden die Voraussetzungen geschaffen zur Einbindung der Ladungsträgertransportgleichungen und weiterer optional in das Drift-Diffusions-Modell zu integrierender Modelle wie solche für die räumlich aufgelöste Temperaturentwicklung im Bauelement (siehe S. 14), die Störstellendynamik, das optische Feld (Lasermodelle) (siehe S. 21) und quantenmechanische Bandstrukturberechnungen (siehe S. 141).

Mit dem weiterentwickelten Programmsystem `WIAS-TeSCA` wurden für das MPI-Halbleiterlabor München erfolgreich 3D-Simulationen von pn-CCD-Schieberegisterstrukturen durchgeführt. Diese pn-CCDs (Charge Coupled Device) ([7]) werden als Röntgen-Detektoren in den ESA-Satelliten ABRIXAS und XXM (Xray Multi Mirror) eingesetzt. Für die weitere Skalierung — die Verkleinerung der Pixelgeometrien — war die Berücksichtigung von 3D-Effekten bei der mathematischen Beschreibung unerlässlich. Diese Halbleiterdetektoren brauchen ein großes Konvertierungsvolumen, um eine gute Energieauflösung und einen breiten Nachweisbereich zu erhalten. Für die Simulation bedeutet das eine große Ausdehnung der Bauelemente bei gleichzeitig sehr feiner Oberflächenstrukturierung. Der Kooperationspartner übergab für die Testrechnungen reale Geometrie- und Dotierungsdaten. Mit Gittern bis zu 150 000 Knoten wurden gute Ergebnisse erzielt.

Der Vergleich mit 2D-Simulationen in Längs- und Querrichtung zeigt Abweichungen des Potentials in den Mulden des CCD-Kanals von einem eV bis zu mehreren eV bei weiterer Verkleinerung der Zellengröße. Zugleich konnte nachgewiesen werden, dass die starken Streufelder die Transfereigenschaften der 3-Phasen-Schieberegister weiter verbessern. Neben dem genaueren Verständnis der Halbleiterdetektoren dienen die 3D-Simulationen in diesem Fall vor allem der Technologieoptimierung, der Einstellung geeigneter Dotierungsprofile.

Die folgenden Abbildungen zeigen als Ergebnis einer quasistationären 3D-Simulation die Potentialverhältnisse und die Elektronenverteilung in einer pn-CCD-Schieberegisterzelle beim Transfer.

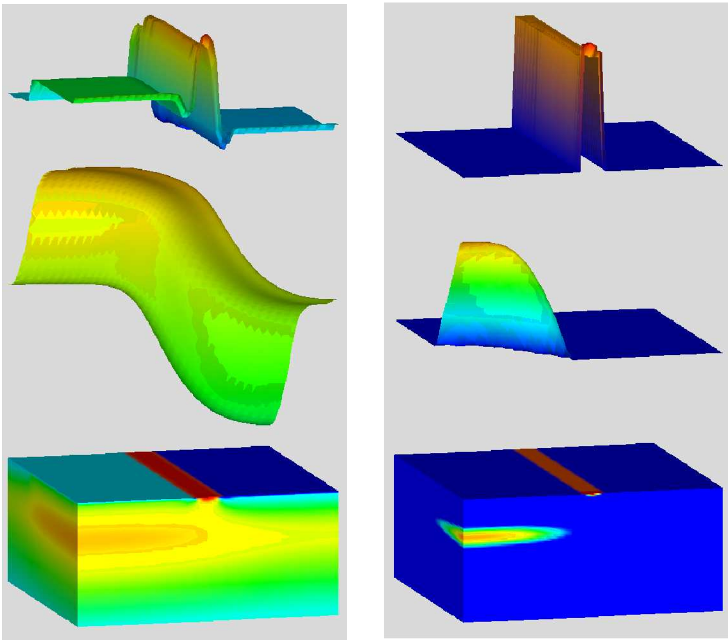


Abb. 1: 3D-Simulation einer pn-CCD-Schieberegisterzelle mit Schnitten in der Tiefe (12 μm und 300 nm); links: elektrisches Potential, rechts: Elektronendichte.

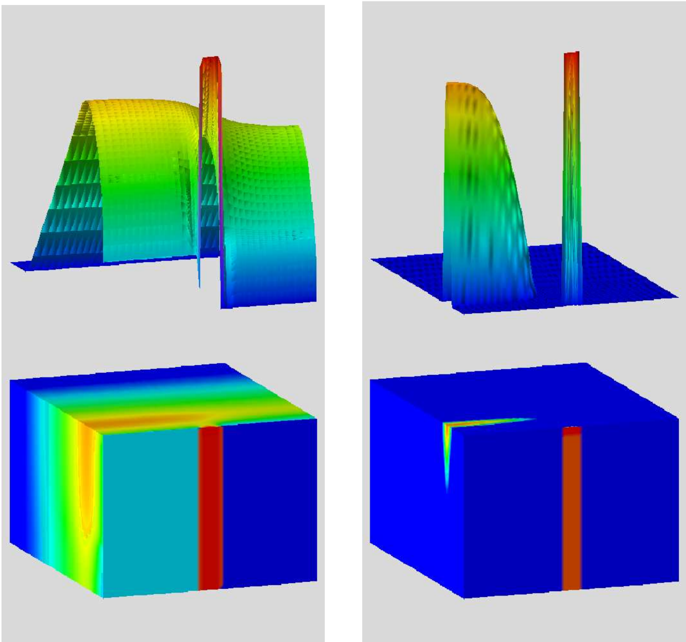


Abb. 2: 3D-Simulation einer pn-CCD-Schieberegisterzelle mit Längsschnitt in der Mitte des Transferbereichs; links: elektrisches Potential, rechts: Elektronendichte.

Literatur

1. J. Fuhrmann, T. 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 (W. Hackbusch, G. Wittum, Hrsg.), Notes on Numerical Fluid Mechanics, Vieweg Verlag.

2. J. Fuhrmann, H. Langmach, *gltools*, http://www.wias-berlin.de/~gltools.

3. H. Gajewski, *Analysis und Numerik von Ladungstransport in Halbleitern*, GAMM-Mitteilungen, **16** (1993), pp. 35–59.

4. H. Gajewski, K. Gärtner, *On the discretization of van Roosbroeck's equations with magnetic field*, Z. Angew. Math. Mech., **76** (1996), pp. 247–264.

5. E. Gamma, R. Helm, R. Johnson, J. Vlissides, *Design patterns, elements of reusable object-oriented software*, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1995.

6. R. Ierusalimscy, L. H. de Figueiredo, W. Celes, *Lua — An extensible extension language*, Software: Practice & Experience, **26** (1996), pp. 635–652.

7. L. Strüder, J. Kemmer, *Neuartige Röntgendetektoren für die Astrophysik*, Physikalische Blätter, **52** (1996), pp. 21–26.

Optimale Steuerung der Sublimationszüchtung von SiC-Kristallen

Bearbeiter: 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 so genannte *Lely-Methode* als die Erfolg versprechendste 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 ein Keim, bestehend aus einem dünnen SiC-Einkristall. Durch Sublimation wächst dieser im Gasgemisch

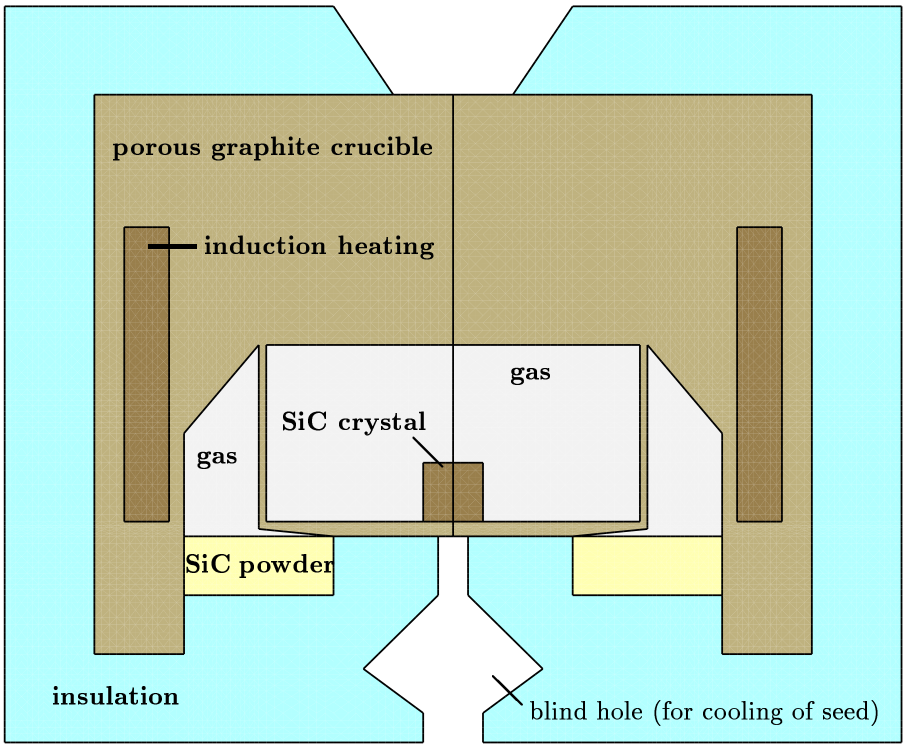


Abb. 1: Schematische Versuchsanordnung

in den Tiegel hinein. In der Literatur finden sich unterschiedliche Züchtungskonfigurationen. Abgesehen von der in Abb. 1 dargestellten Geometrie, in welcher sich das Quellpulver und der Keim in verschiedenen, durch eine poröse Graphitwand getrennten, Kammern befinden, werden auch Aufbauten betrachtet, in denen sich Quelle und Keim in derselben Kammer befinden.

Aufgrund der hohen Temperaturen wird Graphit als Tiegelmaterial benutzt. Da dieser porös ist, erfolgt ein ständiger Gasaustausch zwischen der Reaktionskammer und den umgebenden Wänden. 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. Das Gasgemisch besteht hauptsächlich aus den Komponenten Ar (Inertgas), Si, Si_2C und SiC_2. Die innere Struktur des Reaktors ändert sich im Laufe der Zeit ständig, 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.
Ziel ist es, den komplexen Züchtungsprozess mathematisch zu modellieren und numerisch zu simulieren, um die Produktionsmethode zu verbessern, 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. Kontrollmöglichkeiten bezüglich einer Optimierung des Kristallwachstums bieten der innere Aufbau des Tiegels, der großen Einfluss auf die Temperaturverteilung hat, die Heizung des Tiegels und der Druck des Inertgases.
Die Modellierung des Gasgemisches basiert auf kontinuierlicher Mischungstheorie und berücksichtigt alle Erhaltungsgleichungen für die verschiedenen Gaskomponenten, inklusive der Reaktions-Diffusions-Gleichungen. Vervollständigt wird das Modell durch Energiebilanzgleichungen für die Festkörperkomponenten der Züchtungsapparatur sowie Übergangs-, Rand- und Anfangsbedingungen ([1]).
Im Berichtszeitraum wurde die Modellierung und Implementierung der Wärmeübertragung durch Strahlung auf kompliziertere Gebiete ausgedehnt. Aufgrund der hohen Züchtungstemperaturen ist eine genaue Modellierung der Strahlung wesentlich für eine realitätsnahe Simulation.
In Zusammenarbeit mit dem experimentellen Kooperationspartner, dem Institut für Kristallzüchtung, Berlin (IKZ), wurde die Zusammenstellung der Materialdaten fortgeführt.
Abb. 2 zeigt die quasistationären Endzustände zweier transienter numerischer Simulationen für die in Abb. 1 dargestellte Konfiguration. Im mit „induction heating“ bezeichneten Bereich wird konstant und gleichmäßig mit einer Leistung von 10 kW geheizt. Während im linken Bild der Abb. 2 die Wärmeübertragung durch Strahlung zwischen den Wänden von Gasgebieten berücksichtigt wird, ist das im rechten Bild nicht der Fall. Die Temperaturdifferenz zwischen benachbarten Isolinien in Abb. 2 beträgt 20 K. Die minimale Temperatur $T_{\min}$ befindet sich auf der Außenseite der Isolationsschicht, während sich die maximale Temperatur $T_{\max}$ innerhalb des Heizungsbereiches befindet. Bei einem Vergleich der beiden Darstellungen in Abb. 2 bestätigt sich die physikalische Erwartung, dass bei den hohen Temperaturen unter Züchtungsbedingungen der Wärmetransport durch Strahlung in den Hohlräumen dominiert. Seine Vernachlässigung ergibt unphysikalisch hohe Temperaturgradienten und verfälscht den Betrag der Temperatur an einigen Stellen um mehrere hundert Kelvin.
In der derzeitigen Entwicklungsstufe stellt das Simulationsprogramm ein effektives Werkzeug dar, mit dessen Hilfe sich die zeitliche Entwicklung der Temperaturverteilung in der Züchtungsapparatur in guter Übereinstimmung mit physikalischen Experimenten berechnen lässt. Es ist damit möglich, im „Trial-and-Error-Verfahren“ verschiedene Züchtungskonfigurationen auszutesten und auf Temperaturverteilungen hin zu optimieren, die für den Züchtungsprozess vorteilhaft sind.

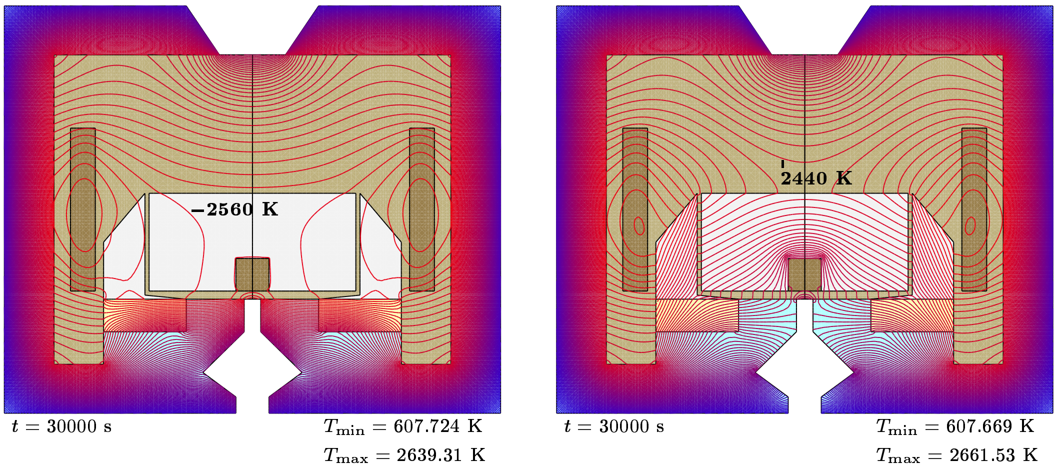


Abb. 2: Quasistationäre Temperaturverteilungen, links mit und rechts ohne Berücksichtigung der Strahlung.

Literatur

1. N. BUBNER, O. KLEIN, P. PHILIP, J. SPREKELS, K. WILMAŃSKI, *A transient model for the sublimation growth of silicon carbide single crystals*, J. Crystal Growth, **205** (1999), pp. 294–304.

Dynamische Systeme mit komplexer Verhaltensstruktur: Kolmogorov-Entropie und unendlich-dimensionale Attraktoren

Bearbeiter: M. Efendiev (FG 2), P. Krejčí (FG 1), J. Fuhrmann (FG 3)

Kooperation: S. Zelik (Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau, Russland), V. V. Chepyzhov (IITP, Moskau, Russland), A. Miranville (Universität Poitiers, Frankreich), H. Berestycki (Universität Paris VI, Frankreich), A. Mielke (Universität Stuttgart), E. Feireisl (Universität Prag, Tschechische Republik), I. Witt (Universität Potsdam)

Gegenstand der Untersuchungen sind Reaktions-Diffusions-Systeme (RDS) der Gestalt

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + f(u, \nabla u, t). \tag{1}$$

Autonome RDS können in beschränkten Gebieten nur Attraktoren mit endlicher fraktaler Dimension besitzen. Im Gegensatz dazu kann bei nichtautonomen RDS in beschränkten Gebieten ein Attraktor mit unendlicher Dimension auftreten, was auf einen „äußeren“ dynamischen Effekt zurückzuführen ist. Für autonome RDS in unbeschränkten Gebieten wurden Bedingungen abgeleitet, die als „innere“ dynamische Effekte bezeichnet werden, so dass ein Attraktor mit unendlicher Dimension existiert. Um auch unter diesen Bedingungen Aussagen zur Dynamik zu ermöglichen, wurde die Kolmogorov-Entropie herangezogen. Es wurde gezeigt, dass aus gewissen Eigenschaften dieser Entropie auf räumlich-chaotisches Verhalten geschlossen werden kann ([1], [2]).
Es wurden Bedingungen über die Nichtlinearität f abgeleitet, so dass (1) für $x \in R^N$ einen exponentiellen Attraktor mit endlicher fraktaler Dimension im zugehörigen Phasenraum (Hilbertraum) besitzt. Die Bedeutung dieser Attraktoren liegt darin, dass sie eine Reduktion der Dimension des Zustandsraumes ermöglichen, was insbesondere für die Modellierung chemischer Prozesse von großem Nutzen ist ([3]).
Mit Hilfe der Kolmogorov-Entropie wurden exponentielle Attraktoren für bestimmte Klassen autonomer RDS in unbeschränkten Gebieten $\Omega \subset R^N$ konstruiert, ohne eine Hilbert-Struktur des Phasenraums (die so genannte *squeezing property*) zu benötigen. Dieser Zugang erlaubt uns, Lösungen mit „unendlicher“ Energie (*travelling waves*) zu betrachten ([1]).
Für quasiperiodisch angeregte RDS (einschließlich der zweidimensionalen Navier-Stokes-Gleichungen) wurden gleichmäßige (bezüglich der anregenden Frequenzen) Attraktoren konstruiert und deren Dimension durch die Reynolds-Zahl und die Anzahl der Frequenzen abgeschätzt. Bisher ist offen, ob die dabei auftretenden „subordinierten“ Terme weggelassen werden können ([4]).

Literatur

1. M. A. EFENDIEV, S. ZELIK, *Upper and lower bounds for the Kolmogorov entropy of the attractor for an RDE in an unbounded domain*, Preprint 42/99, Schwerpunktprogramm der DFG „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“, eingereicht.

2. ——, *The attractor for a nonlinear reaction-diffusion system in an unbounded domain*, WIAS-Preprint No. 505, 1999, eingereicht.

3. M. A. EFENDIEV, A. MIRANVILLE, *Finite dimensional attractors for RDE in R^n with strong nonlinearity*, Discrete and Continuous Dynamical Systems, **15** (1999), No. 2, pp. 399–424.

4. M. A. EFENDIEV, V. V. CHEPYZHOV, *Hausdorff dimension estimation for attractors of nonautonomous dynamical systems in unbounded domains: An example*, erscheint in: Comm. Pure Appl. Math.

KPLIB: Toolbox zur Berechnung elektronischer Zustände und der zugehörigen Impulsmatrixelemente in geschichteten Halbleiter-Heterostrukturen — Anwendung auf Laser mit verspannten Multi-Quantum-Wells

Bearbeiter: U. Bandelow (FG 1), H.-Chr. Kaiser (FG 1), Th. Koprucki (FG 3), J. Rehberg (FG 1)

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

Förderung: BMBF

Physikalisches Modell. Die $k \cdot p$-Methode in der Enveloppenfunktionsapproximation ist ein etabliertes Modell zur Berechnung quantenmechanischer Zustände in nanostrukturierten Halbleiter-Heterostrukturen in der Nähe der Bandkanten, z. B. Quantum-Wells. Die Methode ist unabhängig von der Anzahl der Atome und macht nur von gewissen Bandstrukturdaten der beteiligten Volumenmaterialien Gebrauch. Darüber hinaus gestattet die $k \cdot p$-Methode die Berechnung der Impulsmatrixelemente der Inter- und Intrabandübergänge, mit denen optoelektronische Eigenschaften des Materials, z. B. der optische Gewinn oder der Brechungsindex, berechnet werden können.

Quantum-Wells sind Halbleiter-Heterostrukturen, die aus einer Abfolge ebener Schichten unterschiedlicher Materialien bestehen. Mit der $k \cdot p$-Methode werden die Enveloppen der quantenmechanischen Wellenfunktionen als Eigenfunktionen von räumlich eindimensionalen matrixwertigen $k \cdot p$-Schrödinger-Operatoren berechnet. Letztere hängen parametrisch vom reduzierten Wellenvektor $\vec{k}_{\|}$ ab. Die Subbandstruktur in Quantum-Wells ist durch die Eigenwertkurven $E(\vec{k}_{\|})$ gegeben.

Mathematische Analyse. In der Literatur sind im Wesentlichen zwei Zugänge zu $k \cdot p$-Schrödinger-Operatoren bekannt. Am weitesten verbreitet ist der so genannte *konventionelle* Zugang, bei dem $k \cdot p$-Schrödinger-Operatoren aus den Volumen-$k \cdot p$-Operatoren gewonnen werden, indem die Komponente k_z von $\vec{k}$ geeignet durch die Ableitung $-id/dz$ ersetzt wird. Die z-Richtung wird dabei als senkrecht zu den Schichtebenen der Quantum-Wells angenommen. Eine rigorose Theorie der Heterostrukturen nach Burt ([2]) führt in einem bestimmten Limes zu $k \cdot p$-Schrödinger-Operatoren von derselben formalen Struktur wie die *konventionellen*, siehe [3]. Für eine beide Zugänge umfassende Klasse von $k \cdot p$-Schrödinger-Operatoren wurde eine funktionalanalytische Untersuchung der Abhängigkeit der spektralen Eigenschaften vom Wellenvektor $\vec{k}_{\|}$ durchgeführt ([4]). Dabei konnten aus physikalischer Sicht interessante quantitative Abschätzungen über die Erhaltung einer bei $\vec{k}_{\|} = 0$ vorhandenen spektralen Lücke für endliche Werte von $\vec{k}_{\|}$ gewonnen werden.

KPLIB. Zur numerischen Handhabung der $k \cdot p$-Schrödinger-Operatoren wurde die Toolbox *kplib* entwickelt, die auf *pdelib*-Komponenten (siehe S. 58) basiert. *kplib* ist ein objektorientierter Code, geschrieben in ANSI-C, der *Template Methods* ([5]) zur Diskretisierung von $k \cdot p$-Schrödinger-Operatoren zur Verfügung stellt. Dieser Ansatz ermöglicht es, mit einer großen Fülle von $k \cdot p$-Schrödinger-Operatoren aus der Literatur unter Benutzung verschiedener Diskretisierungsschemata umzugehen.

Die $k \cdot p$-Schrödinger-Operatoren werden durch Objekte der Klasse `kpHamiltonOperator` repräsentiert. Ein solcher Operator wird dabei als Matrix aufgefasst, die sich aus skalaren Operatoren zusammensetzt. Die für einen konkreten $k \cdot p$-Schrödinger-Operator spezifischen Eigenschaften wie Dimension der Matrix, Form und Art der skalaren Komponenten und deren Diskretisierungsschema werden dabei nicht fest vorgegeben, sondern erst durch austauschbare *Plug-ins* für das jeweilige Modell festgelegt. Basierend auf diesen *Plug-ins* stellen die Objekte der Klasse `kpHamiltonOperator` *Template Methods* ([5]) zur Diskretisierung der $k \cdot p$-Schrödinger-Operatoren, zur Lösung des resultierenden Matrix-Eigenwertproblems, zur Berechnung von Impulsmatrixelementen und Wahrscheinlichkeitsdichten bereit. Durch diesen Entwurf wird ein hohes Maß an Flexibilität hinsichtlich der Implementierung und Bewertung unterschiedlichster $k \cdot p$-Modelle und Diskretisierungen erreicht.

Bisher stehen drei Modelle als *Plug-ins* in *kplib* zur Verfügung: der 4×4-Valenzband-Operator nach Chuang ([1], Abschnitt 4.5.2.), ein einfacher Leitungsband-Operator und ein 8×8-Operator für gekoppelte Valenz-Leitungsbänder für Materialien mit Zinkblende-Struktur. Alle Modelle wurden mit einem durch die mathematische Analyse nahe gelegten, konsistenten Finite-Elemente-Ansatz ([4]) diskretisiert und schließen die Behandlung mechanisch verspannter Quantum-Wells ein.

Basierend auf *kplib* wurde ein Simulationswerkzeug zur Berechnung der Subbandstruktur von Quantum-Wells realisiert. Dieses erlaubt darüber hinaus die Berechnung des optischen Gewinns und des optischen Brechungsindex.

Anwendung. Die mit *kplib* erhaltenen Ergebnisse gehen bisher parametrisch in die Bauelementesimulation (siehe S. 18) ein. Dies sind zum einen die *Zustandsdichten* der in den Quantum-Wells lokalisierten Ladungsträger (gebundene Zustände). Zum anderen sind dies der zugehörige *optische Gewinn* und dessen Dispersion. Für eine konsistente Beschreibung der Interbandübergänge wird das 8×8-Modell für gekoppelte Leitungs- und Valenzbänder aus *kplib* verwendet, das insbesondere zu einer *nichtparabolischen* Leitungsbanddispersion führt.

Als Beispiel analysieren wir eine verspannte Multi-Quantum-Well-Struktur, die in langwelligen Indiumphosphit-basierten Halbleiterlasern am HHI Berlin (siehe S. 18) realisiert wurde. Die Quantum-Wells sind durch tensil verspannte Barrieren hinreichend entkoppelt, so dass im Folgenden stellvertretend ein einzelner Quantum-Well betrachtet wird. Der behandelte quarternäre Quantum-Well ist 7 nm dick und kompressiv verspannt; seine Subbanddispersion ist in Abb. 1 dargestellt. Im oberen Teil der Abbildung sind die untersten Leitungssubbänder dargestellt, die aufgrund der Symmetrie der Struktur zweifach entartet sind. Das zweite Subband ist energetisch hinreichend separiert, so dass wir uns im Folgenden nur auf Übergänge mit dem ersten Subband beziehen müssen. Die dargestellten Kurven beziehen sich auf die im Bild angegebenen Richtungen im $\vec{k}$-Raum und charakterisieren die Richtungsabhängigkeit der Energie (Warping). Analog dazu ist im unteren Teil der Abbildung die zugehörige Valenzsubbanddispersion dargestellt. Der Einfluss des Warpings ist hier deutlicher. Die kompressive Verspannung führt zu einer Aufhebung der Entartung zwischen schweren und leichten Löchern, wobei schwere Löcher energetisch bevorzugt werden. Das spiegelt sich in den Oszillatorstärken der Interbandübergänge vom untersten Leitungsband in die obersten drei Valenzbänder für verschiedene Polarisation (oben: TE, unten: TM) wider, siehe Abb. 2. Der Einfluss des Warpings ist auch hier deutlich am Hauptübergang zu erkennen (Unterschied zwischen der dicken und der dünnen Kurve). Aufgrund des geringen Überlapps zwischen den Wellenfunktionen des untersten Leitungsbandzustandes und dem ersten angeregten Zustand der schweren Löcher ist die Oszillatorstärke für diesen Übergang sehr klein. Das dritte Valenzsubband identifiziert sich durch die Dispersion der TM-Oszillatorstärken als leichtes Loch. Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die Winkelauflösung der Subbanddispersion für die Oszillatorstärken von Bedeutung ist.

Somit ergibt sich ein sehr unterschiedliches Verhalten des optischen Gewinns für die TE- und TM-Polarisation, wie in Abb. 3 dargestellt. Links liegt das Maximum der Verstärkung bei $1,5\ \mu m$, währenddessen rechts die TM-Polarisation das Maximum bei $1,4\ \mu m$ hat. Ursache dieses Offsets ist der Abstand von $60\ meV$ der leichten Löcher zum obersten schweren Loch. Daraus resultiert auch eine schwächere Besetzung dieses Zustandes, was sich in den unterschiedlichen Höhen der Maxima für TE und TM bei gleicher Ladungsträgerdichte widerspiegelt. Dementsprechend wird in dieser Struktur die TE-Polarisation bevorzugt verstärkt, was mit Messungen ([6]) übereinstimmt.

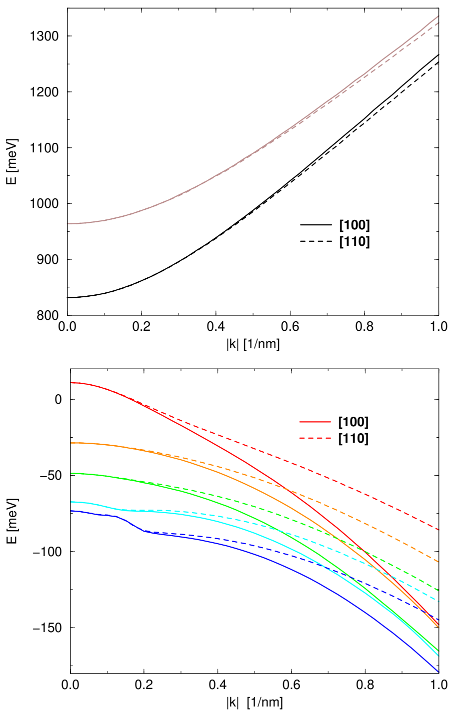


Abb. 1: Subbandstruktur für einen 7 nm dicken verspannten InGaAsP-Quantum-Well für jeweils $\vec{k}_\parallel = [100]$ und $\vec{k}_\parallel = [110]$-Richtung; oben: Leitungs-, unten: Valenzbänder.

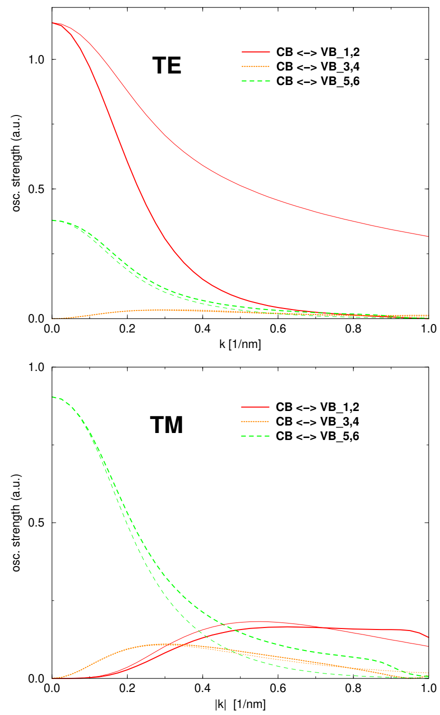


Abb. 2: Zugehörige Interbandoszillatorstärken für die Übergänge vom untersten Leitungsband in die obersten drei Valenzbänder für verschiedene Polarisationen; oben: TE-, unten: TM-Polarisation.

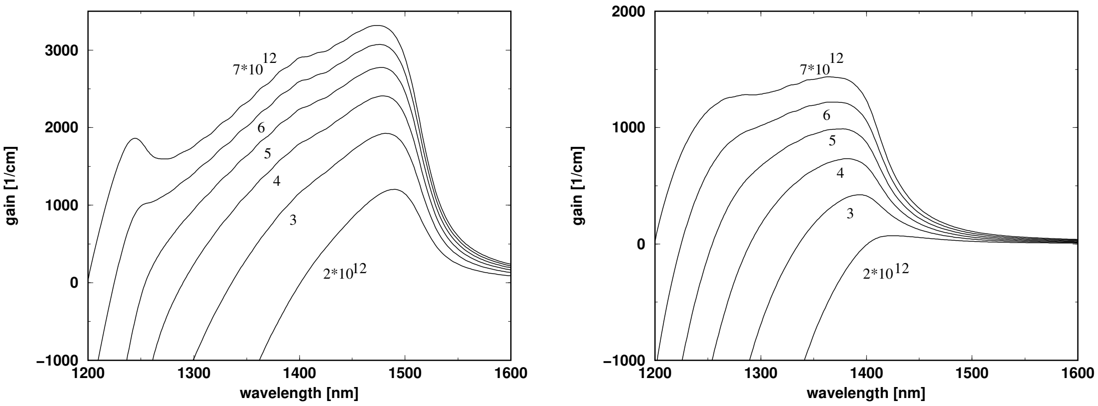


Abb. 3: Optischer Gewinn für sechs Flächenladungsdichten $(2, 3, \ldots, 7 \cdot 10^{12}/cm^2)$ für verschiedene Polarisationen; rechts: TE-, links: TM-Polarisation. Hinweis: in den Abbildungen ist der optische Gewinn unterschiedlich skaliert!

Literatur

1. S. L. CHUANG, *Physics of Optoelectronic Devices*, Wiley & Sons, 1995.

2. M. G. BURT, *The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures*, J. Phys. Condens. Matter, **4** (1992), pp. 6651–6690.

3. B. A. FOREMAN, *Effective-mass Hamiltonian and boundary conditions for the valence bands of semiconductor microstructures*, Phys. Rev. B, **48** (1995), pp. 4964–4967.

4. U. BANDELOW, H.-CHR. KAISER, TH. KOPRUCKI, J. REHBERG, *Spectral properties of $k \cdot p$ Schrödinger operators in one space dimension*, WIAS-Preprint No. 494, 1999, erscheint in: Numer. Funct. Anal. Optim.

5. E. GAMMA, R. HELM, R. JOHNSON, J. VLISSIDES, *Design patterns. Elements of reusable object-oriented software*, Addison Wesley Longman, Bonn, pp. 325–330.

6. U. BANDELOW, H. GAJEWSKI, H.-CHR. KAISER, *Modeling combined effects of carrier injection, photon dynamics and heating in strained multi quantum well lasers*, erscheint in: Proceedings of Physics and Simulation of Optoelectronic Devices VIII.

Dynamik thermokonvektiver Strömungen

Bearbeiter: J. Fuhrmann (FG 3), M. Efendiev (FG 2)

Kooperation: S. Zelik (Staatliche Universität Moskau, Russland)

Die dimensionslosen Gleichungen für den gekoppelten Massen- und Wärmetransport im porösen Medium haben in der Boussinesq-Approximation die folgende Form:

$$\begin{cases} \nabla_x \cdot v = 0; \quad v = \nabla_x P - \mu\gamma T; \quad P\big|_{\partial\Omega} = P_0, \\ \partial_t T - \nabla_x \cdot (\nabla_x T - Tv) = 0; \quad T\big|_{\partial\Omega} = T_0, \\ T\big|_{t=0} = T(0). \end{cases}$$

$(T(t,x),\ P(t,x))$ repräsentieren den Druck bzw. die Temperatur. $\gamma = (\gamma_1, \cdots, \gamma_n)$ ist ein gegebener konstanter Vektor ($|\gamma| = 1$) und $\mu > 0$ ist die Rayleigh-Zahl, welche aus charakteristischen physikalischen Parametern kombiniert wird.
Ein verbessertes Verständnis der Dynamik der Lösungen dieses Systems ist in vielen Anwendungen wichtig. Insbesondere soll die hier bearbeitete Fragestellung das Projekt (siehe S. 56) unterstützen.
Es wurde gezeigt, dass die von dem oben beschriebenen System erzeugte Halbgruppe einen globalen Attraktor in einem entsprechenden Sobolev-Raum besitzt, und es wurden untere und obere Schranken für die Hausdorff-Dimension des Attraktors gefunden. Insbesondere wächst die Hausdorff-Dimension mit zunehmender Rayleigh-Zahl.

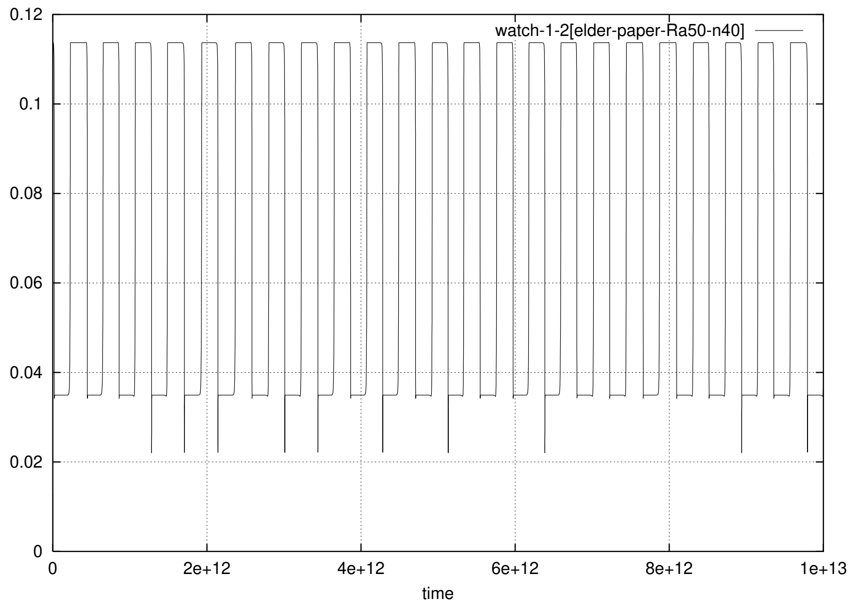


Abb. 1: Zeitlicher Verlauf der Temperatur im Mittelpunkt des Gebietes.

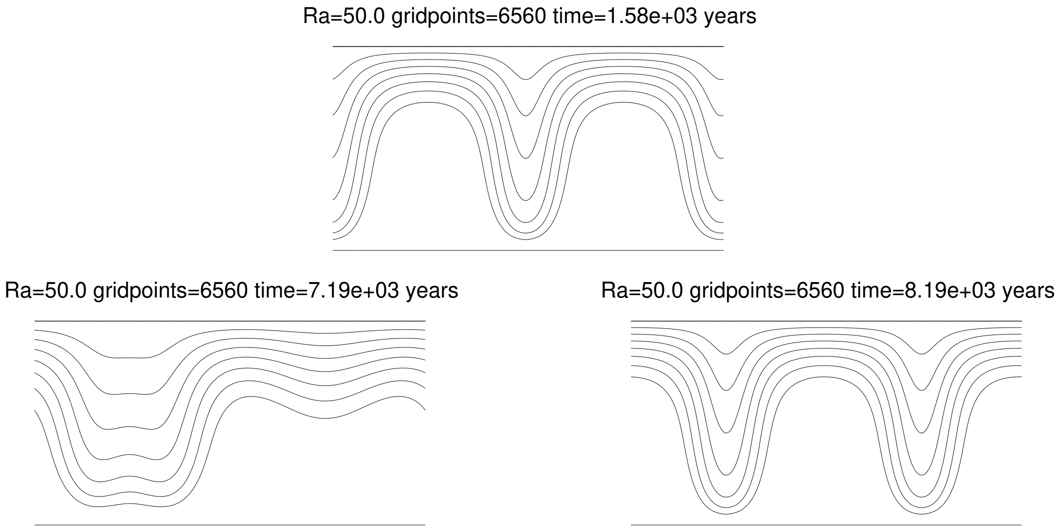


Abb. 2: Zeitlich periodische Lösung des Systems mit periodischen bzw. Dirichlet-Randbedingungen. Isotherme für die beiden abwechselnd eingenommenen Zustände (oben) sowie einen Zeitpunkt während der Transitionsphase (unten links).

Numerische Experimente, die unter Verwendung der *pdelib* (siehe S. 58) durchgeführt wurden, bestätigen diese Aussagen und werfen interessante Fragen für die weitere Arbeit auf, u. a. stellt sich die Frage nach der Existenz asymptotisch stabiler zeitlich periodischer Lösungen, die den Charakter von Relaxationsschwingungen besitzen, d. h. länger andauernde metastabile Zustände wechseln sich mit kurzen Übergangsphasen ab.

Literatur

1. M. EFENDIEV, J. FUHRMANN, S. V. ZELIK , *The long-time behaviour of the thermo-convective flow in a porous medium*, in Vorbereitung.

Zweidimensionale numerische Simulation des Stoff- und Energiehaushaltes von direkt mit Methanol betriebenen Brennstoffzellen (DMFC)

Bearbeiter: K. Gärtner (FG 7), J. Fuhrmann (FG 3)

Kooperation: J. Divisek (Forschungszentrum Jülich GmbH, IWV3, Energieverfahrenstechnik)

Förderung: BMBF/Forschungszentrum Jülich

Die DMFC ist ein Kandidat für in Kraftfahrzeugen einsetzbare Energiequellen. Die Einbeziehung des Wassertransportes (als Flüssigkeit und Dampf) mit Rückkopplung auf die Gasdiffusion (durch „direkte Konkurrenz", ebenfalls über die Temperatur und die die Wasserproduktion hervorrufende Elektrochemie) in einem homogenisierten Modell für ein Porensystem mit hydrophilen und hydrophoben Anteilen ist die wesentliche Erweiterung gegenüber dem heute erreichten Stand der Modellierung.
Die Realisierung erfolgt in *pdelib* (K. Gärtner in Zusammenarbeit mit J. Fuhrmann) — Schwerpunkt des Berichtszeitraumes war die Projekterschließung und die Bearbeitung von Teilproblemen.

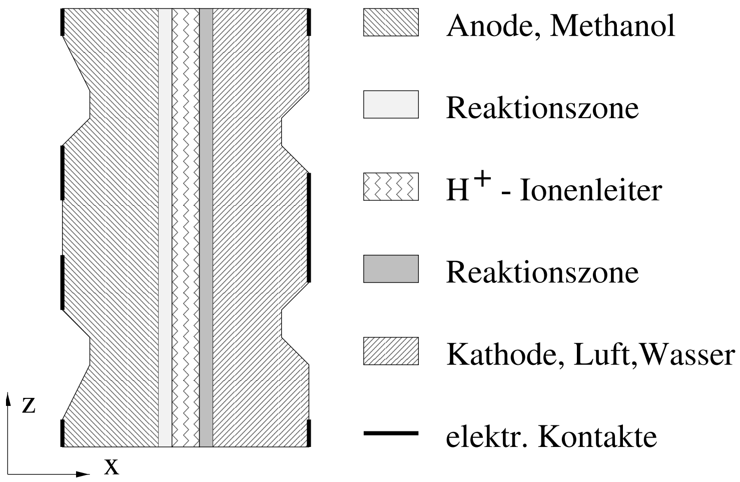


Abb. 1: Prinzipdarstellung DMFC, alle Schichten außer der Ionen leitenden Nafionmembran sind poröse, elektrisch leitende Medien. Die Ionenleitung ist an eine wässrige Umgebung gebunden.

Literatur

1. A. A. KULIKOVSKY, J. DIVISEK, A. A. KORNYSHEV, *Modelling the cathode compartment of polymer electrolyte fuel cells: Dead and active reaction zones*, eingereicht.

2. J. DIVISEK, J. MOSIG, B. STEFFEN, U. STIMMIG, *Proton exchange membrane fuel cell model*, in: Electrochemical Engineering and Energy (F. Lapicque, A. Stork, A. A. Wragg, (Hrsg.), Plenum Press, New York, 1995, pp. 187–196.

5 Wissenschaftlich-technische Dienste

5.1 Bibliothek

Zusammenfassung

Die Bibliothek ist eine wissenschaftliche Spezialbibliothek auf dem Gebiet der Angewandten Mathematik für die Mitarbeiter, Doktoranden und Gäste des Instituts und darüber hinaus in begrenztem Maße für eine regionale Fachöffentlichkeit (vorwiegend Kooperations- oder Projektpartner).

Das Literaturangebot orientiert sich sowohl an den wissenschaftlichen Zielsetzungen des Instituts als auch (besonders in der Phase der Modellbildung) an den jeweiligen Erfordernissen der projektorientierten Forschung.

Daher wird in Auswahl sowohl Literatur aus mathematischen Teildisziplinen (vorrangig Analysis, Stochastik, Numerik) und Grenzgebieten der Mathematik (überwiegend aus den Zweigen der Mathematischen Physik) als auch Literatur aus den hauptsächlichen Anwendungsfeldern Halbleiter, Nano- und Optoelektronik; Phasenübergänge; Stochastik in Finanzwirtschaft, Lebens- und Naturwissenschaften; Kontinuumsmechanik erworben oder aus fremden Beständen ermittelt und entliehen bzw. bereitgestellt.

Erwerbungsprobleme und Hinweis auf Folgen

Aufgrund der kontinuierlich bis sprunghaft sinkenden Finanzmittel (bei ebenso anhaltend steigenden Preisen) ist ein stetiges Absinken der Erwerbungszahlen zu verzeichnen.
Da die Erwerbungsmittel flächendeckend sinken (und nicht nur absolut, sondern relativ), wird auch die (regionale) Mitnutzung fremder Bestände (Literaturbesorgung) zunehmend erfolgloser werden. Sie wird auch kostenaufwendiger, ohne dass daraus für das Institut bzw. seine Bibliothek langfristig nachnutzungsfähiges Eigentum entsteht: Die Ermittlung eines ausleihfähigen Exemplars kostet mehr Zeit, die Lieferkosten für mehr Artikel und die Versandkosten im Leihverkehr steigen (u. a. in beiden Richtungen Einschreibsendung!).

Gerade bei der mathematischen Literatur mit ihrer langen „Halbwertzeit" stellen die aktuellen Erwerbungsmittel großenteils eine Investition in die Zukunft dar.
Bei der Literaturbesorgung hingegen entstehen Kosten zugunsten von Einwegmaterialien an die (großenteils nur befristet hier tätigen) Wissenschaftler.

- Bücher
  Zu den verschärften Erwerbungsgrundsätzen (Auswahlkriterien) bei Büchern zählen neben der primären thematischen Relevanz auch sekundäre Inhalts-Kriterien wie:
  Darstellung von (neuen) Methoden, insbesondere auch von Methodenvergleichen;
  Darstellungen mit Querschnittscharakter;
  mathematische oder numerische Methoden in den Anwendungsfeldern;
  spezifische Anwendungsproblem-Behandlungen;
  Monographien über aktuelle Forschungsrichtungen;
  Monographien zusammenfassenden Charakters: „State of the art"; Festschriften;
  sonstige bibliographisch reichhaltige Publikationen.

  Für die Zukunft kann man zwar erwarten, dass sich die Ermittlung *vorhandener* Buchtitel durch funktionierende Verbundsuche verbessern könnte. Dem steht dann allerdings das

Defizit nicht vorhandener Titel und eine zu hohe Anforderungsfrequenz auf zu geringe Exemplarzahlen der irgendwo vorhandenen Titel gegenüber.

- Zeitschriften
  Bei Zeitschriften sind 1999 nicht nur von uns (vgl. Statistische Angaben), sondern allgemein auch niedrigpreisige Zeitschriften abbestellt worden, um die jeweils geforderten Einsparsummen für das Jahr 2000 überhaupt erreichen zu können.

  Im Falle von drei großen Verlagen konnte das Institut als Mitglied im Friedrich-Althoff-Konsortium Berlin/Brandenburg insgesamt abonnierte oder alle elektronisch verfügbaren Zeitschriftenjahrgänge artikelweise online nutzen. Die Umstellung auf rein elektronische Lieferung (und ggf. Zukauf gedruckter Ausgaben) hat auch 1999 noch nicht stattgefunden, wird aber von den Verlagen unbedingt angestrebt.

  Die Konfliktsituation zwischen den Preisvorstellungen der Anbieter und den Erfordernissen der Wissenschaftler und den ihren Institutionen/Bibliotheken gegebenen finanziellen Möglichkeiten konnte bis jetzt nicht zufriedenstellend ausverhandelt werden. Eine Kostendämpfung für den eigenen Anteil am konsortialen Erwerb ist bisher nicht eingetreten.
  Wir sind daher konfrontiert mit der folgenden paradoxen Situation:
  Über den gemeinschaftlichen Erwerb im Konsortium und den „Cross Access“ gewinnt man ein zusätzliches Informationsangebot, das zu einem gewissen Teil sehr erwünscht, aber fachlich viel breiter als der Bedarf ist.
  Mittelkürzungen gehen daher zu Lasten des eigenen Erwerbs, so dass hier eine bedarfsgerechte Erwerbung nicht mehr gegeben ist, was zu aktuellen Informationsverlusten und jahrelangen Nachfolgekosten (Literaturbesorgung) führt.

Kooperationen/Mitgliedschaften der Bibliothek

- Seit 1992 bestehen Mitgliedschaften
  – in der Arbeitsgemeinschaft der Spezialbibliotheken (ASpB),
  – bei der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV) (Fachinformationsmitglied).

- Die Bibliothek ist seit 1992 Indirekt-Teilnehmer an der Zeitschriftendatenbank (ZDB) des ehemaligen Deutschen Bibliotheksinstituts (eDBI).

- 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.

- Seit 1999 ist das WIAS Institutionelles Mitglied der
  – American Mathematical Society (AMS), der
  – Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM) und des
  – Zbl.MATH-Konsortiums der DMV.
  Die (in Auswahl erworbenen) elektronischen Produkte und Publikationen der AMS und der SIAM bilden einen wichtigen Teil des Informations- bzw. Bibliotheksbestandes.
  Der Konsortialvertrag mit der DMV hat eine Laufzeit von fünf Jahren. Er schließt Preissteigerungen für die bestellten Produkte in dieser Zeit aus.

Mitarbeit im Friedrich-Althoff-Konsortium

Die Darstellung im Vorjahresbericht gilt fort. Der dort avisierte Vertrag mit dem Verlag Elsevier ist wirksam geworden (ScienceDirect). Neu hierbei ist:
Gegenüber den bisherigen Vertragsmodellen der Verlage Academic Press und Springer konnten hierin zwei „wissenschaftsfreundliche" Aspekte eingebracht werden: begrenzte Profilpflege (Abbestellung von Dubletten), limitiertes Artikel-Download auch aus nicht abonnierten Zeitschriften.

Intensive Bemühungen des FAK gehen in die Richtung, die verschiedenen konsortialen Aktivitäten in Deutschland zu bündeln, letztlich mit dem Ziel, den Zugang zur wissenschaftlichen Information durch landesweite Lizenzen zu sichern und zu vereinfachen.

Verhandlungen mit einer Reihe weiterer Verlage (Wiley wäre für uns interessant) wurden zwar seitens des FAK angestrengt, haben aber bisher nicht zu Verträgen geführt.

Gezielte Kontakte gelten vor allem Anbietern von Volltext-Diensten für elektronische Zeitschriften. Das FAK organisiert für die Konsorten und Interessenten Präsentationen und kurzfristige Test-Freischaltungen.

Test-Freischaltungen für Inhalts- bzw. Volltext-Dienste

Im Rahmen des FAK gab es 1999 im Mai die Möglichkeit, „SwetsNet" von Swets & Zeitlinger sowie im Dezember „Web of Science" und „Current Contents Connect" vom Institute of Scientific Information (ISI) online zu testen, unterschiedliche Dienste, die auf langjährig geführten Informationsdatenbanken basieren und durch ihre integrierende Wirkungsweise sehr gehaltvolle und benutzerfreundliche Instrumente darstellen.

An Beispielrecherchen aus Instituts-Arbeitsfeldern fanden wir bestätigt, welchen Gebrauchswert gerade für die anwenderprojekt-orientierte Forschung des WIAS auf verschiedenen außermathematischen Feldern, deren Prozesse ohne mathematische Technologie nicht mehr adäquat bearbeitet werden können, derartige disziplinübergreifende Dienste besitzen.
Bei dem Test von „Web of Science" war von besonderem Wert, dass Zugang zu allen Daten (zurück bis 1970) gewährt wurde. Bezahlbarer (?) Umfang (auch im Konsortium!) würde sich anfangs auf sehr kurze vergangene Zeitintervalle (max. fünf Jahre) beschränken müssen, was insbesondere die Möglichkeiten beim „Citation Search" einschränkt.

Statistische Angaben

- **Erwerbung**

  1999 wurden 149 Zeitschriften durch Kauf erworben, davon 139 Fachzeitschriften (136 in Fortsetzung, drei erstmalig) und zehn sonstige (Verwaltung, Bibliothek, Betriebsrat).

  Weitere elf Fachzeitschriften gingen der Bibliothek im Rahmen von Mitgliedschaften des Instituts in Fachgesellschaften (drei) bzw. als Geschenk (acht) zu, so dass im Berichtsjahr 160 lfd. Zeitschriften als Printexemplare gehalten werden konnten.

  Im Jahr 2000 werden von den 139 Fachzeitschriften **42 Titel**, die 1999 aus finanziellen Gründen fristgerecht vorsorglich abbestellt werden mussten (Einsparsumme rd. 50 TDM), nicht mehr im Hause zur Verfügung stehen. Nur für die Titel von AP, Elsevier und Springer ist durch den konsortialen „cross access" der online-Zugriff auf Artikel-Volltexte möglich.

Der Zugang an Bestandseinheiten betrug insgesamt rd. 2 720 Stück, und zwar: 381 Bücher (darunter 12 Medienkombinationen: 5 Buch/Disc; 7 Buch/CD); 50 Erg.–Lfgn. zu Loseblattwerken; 1 CD-ROM; 274 Zeitschriftenbände; 2 017 Preprints/Reports.
Aussonderungen wurden nicht vorgenommen.

Damit beläuft sich der Gesamtbestand auf rd. 68 130 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. 3 940 (Dauerleihen nicht einbezogen).

- **Literaturbeschaffung aus fremden Beständen**

  Für Institutsmitarbeiter wurden rd. 905 Beschaffungsvorgänge aus gedruckten Quellen überwiegend aus Berliner Bibliotheken (sonst in Fernleihe oder über Subito) erledigt. Das bedeutet gegenüber dem Vorjahr eine Steigerung um 345 Vorgänge (bzw. um 60 %).

  Als Zugangsweg für elektronische Zeitschriften wurde vorzugsweise der Direktzugang über Domain-IP angemeldet. Die Mitarbeiter des WIAS sind berechtigte Nutzer im Falle eigener Abonnements, der Abonnements des Friedrich-Althoff-Konsortiums (beim Zugang über die EZB bei der UB Regensburg unter Optionen dies als „Bibliothek“ einstellen) bzw. frei zugänglicher e-journals.
  Die so erlangten Einzelartikel (Download oder Ausdruck) werden vorwiegend direkt an den Wissenschaftler-Arbeitsplätzen gezogen, in der Statistik daher nicht berücksichtigt.

5.2 Fachinformation

Die primäre Aufgabe der Fachinformation besteht darin, für die Forschungsgruppen des Instituts die erforderliche (Fach-)Informationsversorgung stabil zu gewährleisten.
Dazu werden unterschiedliche Recherchemöglichkeiten in bibliographischen Informations-Datenbanken und in Volltext-Datenbanken für alle Mitarbeiter des WIAS angeboten:

- Im Vordergrund stehen die für die Mathematik wichtigsten Datenbanken „Zentralblatt MATH/Database“ und „MathSci“ (Mathematical Reviews).
- Zur Versorgung der anwenderprojektorientierten Forschung werden auch Zugangsmöglichkeiten zu natur- und ingenieurwissenschaftlichen Online-Datenbanken vorgehalten.
- Neben die bibliographischen Nachweis-Datenbanken treten zunehmend Volltext-Datenbanken im WWW, die mitunter (in ihren Anfangszeiten) noch frei zugänglich, meist aber lizenzpflichtig sind (Beispiel: Zeitschriftenartikel).

  Von der Fachinformation werden auf dem WIAS-Server in der Kollektion „Electronic journals“ Links zu den im WWW angebotenen elektronischen Versionen mathematischer Zeitschriften gesetzt (soweit diese für das WIAS relevant sind):
  `http://www.wias-berlin.de/services/fachinf/mathworld/ejournals`
- Zusätzlich werden Offline-Recherchemöglichkeiten (kostenpflichtige CD-ROM-Datenbanken) an speziellen Recherche-PCs (u. a. in der Bibliothek) angeboten.

Die Nutzungsmöglichkeiten sind aufgabenorientiert variabel gestaltet, z. B. ist die

- institutsoffene Nutzung von „Zbl. MATH“ über das WWW und von „MathSciNet“ (Math. Rev. on the Web) für alle Rechnerplattformen realisiert, so dass von jedem Arbeitsplatz zugegriffen werden kann (Dezentralisierung). Dagegen erfolgt die
- Durchführung von komplexeren Recherchen in den nichtmathematischen Datenbanken aus Kostengründen zentral durch den Fachinformationsbeauftragten. Den Nutzungsschwerpunkt bildet die Datenbank INSPEC des IEE über den Host STN/FIZ Karlsruhe.

Außer dem Datenbank-Retrieval gab es die folgenden regelmäßigen oder einmaligen Aktivitäten seitens der Fachinformation:

- Auf dem WIAS-Server werden die im Institut erstellten Preprints in den derzeit üblichen Formaten bereitgestellt:
  `http://www.wias-berlin.de/publications/preprints` .

  Ihre Abstracts (bibliographische Beschreibung plus Summary) werden metasprachlich mit dem Dublin Core indiziert. Damit wird erreicht, dass diese Web-Dokumente weltweit recherchierbar sind, z. B. mit MPRESS (**M**ath. **Pre**print **S**earch **S**ystem).
- Am Jahresende konnte das WIAS im Rahmen der Bemühungen des Friedrich-Althoff-Konsortiums Berlin/Brandenburg in einer kostenlosen vierwöchigen Freischaltung die neuen ISI-Datenbanken „The Web of Science“ (WoS) und „Current Contents Connect“ (CCC) testen (vgl. Ausführung im Punkt Bibliothek).

Institutsübergreifende Aktivitäten:

- Das WIAS ist Mitglied des Math-Net und dort mit einer standardisierten „Secondary Homepage" präsent: `http://www.wias-berlin.de/math-net`.

- Der Fachinformationsbeauftragte des WIAS arbeitet in der IuK-Kommission der Wissenschaftlichen Fachgesellschaften mit.

- Am Jahresbeginn 1999 war das WIAS Veranstaltungsort für den jährlichen Erfahrungsaustausch der Teilnehmerinstitute am BMBF-Drittmittelprojekt „Nutzung naturwissenschaftlich-technischer Datenbanken durch außeruniversitäre Forschungseinrichtungen in den neuen Bundesländern — NDF-Projekt" (1994 bis 1996) mit den Schwerpunkten „Neue Dienste der Informationsanbieter" und „Informationsvermittlung: State-of-the-art 1999".

  Die WIAS-Beiträge waren:

  – „Zur Situation der Informationsvermittlung in der Mathematik"
  (Th. Cierzynski),

  – „Wie entwickeln sich Zeitschriften-Angebot und -Nutzung im Konsortium?"
  (H. Rothkirch).

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. Außerdem betreuen sie die Klima- und Belüftungstechnik, die Multimediatechnik, die Telefonanlage des Institutes, und betreuen und organisieren die von externen Firmen durchgeführten Installationsarbeiten. 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 1998) :

- 63 (55) PC (14 x 80486, 49 x Pentium) mit MS-DOS und MS Windows,
- 57 (46) Compaq/DEC Alpha (15 x XP1000, 2 x 3000-300X, 5 x 3000-400, 6 x 3000-600, 1 x 3000-700, 1 x 3000-800, 2 x AlphaServer 1000 4/233, 1 x AlphaServer 4100 5/400, 3 x AlphaServer 800 5/400, 3 x 200 4/233, 2 x 255 4/232, 8 x AlphaStation 500/400, 2 x AlphaStation 500/500, 4 x PersonalWorkstation 433au, 2 x DS20) unter DEC UNIX bzw. Compaq True64 UNIX,
- 24 (23) Silicon Graphics (1 x Challenge DM, 1 x Challenge S, 3 x Indigo2 R4400, 12 x Indy R5000, 1 x O2 R10000, 2 x Octane R10000, 1 x Octane R12000, 1 x Onyx R4400, 1 x Origin 200, 1 x Origin 2000) unter IRIX,
- 2 (1) SUN (1 x SUN Enterprise 250, 1 x SUNserver 630) unter SunOS bzw. Solaris.

Neben dem Einsatz immer leistungsfähigerer Workstations und PCs bestimmten folgende Projekte die Entwicklung der Rechentechnik des WIAS im Jahr 1999:

1. ATM-Backbone

   Die Anschlussmöglichkeiten für Workstations mit Fast-Ethernet wurden durch den Tausch von Access-Switches ES 3850 gegen ES 2810 wesentlich erweitert. Dadurch konnten alle neuen Workstations mit Fast-Ethernet-Anschlüssen versorgt werden.

2. WWW-Server

   Nach längerer Vorbereitungszeit wurde der durch eine externe Firma neu entworfene WWW-Server in Betrieb genommen. Dieser zeichnet sich durch eine besser gestaltete Oberfläche und bessere Möglichkeiten der Pflege einzelner Teile durch zuständige Mitarbeiter aus. Dadurch wird erreicht, dass das wissenschaftliche Leben des Instituts besser auf dem WWW-Server wiedergegeben wird. Außerdem wurde jedem Mitarbeiter ein Bereich zur eigenverantwortlichen Gestaltung eingerichtet.

3. File-Server

   Die Kapazität des Fileservers wurde durch Einsatz eines neuen RAID-Arrays (Compaq RA8000) um ca. 360 GByte auf ca. 540 GByte erhöht. Das Backup-System wurde als Cluster-Service installiert, so dass sich die Verfügbarkeit weiter erhöht hat.

4. X-Terminal-Server, LAN-Management

   Die bisher genutzte und inzwischen veraltete HP 9000/715 wurde durch ein modernes leistungsfähiges System SUN Enterprise 250 ersetzt. Dieses wird hauptsächlich für das noch zu installierende Netzwerkmanagementsystem HP OpenView/HP Netmetrix/ForeView genutzt werden. Außerdem arbeitet diese Maschine als Boot-Server für ca. 45 HP-XTerminals.

5. NT-Server

   Durch die Installation eines leistungsfähigen Servers mit Windows NT, Microsoft Terminalserver und Citrix Metaframe wurde für alle Mitarbeiter die Möglichkeit geschaffen, Windows-Software an ihrem Arbeitsplatz zu nutzen. Durch dieses System werden wesentlich Lizenzkosten gespart und die Pflegbarkeit der Windows-Software verbessert.

6. Software

   Im Jahre 1999 wurden folgende größere Softwarepakete beschafft und installiert:

   - das Simulationssystem ANSYS,
   - das CAD-System AutoCAD 2000,
   - die numerische Bibliothek Harwell Subroutine Library und
   - das Multiprozessor-Debugging-System TotalView.

6 Publikationen, wissenschaftliches Leben

6.1 Veröffentlichungen

Monographien

P. DRÁBEK, P. KREJČÍ, P. TAKÁČ, *Nonlinear Differential Equations*, Chapman & Hall/CRC Res. Notes Math., **404**, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL [u. a.], 1999, 196 S.

K. HUTTER, K. WILMAŃSKI (HRSG.), *Kinetic and Continuum Theories of Granular and Porous Media*, CISM Courses and Lectures, **400**, Springer, Wien [u. a.], 1999, 308 S.

Aufsätze in referierten Fachzeitschriften

B. ALBERS, K. WILMAŃSKI, *An axisymmetric steady-state flow through a poroelastic medium under large deformations*, Arch. Appl. Mech., **69** (1999), No. 2, pp. 121–132.

N. BERGLUND, H. KUNZ, *Memory effects and scaling laws in slowly driven systems*, J. Phys. A, **32** (1999), pp. 15–19.

A. BOHÉ, *The shock location for a class of sensitive boundary value problems*, Math. Anal. Appl., **235** (1999), No. 1, pp. 295–314.

J. BORCHARDT, F. GRUND, D. HORN, *Parallelized methods for large nonlinear and linear systems in the dynamic simulation of industrial applications*, Surveys Math. Indust., **8** (1999), No. 3/4, pp. 201–211.

J. BORCHARDT, K. EHRHARDT, F. GRUND, D. HORN, *Divide and conquer strategies in large scale dynamic process simulation*, Computat. Chem. Engrg., **23** (1999), Suppl., pp. 335–338.

A. BOVIER, *Sharp upper bounds on perfect retrieval in the Hopfield model*, J. Appl. Probab., **36** (1999), pp. 941–950.

A. BOVIER, A. C. D. VAN ENTER, B. NIEDERHAUSER, *Stochastic symmetry-breaking in a Gaussian Hopfield model*, J. Statist. Phys., **95** (1999), No. 1/2, pp. 181–213.

G. BRUCKNER, *On the regularization of a linear operator equation with uncertain operator*, Z. Angew. Math. Mech., **79** (1999), Suppl. 3, pp. S857–S858.

N. BUBNER, O. KLEIN, P. PHILIP, J. SPREKELS, K. WILMAŃSKI, *A transient model for the sublimation growth of silicon carbide single crystals*, J. Crystal Growth, **205** (1999), pp. 294–304.

W. DREYER, F. DUDERSTADT, D. HÖMBERG, *Finite-Element-Simulation des Kondensator-Impuls-Schweißens*, Technische Mechanik, **19** (1999), No. 4, pp. 331–340.

W. DREYER, M. KUNIK, *Initial and boundary value problems of hyperbolic heat conduction*, Contin. Mech. Thermodyn., **11** (1999), No. 4, pp. 227–245.

W. DREYER, W. H. MÜLLER, J. OLSCHEWSKI, *An approximate analytical 2D solution for the stresses and strains in eigenstrained cubic materials*, Acta Mech., **136** (1999), No. 3/4, pp. 171–192.

H. BEGEHR, M. A. EFENDIEV, *On the asymptotics of meromorphic solutions for nonlinear Riemann-Hilbert problems*, Math. Proc. Cambridge Philos. Soc., **127** (1999), No. 1, pp. 159–172.

M. A. EFENDIEV, A. MIRANVILLE, *Finite dimensional attractors for RDE in R^n with strong nonlinearity*, Discrete and Continuous Dynamical Systems, **15** (1999), No. 2, pp. 399–424.

M. A. EFENDIEV, H. SCHMITZ, W. L. WENDLAND, *On some nonlinear potential problems*, Electron. J. Differential Equations, **1999** (1999), No. 18, 17 S.

K. EHRHARDT, H. G. KARGE, R. SCHUMACHER, *Determination of diffusion coefficients from sorption kinetic measurements considering the influence of nonideal gas expansion*, Langmuir, **15** (1999), No. 11, pp. 3965–3971.

J. ELSCHNER, O. HANSEN, *A collocation method for the solution of the first boundary value problem of elasticity in a polygonal domain in $\mathbb{R}^2$*, J. Integral Equations Appl., **11** (1999), No. 2, pp. 141–196.

——, *Ein Kollokationsverfahren zur numerischen Lösung der Lamé–Gleichung in ebenen polygonalen Gebieten*, Z. Angew. Math. Mech., **79** (1999), Suppl. 3, pp. S891–S892.

K. FLEISCHMANN, A. KLENKE, *Smooth density field of catalytic super-Brownian motion*, Ann. Appl. Probab., **9** (1999), No. 2, pp. 298–318.

K. FLEISCHMANN, V. A. VATUTIN, *Reduced subcritical Galton-Watson processes in a random environment*, Adv. Appl. Probab., **31** (1999), No. 1, pp. 88–111.

J. FUHRMANN, D. HÖMBERG, *Numerical simulation of surface heat treatments*, Internat. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow, **9** (1999), pp. 705–724.

J. FUHRMANN, D. HÖMBERG, M. UHLE, *Numerical simulation of induction hardening of steel*, COMPEL, **18** (1999), No. 3, pp. 482–493.

B. GENTZ, M. LÖWE, *The fluctuations of the overlap in the Hopfield model with finitely many patterns at the critical temperature*, Probab. Theory Related Fields, **115** (1999), No. 3, pp. 357–381.

——, *Fluctuations in the Hopfield model at the critical temperature*, Markov Processes Rel. Fields, **5** (1999), No. 4, pp. 423–449.

J. A. GRIEPENTROG, *An application of the implicit function theorem to an energy model of the semiconductor theory*, Z. Angew. Math. Mech., **79** (1999), No. 1, pp. 43–51.

G. HEBERMEHL, R. SCHLUNDT, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *Improved numerical methods for the simulation of microwave circuits*, Surveys Math. Indust., **9** (1999), No. 2, pp. 117–129.

C. ANDERSSON, R. HENRION, *A new general algorithmic approach for obtaining simple-structure N-way core arrays with an application to a 3-way data array from fluorometry*, Comput. Statist. Data Anal., **31** (1999), pp. 255–278.

R. HENRION, C. ANDERSSON, *A new criterion for simple-structure transformations of core arrays in N-way PCA*, Chemometrics and Intellig. Lab. Syst., **47** (1999), pp. 189–204.

R. HENRION, W. RÖMISCH, *Metric regularity and quantitative stability in stochastic programs with probabilistic constraints*, Math. Programming, **84** (1999), No. 1, pp. 55–88.

V. ARNĂUTU, D. HÖMBERG, J. SOKOŁOWSKI, *Convergence results for a nonlinear parabolic control problem*, Numer. Funct. Anal. Optim., **20** (1999), No. 9/10, pp. 805–824.

F. JOCHMANN, *Regularity of weak solutions of Maxwell's equations with mixed boundary conditions*, Math. Methods Appl. Sci., **22** (1999), No. 14, pp. 1255–1274.

——, *Asymptotic behaviour of solutions of Maxwell's equations in exterior domains*, Asymptotic Analysis, **21** (1999), No. 3/4, pp. 331–363.

——, *A H^s regularity result for the gradient of solutions to elliptic equations with mixed boundary conditions*, J. Math. Anal. Appl., **238** (1999), No. 2, pp. 429–450.

H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, *About a one-dimensional stationary Schrödinger-Poisson system with Kohn-Sham potential*, Z. Angew. Math. Phys., **50** (1999), No. 3, pp. 423–458.

O. KLEIN, *A class of time discrete schemes for a phase-field system of Penrose-Fife type*, Math. Model. Num. Anal., **33** (1999) No. 6, pp. 1261–1292.

M. KRAFT, H. FEY, *Some analytic solutions for stochastic reactor models based on the joint composition PDF*, Combust. Theory Modelling, **3** (1999), No. 2, pp. 343–358.

J. FRANCŮ, P. KREJČÍ, *Homogenization of scalar wave equations with hysteresis*, Contin. Mech. Thermodyn., **11** (1999), pp. 371–391.

C. KÜLSKE, *Non Gibbsianness and phase transitions in random lattice spin models*, Mark. Processes Rel. Fields, **5** (1999), No. 4, pp. 357–383.

——, *The continuous spin random field model: Ferromagnetic ordering in $d \geq 3$*, Rev. Math. Phys., **11** (1999), No. 10, pp. 1269–1314.

P. CHOSSAT, F. GUYARD, R. LAUTERBACH, *Generalized heteroclinic cycles in spherically invariant systems and their perturbations*, J. Nonlinear Sci., **9** (1999), No. 5, pp. 479–524.

P. MATHÉ, *Approximation of Hölder continuous functions by Bernstein polynomials*, Amer. Math. Monthly, **106** (1999), No. 6, pp. 568–574.

——, *Numerical integration using Markov chains*, Monte Carlo Meth. Appl., **5** (1999), No. 4, pp. 325–343.

A. KOROSTELEV, M. NUSSBAUM, *The asymptotic minimax constant for sup-norm loss in nonparametric density estimation*, Bernoulli, **5** (1999), No. 6, pp. 1099–1118.

O. BUNKE, B. DROGE, J. POLZEHL, *Model selection, transformations and variance estimation in nonlinear regression*, Statistics, **33** (1999), pp. 197–240.

F. IVANAUSKAS, M. RADZIUNAS, *On convergence and stability of the explicit difference method for solution of nonlinear Schrödinger equations*, SIAM J. Numer. Anal., **36** (1999), pp. 1466–1481.

A. RATHSFELD, *Edge asymptotics for the radiosity equation over polyhedral boundaries*, Math. Meth. Appl. Sci., **22** (1999), No. 3, pp. 217–241.

A. KOLODKO, K. SABELFELD, W. WAGNER, *A stochastic method for solving Smoluchowski's coagulation equation*, Math. Comput. Simulation, **49** (1999), No. 1/2, pp. 57–79.

O. KURBANMURADOV, U. RANNIK, K. SABELFELD, T. VESALA, *Direct and adjoint Monte Carlo algorithms for the footprint problem*, Monte Carlo Meth. Appl., **5** (1999), No. 2, pp. 85–112.

T. IVANOV, V. MAZYA, G. SCHMIDT, *Boundary layer approximations and cubature of potentials in domains*, Adv. Comput. Math., **10** (1999) No. 3/4, pp. 311–342.

V. MAZYA, G. SCHMIDT, *Approximate wavelets and the approximation of pseudodifferential operators*, Applied and Computational Harmonic Analysis, **6** (1999), No. 3, pp. 287–313.

G. SCHMIDT, B. N. KHOROMSKIJ, *Boundary integral equations for the biharmonic Dirichlet problem on nonsmooth domains*, J. Integral Equations Appl., **11** (1999), No. 2, pp. 217–253.

V. F. BUTUZOV, N. N. NEFEDOV, K. R. SCHNEIDER, *Singularly perturbed boundary value problems in case of exchange of stabilities*, J. Math. Anal. Appl., **229** (1999), No. 2, pp. 543–562.

——, *Singularly perturbed boundary value problems for systems of Tichonov's type in case of exchange of stabilities*, J. Differential Equations, **159** (1999), No. 2, pp. 427–446.

N. NEFEDOV, K. R. SCHNEIDER, *Immediate exchange of stabilities in singularly perturbed systems*, Differential Integral Equations, **12** (1999), No. 4, pp. 583–599.

L. RECKE, K. R. SCHNEIDER, V. V. STRYGIN, *Spectral properties of coupled wave operators*, Z. Angew. Math. Phys., **50** (1999), No. 6, pp. 925–933.

K. R. SCHNEIDER, S. I. KOSTADINOV, G. T. STAMOV, *Integral manifolds of impulsive differential equations defined on torus*, Proc. Japan Acad. Ser. A: Math. Sci., **75** (1999), No. 4, pp. 53-57.

J. SCHOENMAKERS, P. E. KLOEDEN, *Robust option replication for a Black-Scholes model extended with nondeterministic trends*, J. Appl. Math. Stochastic Anal., **12** (1999), No. 2, pp. 113–120.

V. SCHULZ, A. BARDOSSY, R. HELMIG, *Conditional statistical inverse modeling in groundwater flow by multigrid methods*, Computational Geosciences, **3** (1999), pp. 49–68.

Y. A. KUTOYANTS, V. SPOKOINY, *Optimal choice of observation window for Poisson observations*, Statist. Probab. Lett., **44** (1999), No. 3, pp. 291–298.

O. LEPSKI, V. SPOKOINY, *Minimax nonparametric hypothesis testing: The case of an inhomogeneous alternative*, Bernoulli, **5** (1999), No. 2, pp. 333–358.

O. LEPSKI, A. NEMIROWSKI, V. SPOKOINY, *On estimation of the L_r norm of a regression function*, Probab. Theory Related Fields, **113** (1999), No. 2, pp. 221–253.

R. LIPTSER, V. SPOKOINY, *Moderate deviation type evaluation for integral functionals of diffusion processes*, Electronic J. of Probability, **4** (1999), No. 17, pp. 1–25.

P. COLLI, J. SPREKELS, *Global solution to the Penrose-Fife phase-field model with zero interfacial energy and Fourier law*, Adv. Math. Sci. Appl., **9** (1999), No. 1, pp. 383–391.

P. COLLI, M. GRASSELLI, J. SPREKELS, *Automatic control via thermostats of a hyperbolic Stefan problem with memory*, Appl. Math. Optim., **39** (1999), No. 2, pp. 229–255.

K. N. SOLTANOV, J. SPREKELS, *Nonlinear equations in non-reflexive Banach spaces and strongly nonlinear differential equations*, Adv. Math. Sci. Appl., **9** (1999), No. 2, pp. 939–972.

J. SPREKELS, D. TIBA, *A duality approach in the optimization of beams and plates*, SIAM J. Control Optim., **37** (1999), No. 2, pp. 486–501.

V. ROM-KEDAR, D. TURAEV, *Big islands in dispersing billiard-like potentials*, Physica D, **130** (1999), No. 3/4, pp. 187–210.

M. V. SHASHKOV, D. V. TURAEV, *An existence theorem of smooth nonlocal center manifolds for systems close to a system with a homoclinic loop*, J. Nonlinear Sci., **9** (1999), No. 5, pp. 525–573.

Beiträge in Sammelwerken

B. ALBERS, K. WILMAŃSKI, *On a stationary axisymmetric filtration problem under large deformations of the skeleton*, in: Trends in Applications of Mathematics to Mechanics (G. Iooss, O. Guès, A. Nouri, Hrsg.), Monographs and Surveys in Pure and Applied Mathematics, **106**, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL [u. a.], 1999, pp. 47–57.

G. ALBINUS, *Remarks on the convex analysis of the energy model of semiconductor devices*, in: High Performance Scientific and Engineering Computing (H.-J. Bungartz, F. Durst, Ch. Zenger, Hrsg.), Lecture Notes in Computational Science and Engineering, **8**, Springer, Berlin [u. a.], 1999, pp. 375–385.

U. BANDELOW, H.-CH. KAISER, TH. KOPRUCKI, J. REHBERG, *A finite-element approach to the eigen-value problem arising from kp-Hamilton operators for quantum wells*, in: Proceedings of 11th III-V Semiconductor Device Simulation Workshop, IEMN, University of Lille, France, 1999, Section 4, 9 Seiten.

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 (InGa)N quantum wells*, in: Proceedings of the ICPS24 (D. Gershoni, Hrsg.), Art. IXB29 (1344.pdf), Jerusalem, 1998.

N. BERGLUND, K. R. SCHNEIDER, *Control of dynamic bifurcations*, in: Stability and Stabilization of Nonlinear Systems (D. Aeyels et al., Hrsg.), Lecture Notes in Control and Inform. Sci., **246**, Springer, London [u. a.], 1999, pp. 75–93.

J. BORCHARDT, K. EHRHARDT, F. GRUND, D. HORN, *Parallel modular dynamic process simulation*, in: Scientific Computing in Chemical Engineering II (F. Keil, W. Mackens, H. Voss, J. Werther, Hrsg.), [Part 2:] Simulation, image processing, optimization, and control, Springer, Berlin [u. a.], 1999, pp. 152–159.

H. J. ALBRECHT, W. DREYER, T. HAUCK, J. JENDRY, W. H. MÜLLER, R. TILGNER, *Modelling the lifetime of microelectronic components: A challenge for material science and computational engineering*, in: Materials Mechanics/ Fracture Mechanics/ Micro Mechanics (Fraunhofer IZM, Hrsg.), Fraunhofer IZM, Berlin, 1999, pp. 69–82.

W. DREYER, M. KUNIK, *Hyperbolic heat conduction*, in: Trends in Applications of Mathematics to Mechanics (G. Iooss, O. Guès, A. Nouri, Hrsg.), Monographs and Surveys in Pure and Applied Mathematics, **106**, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL [u. a.], 1999, pp. 127–137.

M. A. EFENDIEV, A. SCHEEL, *Upper and lower bounds for the Hausdorff dimension of the attractor for RDE in* R^n, Proceedings of RIMS (M. Otani, Hrsg.), Kyoto, Japan, 1999, pp. 81–90.

M. A. EFENDIEV, A. SCHUPPERT, *Stability analysis of chemical reactors*, in: Scientific Computing in Chemical Engineering II (F. Keil, W. Mackens, H. Voss, J. Werther, Hrsg.), [Part 2:] Simulation, image processing, optimization, and control, Springer, Berlin [u. a.], 1999, pp. 225–230.

J. ELSCHNER, *The work of Vladimir Maz'ya on integral and pseudodifferential operators*, in: The Maz'ya Anniversary Collection, Vol. 1 (J. Rossmann, P. Takác, G. Wildenhain, Hrsg.), Oper. Theory: Adv. Appl., **109**, Birkhäuser, Basel, 1999, pp. 35–52.

J. ELSCHNER, R. HINDER, F. PENZEL, G. SCHMIDT, *Efficient calculations of Rayleigh coefficients for the conical diffraction by gratings*, European Optical Society Topical Meetings Digest Series, **22** (1999), pp. 91–92.

K. GÄRTNER, O. SCHENK, W. FICHTNER, *Parallel multigrid methods for the continuity equations in semiconductor device simulation*, in: High Performance Scientific and Engineering Computing (H.-J. Bungartz, F. Durst C. Zenger, Hrsg.), Lecture Notes in Computational Science and Engineering, **8**, Springer, Berlin [u. a.], 1999, pp. 325–342.

O. SCHENK, K. GÄRTNER, W. FICHTNER , *Scalable parallel sparse factorization with left-right looking strategy on shared memory multiprocessors*, in: High Performance Computing and Networking (P. Sloot, M. Bubak, A. Hoeckstra, B. Hertzberger, Hrsg.), Lecture Notes in Comput. Sci., **1593**, Springer, Berlin [u. a.], 1999, pp. 221–230.

——, *Application of parallel sparse direct methods in semiconductor device and process simulation*, in: High Performance Computing (C. Polychronopoulos, K. Joe, A. Fukuda, S. Tomita, Hrsg.), Lecture Notes in Comput. Sci., **1615**, Springer, Berlin [u. a.], 1999, pp. 206–219.

O. SCHENK, K. GÄRTNER, B. SCHMIDTHÜSEN, W. FICHTNER, *Numerical semiconductor device and process simulation on shared memory multiprocessors: Algorithms, architectures, results*, in: Parallel Numerical Computations with Applications (T. Yang, Hrsg.), The Kluwer International Series in Engineering and Computer Science, **515**, Kluwer Acad. Publ., Boston, 1999, pp. 141–158.

F. GRUND, *Direct linear solver for vector and parallel computers*, in: Vector and Parallel Processing — VECPAR'98 (J. M. L. M. Palma, J. Dongarra, V. Hernandez, Hrsg.), Lecture Notes in Comput. Sci., **1573**, Springer [u. a.], Berlin – Heidelberg, 1999, pp. 114–127.

G. HEBERMEHL, R. SCHLUNDT, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *The eigen mode problem for microwave transmission lines with absorbing boundary conditions*, in: Book of Abstracts, Jahrestagung der Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik, Metz, Frankreich, April 12 – 16, 1999 (M. Berveiller, A. Louis, Hrsg.), Walter de Gruyter, Berlin, 1999, pp. 67–68.

——, *Simulation of microwave integrated circuits and multi-chip modules*, in: Book of Abstracts, The Fourth International Congress on Industrial and Applied Mathematics, Edinburgh, Scotland, 5-9 July 1999, Edinburgh Press, 1999, p. 268.

R. HÜNLICH, A. GLITZKY, *On energy estimates for electro-diffusion equations arising in semiconductor technology*, in: Partial differential equations – Theory and numerical solutions (W. Jäger, J. Nečas, O. John, K. Najzar, J. Stará, Hrsg.), Chapman & Hall/CRC Res. Notes Math., **406**, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL [u. a.], 2000, pp. 158–174 (erschienen 1999).

O. KLEIN, *A phase-field system with space-dependent relaxation coefficient*, in: Free Boundary Problems: Theory and Applications, (I. Athanasopoulus, G. Makrakis, J. F. Rodrigues, Hrsg.), Chapman & Hall/CRC Res. Notes Math., **409**, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL [u. a.], 1999, pp. 327–334.

M. KRAFT, M. BALTHASAR, F. MAUSS, *Soot and NOx formation in a stationary turbulent combustor*, in: Scientific Computing in Chemical Engineering II (F. Keil, W. Mackens, H. Voss, J. Werther, Hrsg.), [Part 2:] Simulation, image processing, optimization, and control, Springer, Berlin [u. a.], 1999, pp. 118–125.

P. KREJČÍ, J. SPREKELS, *Strong solutions to equations of visco-thermo-plasticity with a temperature-dependent hysteretic strain-stress law*, in: Variations of Domains and Free-Boundary Problems in Solid Mechanics (P. Argoul, M. Frémond, Q. S. Nguyen, Hrsg.), Solid Mechanics and Its Applications, **66**, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, 1999, pp. 237–244.

——, *Hysteresis operators in phase-field models*, in: Topics in Nonlinear Analysis: The Herbert Amann Anniversary Volume (J. Escher, G. Simonett, Hrsg.), Progress in Nonlinear Differential Equations and Their Applications, **35**, Birkhäuser, Basel, 1999, pp. 499–515.

F. GUYARD, R. LAUTERBACH, *Forced symmetry breaking: Theory and applications*, in: Pattern formation in continuous and coupled systems, Minneapolis, MN, 1998 (M. Golubitsky et. al., Hrsg.), IMA Vol. Math. Appl., **115**, Springer, New York [u. a.], 1999, pp. 121–135.

R. GOLLMER, A. MÖLLER, H. P. NOVAK, W. RÖMISCH, R. SCHULTZ, *Primal and dual methods for unit commitment in a hydro-thermal power system*, in: Proceedings 13th Power System Computation Conference, **2**, Trondheim, Norwegen, 1999, pp. 724–730.

M. NUSSBAUM, *Minimax risk, Pinsker bound*, in: Encyclopedia of Statistical Sciences (S. Kotz, Hrsg.), Update Volume, Wiley, New York, 1999, pp. 451–460.

M. RADZIUNAS, H.-J. WÜNSCHE, B. SARTORIUS, H.-P. NOLTING, K. SCHNEIDER, O. BROX, D. HOFFMANN, *Modeling of new grating designs for self-pulsating DFB lasers*, in: Integrated Photonics Research, OSA Technical Digest, Optical Society of America, Washington DC, 1999, pp. 358–360.

A. RATHSFELD, *On the stability of piecewise linear wavelet collocation and the solution of the double layer equation over polygonal curves*, in: Boundary Integral Methods, Numerical and Mathematical Aspects (M. Golberg, Hrsg.), Series Computational Engineering, **1**, WIT Press, Computational Mechanics Publications, Boston, Southampton, 1999, pp. 177–215.

T. IVANOV, V. MAZ'YA, G. SCHMIDT, *Boundary layer approximate approximations for the cubature of potentials*, in: Mathematical Aspects of Boundary Element Methods (M. Bonnet, A.-M. Sändig, W. L. Wendland, Hrsg.), Chapman & Hall/CRC Res. Notes Math., **414**, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL [u. a.], 2000, pp. 165–177 (erschienen 1999).

V. MAZ'YA, G. SCHMIDT, *Construction of basis functions for high order approximate approximations*, in: Mathematical Aspects of Boundary Element Methods (M. Bonnet, A.-M. Sändig, W. L. Wendland, Hrsg.), Chapman & Hall/CRC Res. Notes Math., **414**, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL [u. a.], 2000, pp. 191–202 (erschienen 1999).

G. SCHMIDT, *Approximate approximations and their applications*, in: The Maz'ya Anniversary Collection, Vol. 1 (J. Rossmann, P. Takác, G. Wildenhain, Hrsg.), Oper. Theory: Adv. Appl., **109**, Birkhäuser, Basel, 1999, pp. 111–136.

V. SCHULZ, O. DEUTSCHMANN, *Process optimization of reactive systems modeled by elementary reactions*, in: Scientific Computing in Chemical Engineering II (F. Keil, W. Mackens, H. Voss, J. Werther, Hrsg.), [Part 2:] Simulation, image processing, optimization, and control, Springer, Berlin [u. a.], 1999, pp. 354–361.

V. SCHULZ, *Direct discretization methods for optimization boundary value problems in DAE*, in: Mathematical Theory of Networks and Systems (A. Beghi, L. Finesso, G. Picci, Hrsg.), Il Poligrafo, Padua, 1999, pp. 669–672.

——, *Incomplete indefinite decompositions as multigrid smoothers for KKT systems*, in: Optimal control of partial differential equations (K.-H. Hoffmann et al., Hrsg.), Internat. Ser. Numer. Math., **133**, Birkhäuser, Basel, 1999, pp. 258–266.

P. COLLI, P. LAURENÇOT, J. SPREKELS, *Global solution to the Penrose-Fife phase field model with special heat flux laws*, in: Variations of Domains and Free-Boundary Problems in Solid Mechanics (P. Argoul, M. Frémond, Q. S. Nguyen, Hrsg.), Solid Mechanics and Its Applications, **66**, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, 1999, pp. 181–188.

J. SPREKELS, D. TIBA, *On the approximation and optimization of fourth order elliptic systems*, in: Optimal control of partial differential equations (K.-H. Hoffmann et al., Hrsg.), Internat. Ser. Numer. Math., **133**, Birkhäuser, Basel, 1999, pp. 277–286.

J. SPREKELS, S. ZHENG, *On the asymptotic behaviour of a Landau-Ginzburg model for the martensitic phase transitions in shape memory alloys*, in: Topics in Nonlinear Analysis: The Herbert Amann Anniversary Volume (J. Escher, G. Simonett, Hrsg.), Progress in Nonlinear Differential Equations and Their Applications, **35**, Birkhäuser, Basel, 1999, pp. 673–689.

W. WAGNER, S. RJASANOW, *Study of time counter effects in the DSMC method for rarefied gases*, in: Rarefied Gas Dynamics II (R. Brun, R. Campargue, R. Gatignol, J.-C. Lengrand, Hrsg.), Cépaduès-Éditions, Toulouse, 1999, pp. 31–38.

K. WILMAŃSKI, *Towards an extended thermodynamics of porous and granular materials*, in: Trends in Applications of Mathematics to Mechanics (G. Iooss, O. Guès, A. Nouri, Hrsg.), Monographs and Surveys in Pure and Applied Mathematics, **106**, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL [u. a.], 1999, pp. 147–160.

——, *Waves in porous and granular materials*, in: Kinetic and Continuum Theories of Granular and Porous Media (K. Hutter, K. Wilmański, Hrsg.), CISM Courses and Lectures, **400**, Springer, Wien [u. a.], 1999, pp. 131–185.

6.2 Preprints, Reports

6.2.1 WIAS-Preprint-Serie

Preprints 1999[1]

[468] Said Benachour, Philippe Laurençot: Very singular solutions to a nonlinear parabolic equation with absorption. I – Existence.

[469] Peter Mathé, Sergei V. Pereverzev: Optimal discretization and Degrees of ill-posedness for inverse estimation in Hilbert scales in the presence of random noise.

[470] Gunther Schmidt: Approximate approximations and their applications.

[471] Robert Liptser, Vladimir Spokoiny: Deviation probability bound for martingales with applications to statistical estimation.

[472] Vladimir Spokoiny: Data-driven testing the fit of linear models.

[473] Andreas Eibeck, Wolfgang Wagner: An efficient stochastic algorithm for studying coagulation dynamics and gelation phenomena.

[474] Adriana Bohé: The shock location for a class of sensitive boundary value problems.

[475] Krzysztof Wilmański: On a homogeneous adsorption in porous materials.

[476] Dietmar Hömberg, Aleksander M. Khludnev, Jan Sokołowski: On an equilibrium problem for a cracked body with electrothermoconductivity.

[477] Peter Mörters: The average density of super-Brownian motion.

[478] Peter Mörters: A uniform dimension result for the Brownian snake.

[479] Nils Berglund: Control of dynamic Hopf bifurcations.

[480] John Schoenmakers, Brian Coffey: LIBOR rate models, related derivatives and model calibration.

[481] Orazgeldy Kurbanmuradov, Karl Sabelfeld, John Schoenmakers: Lognormal random field approximations to LIBOR market models.

[482] Nikolaus Bubner, Werner Horn, Jan Sokołowski: Weak solutions to joined nonlinear systems of PDES.

[483] Orazgeldy Kurbanmuradov, Ullar Rannik, Karl Sabelfeld, Timo Vesala: Direct and adjoint Monte Carlo algorithms for the footprint problem.

[484] Christof Külske: (Non-) Gibbsianness and phase transitions in random lattice spin models.

[485] Ingo Müller, Krzysztof Wilmański: Elementary thermodynamic and stochastic arguments on non-Newtonian fluid.

[1] http://www.wias-berlin.de/WIAS_publ_preprints_1999

[486] János Engländer, Klaus Fleischmann: Extinction properties of super-Brownian motions with additional spatially dependent mass production.

[487] Anton Bovier, Véronique Gayrard: Sample path large deviations for a class of Markov chains related to disordered mean field models.

[488] Frank Jochmann: Regularity of solutions of Maxwell's equations with mixed boundary conditions.

[489] Wolfgang Dreyer, Matthias Kunik: Cold, thermal and oscillator closure of the atomic chain.

[490] Viorel Arnăutu, Dietmar Hömberg, Jan Sokołowski: Convergence results for a nonlinear parabolic control problem.

[491] János Engländer: On the volume of the supercritical super-Brownian sausage conditioned on survival.

[492] Bettina Albers: Coupling of adsorption and diffusion in porous and granular materials. A 1-D example of the boundary value problem.

[493] Klaus Zacharias: Some intriguing definite integrals.

[494] Uwe Bandelow, Hans-Christoph Kaiser, Thomas Koprucki, Joachim Rehberg: Spectral properties of $k \cdot p$ Schrödinger operators in one space dimension.

[495] Valentin F. Butuzov, Nikolai N. Nefedov, Klaus R. Schneider: Singularly perturbed reaction - diffusion systems in case of exchange of stabilities.

[496] Valentin F. Butuzov, Nikolai N. Nefedov, Klaus R. Schneider: Singularly perturbed elliptic problems in the case of exchange of stabilities.

[497] Gianni Gilardi, Pavel Krejčí, Jürgen Sprekels: Hysteresis in phase-field models with thermal memory.

[498] Konrad Gröger, Lutz Recke: Preduals of Campanato spaces and Sobolev-Campanato spaces: A general construction.

[499] Pavel Krejčí: Resonance in Preisach systems.

[500] Jan Franců, Pavel Krejčí: Homogenization of scalar wave equations with hysteresis.

[501] Klaus Fleischmann, Achim Klenke: Biodiversity of catalytic super-Brownian motion.

[502] Sergej Rjasanow, Wolfgang Wagner: Simulation of rare events by the stochastic weighted particle method for the Boltzmann equation.

[503] Vladimir Spokoiny: Variance estimation for high-dimensional regression models.

[504] Vladimir Spokoiny: Adaptive drift estimation for nonparametric diffusion model.

[505] Messoud Efendiev, Sergey Zelik: The attractor for a nonlinear reaction–diffusion system in an unbounded domain.

[506] Alexander Goldenshluger, Sergei V. Pereverzev: Adaptive estimation of linear functionals in Hilbert scales from indirect white noise observations.

[507] Grigori N. Milstein, Joannes G. M. Schoenmakers: Numerical construction of a hedging strategy against the multi-asset European claim.

[508] Grigori N. Milstein, Michael V. Tretyakov: Numerical solution of Dirichlet problems for nonlinear parabolic equations by probability approach.

[509] Michael Nussbaum, Sergei V. Pereverzev: The degree of ill-posedness in stochastic and deterministic noise models.

[510] Donald A. Dawson, Klaus Fleischmann: Catalytic and mutually catalytic branching.

[511] Jens André Griepentrog, Hans–Christoph Kaiser, Joachim Rehberg: Resolvent and heat kernel properties for second order elliptic differential operators with general boundary conditions on L^p.

[512] Andreas Rathsfeld: Quadrature methods for 2D and 3D problems.

[513] Inna Edelman, Krzysztof Wilmański, Evgeniy Radkevich: Surface waves at a free interface of a saturated porous medium.

[514] Yuri I. Ingster: Adaptive detection of high-dimensional signal.

[515] Frank Jochmann, Lutz Recke: Existence and uniqueness of weak solutions of an initial boundary value problem arising in laser dynamics.

[516] Mindaugas Radziunas, Hans-Jürgen Wünsche, Bernd Sartorius, Olaf Brox, Detlef Hoffmann, Klaus R. Schneider : Modeling of self-pulsating DFB lasers.

[517] Johannes Elschner, Ivan G. Graham: Numerical methods for integral equations of Mellin type.

[518] Anton Bovier, David M. Mason: Extreme value behavior in the Hopfield model.

[519] Jörg Polzehl, Vladimir G. Spokoiny: Vector adaptive weights smoothing with applications to MRI.

[520] Pavel Krejčí, Jürgen Sprekels, Songmu Zheng: Asymptotic behaviour for a phase-field system with hysteresis.

[521] Dietmar Hömberg, Jan Sokołowski: Optimal shape design of inductor coils for surface hardening.

[522] Alejandro L. Garcia, Wolfgang Wagner: Time step truncation error in direct simulation Monte Carlo.

[523] Gottfried Bruckner: On the regularization of the first kind integral equation with analytical kernel of logarithmic type.

[524] Sergej M. Ermakov, Wolfgang Wagner: Monte Carlo difference schemes for the wave equation.

[525] Pierluigi Colli, Michel Frémond, Olaf Klein: Global existence of a solution to a phase field model for supercooling.

[526] Herbert Gajewski, Klaus Gärtner: Domain separation by means of sign changing eigenfunctions of p-Laplacians, II.

[527] Herbert Gajewski, Igor V. Skrypnik: To the uniqueness problem for nonlinear elliptic equations.

[528] Klaus Fleischmann, Jie Xiong: A cyclically catalytic super-Brownian motion.

[529] Christof Külske: Weakly Gibbsian representations for joint measures of quenched lattice spin models.

[530] Bettina Albers: On adsorption and diffusion in porous media.

[531] Inna Edelman, Krzysztof Wilmański: Surface waves at an interface separating a saturated porous medium and a liquid.

[532] Sybille Handrock-Meyer, Klaus R. Schneider: Local state space reduction of multi-scale systems.

[533] Martin Petzoldt: A posteriori error estimators for elliptic equations with discontinuous diffusion coefficients.

[534] Pekka Neittaanmäki, Dan Tiba: Shape optimization in free boundary systems.

[535] Orazgeldy Kurbanmuradov, Karl Sabelfeld: Stochastic Lagrangian models for turbulent dispersion in atmospheric boundary layer.

[536] Anton Bovier, Miloš Zahradník: A simple inductive approach to the problem of convergence of cluster expansions of polymer models.

[537] Gisbert Stoyan: On inhomogeneous velocity boundary conditions in the Förste model of a radiating, viscous, heat conducting fluid.

[538] Johannes Elschner, Gunther Schmidt: Diffraction in periodic structures and optimal design of binary gratings. Part II: Gradient formulas for TM polarization.

[539] Nikolaus Bubner, Gail Mackin, Robert C. Rogers: Rate dependence of hysteresis in one-dimensional phase transitions.

[540] Wolfgang Dreyer, Wolfgang H. Müller: Modeling diffusional coarsening in eutectic tin/lead solders: A quantitative approach.

[541] Vasile Tronciu, Hans-Jürgen Wünsche, Jan Sieber, Klaus R. Schneider, Fritz Henneberger: On the dynamics of single mode lasers with passive dispersive reflector.

[542] Joel L. Horowitz, Vladimir G. Spokoiny: An adaptive, rate-optimal test of a parametric model against a nonparametric alternative.

[543] Georg Hebermehl, Friedrich-Karl Hübner, Rainer Schlundt, Thorsten Tischler, Horst Zscheile, Wolfgang Heinrich : On the computation of eigen modes for lossy microwave transmission lines including Perfectly Matched Layer boundary conditions.

[544] Raimund Bürger, Matthias Kunik: On boundary conditions for multidimensional sedimentation-consolidation processes in closed vessels.

6.2.2 WIAS-Report-Serie

Reports 1999[2]

[17] Henri Schurz: A Brief Introduction to Numerical Analysis of (Ordinary) Stochastic Differential Equations Without Tears.

[2] http://www.wias-berlin.de/WIAS_publ_reports#rep99

6.2.3 Preprints/Reports an anderen Einrichtungen

N. BERGLUND, K. R. SCHNEIDER, *Control of dynamic bifurcations*, Preprint No. 15/99, DFG-Schwerpunktprogramm: „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme", 1999.

C. BUTUCEA, M. NUSSBAUM, *Asymptotic equivalence of discretely observed geometric Brownian motion to a Gaussian shift*, Discussion paper SFB 373, No. 59, Humboldt-Universität zu Berlin, 1999.

P. COLLI, M. FRÉMOND, O. KLEIN, *Global existence of a solution to a phase field model for supercooling*, Preprint Nr. 1155, TAN/CNR, Istituto di Analisi Numerica del Consiglio Nazionale delle Richerche, Pavia, Italien, 1999

V. F. BUTUZOV, N. N. NEFEDOV, K. R. SCHNEIDER, *Singularly perturbed elliptic problems in case of exchange of stabilities*, Preprint No. 38/99, DFG-Schwerpunktprogramm: „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme", 1999.

L. DÜMBGEN, V. SPOKOINY, *Optimal nonparametric testing of qualitative hypotheses,* Discussion paper No. 99, SFB 373, Humboldt-Universität zu Berlin, 1999.

M. A. EFENDIEV, A. HOMBURG, W. L. WENDLAND, *The Borsuk-Ulam theorem for quasi-ruled Fredholm maps*, Preprint No. 99-3, Universität Stuttgart, Math. Inst. A, 1999.

M. A. EFENDIEV, W. L. WENDLAND, *Orientable and nonorientable Riemann-Hilbert problems*, Preprint No. 99-4, Universität Stuttgart, Math. Inst. A, 1999.

M. A. EFENDIEV, Z. ZELIK, *Upper and lower bounds for the Kolmogorov entropy of the attractor for an RDE in an unbounded domain*, Preprint No. 42/99, DFG-Schwerpunktprogramm: „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme", 1999.

B. GRUND, J. POLZEHL, *Semiparametric lack-of-fit tests in an additive hazard regression model,* Discussion paper SFB 373, No. 98, Humboldt-Universität zu Berlin, 1999.

J. HOROWITZ, V. SPOKOINY, *An adaptive, rate-optimal test of a parametric model against a nonparametric alternative,* Discussion paper No. 10, SFB 373, Humboldt-Universität zu Berlin, 1999.

S. JASCHKE, *Higher order forward rate agreements and the smoothness of the term structure,* Discussion paper SFB 373, No. 13, Humboldt-Universität zu Berlin, 1999.

S. JASCHKE, U. KÜCHLER, *Coherent risk measures, valuation bounds, and (μ,ρ)-portfolio optimization,* Discussion paper SFB 373, No. 64, Humboldt-Universität zu Berlin, 1999.

W. B. LIU, P. NEITTAANMÄKI, D. TIBA, *Existence for shape optimization problems in arbitrary dimension*, Preprint No. 208, Department of Mathematics, University of Jyväskylä, Finland, 1999.

R. LIPTSER, V. SPOKOINY, *Deviation probability bound for martingales with applications to statistical estimation,* Discussion paper No. 85, SFB 373, Humboldt-Universität zu Berlin, 1999.

W. MERZ, A. GLITZKY, R. HÜNLICH, K. PULVERER, *Strong solutions for pair diffusion models in homogeneous semiconductors*, Preprint SFB–438–9921, SFB 438: TU München, Univ. Augsburg, 1999.

V. SCHULZ, G. WITTUM, *Transforming smoothers for optimization saddlepoint problems*, Tech. Report Preprint No. 99–07, IWR, Universität Heidelberg, 1999.

V. SPOKOINY, *Variance estimation for high-dimensional regression models,* Discussion paper No. 86, SFB 373, Humboldt-Universität zu Berlin, 1999.

D. TIBA, *A property of Sobolev spaces and existence in optimal design*, Preprint No. 5, Institute of Mathematics, Romanian Academy, Bucharest, 1999.

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.

K. K. SABELFELD, Editor, *Monte Carlo Methods and Applications*, VSP, Zeist.

——, 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, *Eindimensionales Strömungsproblem mit Adsorption*, Thermodynamisches Seminar, Technische Universität Berlin, 20. Januar.

——, *On a continuum model of adsorption in porous materials*, International Congress of the American Society of Mechanical Engineering, Blacksburg, USA, 28. Juni.

——, *Randbedingungen und Grenzschichten in porösen Körpern*, Thermodynamisches Seminar, WIAS, Berlin, 21. Juli.

——, *Modelling of adsorption in porous and granular materials*, Workshop „Mathematical Problems in Suspension Flows“, Universität Stuttgart, 9. Oktober.

G. ALBINUS, *Zum Entwurf von Energiemodellen für Halbleiterbauelemente*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 10. November.

U. BANDELOW, *Transverse aspects in semiconductor lasers*, WIAS-Workshop „Dynamics of semiconductor lasers“, Berlin, 11. September.

——, *Modelling of quantum well lasers*, Forschungsseminar zu Halbleiterlasern, Humboldt-Universität zu Berlin, 11. November.

N. BERGLUND, *Control of dynamic Hopf bifurcations*, Universität Augsburg, 24. Februar.

——, *Control and stabilization of dynamic Hopf bifurcations*, Nonlinear Control Network Workshop „Stability and Stabilization“, Gent, Belgien, 15. März.

J. BORCHARDT, *Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen*, DAE-Workshop, Erlangen, 18. Februar.

——, *Parallel modular dynamic process simulation*, Scientific Computing in Chemical Engineering II, Technische Universität Hamburg-Harburg, 28. Mai.

——, *Blockstrukturierte Newtonverfahren zur parallelen Prozess-Simulation*, Bayer AG, Leverkusen, 16. Juni.

A. BOVIER, *Extreme value problems related to the Hopfield model*, 5th Workshop „Probability and its Applications“, Bielefeld, 16. Februar.

——, *Metastability in stochastic dynamics for disordered mean field models I, II*, Università di Roma II „Tor Vergata“, Italien, 19. und 22. Februar.

——, *Un problème de statistique d'ordre extrême relié au modèle de Hopfield*, Colloque de probabilités et de statistique, EPFL, Lausanne, Schweiz, 16. März.

——, *Probability around the Hopfield model*, Seminaire Ipathia, Lyon, Frankreich, 19. März.

——, *Results about the Hopfield model*, EURANDOM, Post-Doc Seminar, Eindhoven, Niederlande, 8. April.

——, *Some extreme value problems in the theory of disordered systems*, Mark-Kac-Seminar, Eindhoven, Niederlande, 16. April.

——, *Mathematics of strongly disordered systems: Some recent progress*, Jahrestagung des Niederländischen Landelijk Samenwerkingsverband Mathematische Fysica, Amersfort, Niederlande, 29. April.

——, *Metastabilité dans des modèles à champs moyen désordonnés*, Université Paris VII, Frankreich, 27. Juni.

——, *Extremalwertprobleme in ungeordneten Systemen*, Erlanger Stochastik Tag 99, Erlangen, 16. Juli.

——, *Stochastic dynamics of disordered systems*, Tagung „Random Systems“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 1. September.

——, *Extreme values theory and disordered systems* (3 Vorträge), 3rd Prague School on Phase Transitions, Prag, Tschechische Republik, 6. – 10. September.

——, *Stochastische Dynamik ungeordneter Spin-Systeme*, Universität Clausthal-Zellerfeld, 22. Oktober.

——, *Scharfe Asymptotik für Stochastische Mittelfelddynamiken*, WIAS-Kolloquium, Berlin, 29. November.

——, *Stochastische Dynamik ungeordneter Spin-Systeme*, SFB-Seminar, Institut für Physik, Humboldt-Universität zu Berlin, 21. Dezember.

G. BRUCKNER, *Tikhonov regularization for a first kind integral equation with analytic kernel*, 11th TMP International Conference on Recent Advances in Analytical and Numerical Treatment of Operator Equations in memory of Prof. Siegfried Prößdorf, Chemnitz, 28. März.

W. DREYER, *Decomposition in tin/lead solders*, Kolloquium Motorola GmbH, Geschäftsbereich Halbleiter, München, 19. März.

——, *Kalter, thermischer und Oszillatorabschluss der atomaren Kette – Von Newton zu hyperbolischen Feldgleichungssystemen*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“, WIAS, Berlin, 5. Mai.

——, *Geschichten über Temperatur, Energie und Entropie*, Universität Stuttgart, Institut für Theoretische Physik, 10. Mai.

——, *Mikro-Makro-Übergänge in Gasen und Festkörpern*, Universität Stuttgart, Institut für Mechanik, 11. Mai.

——, *Das Problem der ewigen Wiederkehr*, Berliner Tag der Mathematik, Freie Universität Berlin, 29. Mai.

——, *Trends in modelling of micro morphological changes in alloys*, Fourth International Conference on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 99), Edinburgh, Großbritannien, 6. September.

——, *The solution of initial and boundary value problems of phase field models by Fourier transform techniques and spectral theory*, Mechanik-Kolloquium der Heriot-Watt Universität, Edinburgh, Großbritannien, 30. August.

——, *Microscopic aspects of hysteresis*, WIAS-Workshop „Systems with Hysteresis", Berlin, 20. September.

——, *Microscopic aspects of the modelling of solid bodies*, International Workshop „Computational Mechanics", Berlin, 4. Oktober.

——, *Micro-macro transitions and the problem of irreversibility*, Workshop „Mathematical Problems in Suspension Flows", Universität Stuttgart, 9. Oktober.

——, *Microscopic aspects of phase field models of alloys*, International Conference Free Boundary Value Problems: Theory and Applications, Chiba, Japan, 8. November.

——, *Mathematica*, Workshop „Mathematica", WIAS, Berlin, 18. November.

——, *Molecular and continuum modeling of diffusional coarsening in eutectic tin/lead solders*, Workshop „Composite-Forschung in der Mechanik", Paderborn, 30. November.

——, *Kalter, thermischer und Oszillatorabschluss der atomaren Kette*, Thermodynamik-Seminar, Technische Universität Berlin, 3. November.

——, *Toward a rigorous microscopic derivation of phase field models*, Universität Pavia, Italien, 16. Dezember.

F. DUDERSTADT, *Finite-Element-Simulation des Kondensator-Impulsschweißens*, 3. Humboldt-Seminar, AK Stoffgesetze, Magdeburg, 26. März.

——, *Modeling and simulation of capacitor resistance welding*, 9th International Workshop „Computational Mechanics and Computer Aided Design of Materials", Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Berlin, 5. Oktober.

——, *Modellierung und Simulation des Kondensator-Impulsschweißens*, Werkstoff-Seminar, GKSS – Forschungszentrum Geesthacht GmbH, Geesthacht, 8. Oktober.

M. EFENDIEV, *On a lifted dynamics through exponential attractors*, Universität Florenz, Italien, 12. April.

——, *Comparison of dimension of inertial manifolds and exponential attractors for some class of evolution equations*, Universität Siena, Italien, 14. April.

——, *Orientable and nonorientable boundary value problems related to pseudo-differential operators*, Universität Stuttgart, 19. Juli.

——, *Sharp estimates of dimension of a global attractor in an unbounded domain for evolution equations of mathematical physics*, Universität Stuttgart, 27. Juli.

——, *Long time behavior of dynamical systems: New concepts*, Universität Rom, Italien, 12. November.

A. EIBECK, *Approximative solution of the coagulation-fragmentation equation by stochastic particle systems*, Seminar „Stochastische Algorithmen", WIAS, Berlin, 13. Januar.

——, *Coagulation models and gelation*, DMV-Seminar „Random Media", Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 18. November.

——, *Approximative solution of the coagulation equation and gelation phenomena*, Seminar „Stochastische Algorithmen“, WIAS, Berlin, 1. Dezember.

J. ELSCHNER, *On the conical diffraction problem for optical gratings*, 11th TMP International Conference on Recent Advances in Analytical and Numerical Treatment of Operator Equations in memory of Prof. Siegfried Prößdorf, Chemnitz, 26. März.

——, *Numerical analysis of diffraction by periodic structures and optimal design problems*, ENUMATH’99, Jyväskylä, Finnland, 27. Juli.

——, *Numerical analysis of diffraction problems in microoptics*, Computational Techniques and Applications Conference (CTAC’99), Canberra, Australien, 21. September.

——, *Diffraction in periodic structures and optimal design of binary gratings*, German-Australian Workshop in Numerical Analysis of Boundary Integral Methods and Applications, Sydney, Australien 27. September.

K. FLEISCHMANN, *Catalytic branching structures*, Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Physik, 26. Januar.

——, *Mutually catalytic super-Brownian motion in R^2*, Workshop on Interactive Measure-Valued Processes, The Fields Institute, Toronto, Kanada, 10. März.

——, *Catalytic branching structures*, Workshop on Stochastic Evolution Equations, Lissabon, Portugal, 17. Mai.

——, *Population models with catalysts*, University of Rochester, USA, 9. Juni.

——, *Catalytic and mutually catalytic super-Brownian motions*, Third Seminar on Stochastic Analysis, Random Fields and Applications, Ascona, Schweiz, 20. September.

——, *Catalytic and mutually catalytic branching*, Kolloquium, Mathematics Department, University of Tennessee, USA, 14. Oktober.

J. FUHRMANN, *Existence and stability results for finite volume discretizations of viscous nonlinear conservation laws with application to subsurface transport problems*, Fifth SIAM Conference on Mathematical and Computational Issues in the Geosciences, San Antonio, Texas, USA, 25. März.

——, *Finite volume discretizations of systems of viscous nonlinear conservation laws: Theoretical, experimental and implementation issues*, Texas A & M University, College Station, Texas, USA, 1. April.

——, *pdelib – eine offene modulare Toolbox für die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen*, Universität Potsdam, Institut für Klimafolgenforschung, 18. Mai.

——, *Finite-Volumen-Verfahren für Systeme viskoser Erhaltungsgleichungen mit Anwendungen auf dem Gebiet der porösen Medien*, Technische Universität Chemnitz, 28. Mai.

——, *Finite volume methods for systems of viscous conservation laws with applications to porous media flow*, Université Paris Sud, Orsay, Frankreich, 17. Juni.

——, *Finite volume methods for systems of viscous conservation laws with applications to porous media flow*, Centrum voor Wiskunde en Informatica, Amsterdam, Niederlande, 22. Juni.

——, *Existence and stability results for finite volume discretizations of nonlinear viscous conservation laws*, International Conference on Numerical Methods for Transport-Dominated and Related Problems (EPSICODE '99), Schloß Wendgräben, 23. September.

——, *Finite volume methods for nonlinear viscous conservation laws: Existence, uniqueness, and stability results for the discrete problem*, Université Louis Pasteur, Strasbourg, Frankreich, 5. Oktober.

——, *pdelib/sysconlaw: ein Löser für Systeme viskoser Erhaltungsgleichungen. Theoretische Aspekte, Schnittstellen und Verifizierung anhand von Zweiphasenströmungsproblemen*, Technische Universität Braunschweig, 26. Oktober.

H. GAJEWSKI, *Simulation und Entwicklung elektronischer Bauelemente*, Forschungspolitischer Dialog „Angewandte Mathematik – die verborgene Schlüsseltechnologie", Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, 30. April.

——, *Zur numerischen Simulation von Halbleiterbauelementen hoher Leistung*, Technische Universität München, Institut für Elektronik, 10. Juni.

——, *Mathematische und numerische Modellierung von Strom- und Wärmetransport bei hoher Trägerinjektion und hoher Leistung*, Berichtskolloquium im DFG-Schwerpunktprogramm „Halbleiterbauelemente hoher Leistung", München, 11. Oktober.

——, *Domain separation by means of sign changing eigenfunctions of p-Laplacians*, International Conference on Partial Differential Equations and Applications, Olomouc, Tschechische Republik, 17. Dezember.

K. GÄRTNER, *Separatoren, ein nichtlineares Eigenwertproblem*, Thermodynamisches Seminar, Technische Universität Berlin, 6. Januar.

——, *PARDISO, and parallel direct methods for solving sparse linear systems*, Compaq Computer Corporation, Nashna, USA, 10. November.

B. GENTZ, *The fluctuations of the overlap in the Hopfield model at the critical temperature*, 5th Workshop on Probability Theory and its Applications, Bielefeld, 16. Februar.

——, *Neuronale Netze: Das Hopfield-Modell als assoziatives Gedächtnis*, Vortragsreihe „Mathematikerinnen stellen sich vor", Technische Universität Berlin, 2. Juli.

J. A. GRIEPENTROG, *Nichtglatte parabolische Anfangsrandwertprobleme in Sobolev-Campanato-Räumen. Teil 1: Funktionenräume und Lösbarkeit*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden" (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 3. Februar.

——, *Nichtglatte parabolische Anfangsrandwertprobleme in Sobolev-Campanato-Räumen. Teil 2: Regularitätstheorie*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden" (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 10. Februar.

——, *Regularity of nonsmooth linear elliptic and parabolic boundary value problems in Sobolev-Campanato spaces*, Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik, Prag, 12. Oktober.

K. GRÖGER, *Campanato-Räume und Sobolev-Campanato-Räume*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 3. März.

——, *Präduale Räume für Campanato- und Sovolev-Campanato-Räume*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 9. Juni.

——, *Laudatio*, Festkolloquium anlässlich des 60. Geburtstages von Herrn Prof. Dr. Herbert Gajewski, WIAS, Berlin, 14. Juli.

——, *Neue Campanato-Räume und deren Nutzen*, Mathematisches Kolloquium, Universität zu Köln, 15. Oktober.

——, *Beschränktheit von Lösungen von Randwertproblemen mit gemischten Randbedingungen*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 17. November.

——, *Preduals of Campanato spaces and applications*, International Conference on Partial Differential Equations and Applications, Olomouc, Tschechische Republik, 17. Dezember.

F. GRUND, *Chemische Prozess-Simulation auf Parallelrechnern*, Eröffnungskolloquium Graduiertenkolleg „Erhaltungsprinzipien in der Modellierung und Simulation mariner, atmosphärischer und technischer Systeme“, Universität Hamburg, 19. Januar.

——, *Pivot strategies for direct linear solvers*, SIAM Annual Meeting, Atlanta, Georgia, USA, 12. Mai.

——, *Pivot strategies for direct linear solvers*, Fourth International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 99), University of Edinburgh, Großbritannien, 5. Juli.

G. HEBERMEHL, *Simulation von Schaltungen*, Festkolloquium anlässlich des 60. Geburtstages von Herrn Prof. Dr. Friedrich Grund, WIAS, Berlin, 23. März.

——, *The eigen mode problem for microwave transmission lines with absorbing boundary conditions*, Jahrestagung der Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik, Metz, Frankreich, 15. April.

——, *Simulation von Mikrowellenschaltungen*, Präsentation des WIAS vor Hamburger Studenten, WIAS, Berlin, 25. Juni.

——, *Simulation of microwave integrated circuits and multi-chip modules*, The Fourth International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 99), Edinburgh, Großbritannien, 8. Juli.

——, *PML-Randbedingungen in der Simulation von Mikrowellenschaltungen*, WIAS-Kolloquium, Berlin, 15. November.

R. HENRION, *Stability and structural aspects in programs with probabilistic constraints*, 5th International Conference on Approximation and Optimization in the Caribbean, Guadeloupe, 2. April.

——, *Struktur und Stabilität in Optimierungsproblemen mit Wahrscheinlichkeitsrestriktionen*, DFG-Workshop „Stabilität und Sensitivität von Optimierungs- und Steuerungsproblemen“, Burg, 22. April.

——, *Echtzeit-Optimierung integrierter Destillationskolonnen unter Wahrscheinlichkeitsrestriktionen*, DFG-Antragskolloquium im Schwerpunktprogramm „Echtzeitoptimierung großer Systeme“, Bad Honnef, 19. Mai.

——, *On the structure and stability of chance constraints*, Symposium on Operations Research (SOR'99), Magdeburg, 1. September.

R. HINDER, *Analysis and numerics of the conical diffraction problem*, International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 99), Edinburgh, Großbritannien, 5. Juli.

D. HÖMBERG, *Modell und Simulation von Phasenübergängen in Stahl*, 17. Symposium des Arbeitskreises Mathematik in Forschung und Praxis, Bad Honnef, 22. März.

——, *Modellierung und Simulation von Phasenübergängen in Stahl*, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, 30. Juni.

——, *Optimal shape design of inductor coils for surface hardening*, Fourth International Conference on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 99), Edinburgh, Großbritannien, 7. Juli.

——, *State constraint optimal control of laser surface treatments*, Fourth International Conference on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 99), Edinburgh, Großbritannien, 8. Juli.

R. HÜNLICH, *Modellierung und Simulation von hochsperrenden Bauelementen für Schaltkreise der Leistungselektronik*, Statusseminar zum BMBF-Förderprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“, Erlangen, 18. Februar.

——, *Zur Modellierung von Stoff- und Ladungstransport in Halbleitern*, Festkolloquium anlässlich des 60. Geburtstages von Herrn Prof. Dr. Herbert Gajewski, WIAS, Berlin, 14. Juli.

——, *On reaction-diffusion systems arising in semiconductor modelling*, Universität Catania, Italien, 29. September.

R. HÜNLICH, W. RÖPKE, *Research activity of WIAS on semiconductor modelling and simulation*, SGS-THOMSON Microelectronics, Catania, Italien, 28. September.

S. JASCHKE, *Coherent risk measures*, Seminarvortrag, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Schweiz, 1. April.

——, *Higher order forward rate agreements*, 10th INFORMS Applied Probability Conference, Universität Ulm, 27. Juli.

——, *Coherent risk measures*, 10th INFORMS Applied Probability Conference, Universität Ulm, 28. Juli.

——, *Measuring risk in complex stochastic systems*, Research Conference „Measuring Risk in Complex Stochastic Systems“, Humboldt-Universität zu Berlin, 26. September.

——, *Coherent risk measures*, Seminarvortrag, Universität Ulm, 19. Oktober.

F. JOCHMANN, *Ein Rand-Anfangswertproblem, welches den Ladungstransport in Halbleitern beschreibt. Existenz, Regularität und asymptotisches Verhalten von Lösungen*, Universität Jena, 27. Januar.

——, *Asymptotic behaviour of solutions to a class of semilinear hyperbolic systems*, EQUADIFF 99, Freie Universität Berlin, 2. August.

H.-CHR. KAISER, *About some mathematical questions concerning the embedding of Schrödinger-Poisson systems into the drift-diffusion model of semiconductor devices*, EQUADIFF 99, Freie Universität Berlin, 3. August.

O. KLEIN, *Implizite zeitliche Diskretisierung von Phasenfeldsystemen*, Oberseminar Numerische Mathematik/Scientific Computing, Freie Universität Berlin, 28. Mai.

——, *A model for the sublimation growth of silicon carbide single crystals including heat transfer by radiation*, Dipartimento di Matematica, Università di Pavia, Italien, 3. September.

——, *Numerical approximation of a phase-field system*, Interphase '99, VIIth Workshop on Numerical Methods for Free Boundary Problems, Freiburg, 14. Oktober.

——, *A phase field system modeling supercooling*, International Conference on Free Boundary Problems: Theory and Applications, Chiba, Japan, 13. November.

TH. KOPRUCKI, *A finite-element approach to the eigen-value problem arising from kp-Hamilton operators for quantum wells*, 11th III-V Semiconductor Device Simulation Workshop, Universität Lille, Frankreich, 10. Mai.

——, *Simulation von Halbleiter-Heterostrukturen — kp-Methode für verspannte Quantum-Wells in Halbleiterlasern*, Universität Paderborn, 18. Oktober.

M. KRAFT, *Stochastic modelling in chemical engineering*, University of Cambridge, Großbritannien, 19. Januar.

——, *Scientific computing in chemical engineering*, Technische Universität Hamburg-Harburg, 27. Mai.

P. KREJČÍ, *Large amplitude oscillations in Preisach systems*, 2nd International Symposium on Hysteresis Modeling and Micromagnetism (HMM'99), Perugia, Italien, 9. Juni.

——, *Modellierung elastisch-plastischer Schwingungen*, Festkolloquium anlässlich des 60. Geburtstages von Herrn Prof. Dr. Herbert Gajewski, WIAS, Berlin, 14. Juli.

——, *Hysteresis operators in modeling of phase transitions*, EQUADIFF 99, Freie Universität Berlin, 2. August.

——, *Homogenization and rheological models for elastoplastic oscillations*, International Conference on Free Boundary Problems: Theory and Applications, Chiba, Japan, 7. November.

——, *Thermodynamically consistent models of thermo-plasticity*, International Conference on Partial Differential Equations and Applications, Olomouc, Tschechische Republik, 17. Dezember.

C. KÜLSKE, *Zufällige Oberflächen und gerichtete Polymere*, Workshop „Alignments, zufällige Umgebungen und Perkolation", Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt, 16. Januar.

——, *Non-Gibbsianness and phase transitions in random lattice systems*, Karls-Universität Prag, Tschechische Republik, 25. März.

M. KUNIK, *Kinetische Lösung der Eulergleichungen*, Seminar „Stochastische Algorithmen", WIAS, Berlin, 24. März.

——, *Hyperbolic heat conduction*, Universität Magdeburg, 8. Juni.

——, *Wavelets*, Thermodynamisches Seminar, Technische Universität Berlin, 23. Juni.

——, *Nonlinear statistical mechanics of the atomic chain*, Workshop „Mathematical Problems in Suspension Flows", Universität Stuttgart, 9. Oktober.

——, *Riemann-Lösungen der atomaren Kette*, WIAS-Kolloquium, Berlin, 1. November.

——, *Kalter, thermischer und Oszillatorabschluss der atomaren Kette*, Thermodynamisches Seminar, Technische Universität Berlin, 3. November.

P. MATHÉ, *Efficiency issues of Latin Hypercube Sampling*, Seminar „Numerische Stochastik", WIAS, Berlin, 6. Januar.

——, *Analysis of Latin Hypercube Sampling*, Seminar „Numerische Stochastik", WIAS, Berlin, 5. Mai.

——, *Approximation of Hölder continuous functions by Bernstein polynomials*, Foundations of Computational Mathematics, Oxford, Großbritannien, 20. Juli.

——, *Hilbert space analysis of Latin Hypercube Sampling*, FoCM-Workshop „Complexity of Multivariate Problems", Hong Kong, China, 5. Oktober.

A. MÖLLER, *Optimization of distillation columns under stochastic constraints*, Symposium on Operations Research (SOR'99), Magdeburg, 3. September.

H.-J. MUCHA, *Stabilitätsbewertung in der Clusteranalyse,* Jahrestagung der Gesellschaft für Klassifikation, Universität Bielefeld, 11. März.

——, *Data Mining mit ClusCorr,* Computermesse „CeBIT 99", Hannover, 20. März.

——, *Automatische Klassifizierung,* Kolloquium „Biologie und Mathematik", Humboldt-Universität zu Berlin, 17. Mai.

——, *Entscheidungshilfe zur Metrik- und Methodenwahl in der Clusteranalyse,* Herbsttagung „Datenanalyse und numerische Klassifikation", Universität Hamburg, 6. November.

M. NUSSBAUM, *Asymptotic equivalence of experiments I, II,* Yale University, New Haven, USA, 20. und 21. Januar.

——, *Asymptotic equivalence of experiments,* University of California at Berkeley, USA, 26. Januar.

——, *Asymptotic equivalence of experiments,* Cornell University, Ithaca, USA, 2. Februar.

——, *Asymptotic equivalence of statistical experiments: Recent developments,* Seminar „Statistics and Finance“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 11. März.

M. PETZOLDT, *A posteriori-Fehlerschätzer für elliptische Probleme mit unstetigen Diffusionskoeffizienten*, Ruhr-Universität Bochum, 17. November.

P. PHILIP, *A model for the sublimation growth of silicon carbide single crystals including heat transfer of radiation*, WIAS-Workshop „Systems with Hysteresis“, Berlin, 20. September.

——, *Transient numerical simulation of sublimation growth of SiC single crystals*, 1th caesarium, Stiftung caesar, Bonn, 19. November.

J. POLZEHL, *Model-adaptive smoothing in regression and time series*, Research Conference „Measuring Risk in Complex Stochastic Systems“, Humboldt-Universität zu Berlin, 23. September.

——, *Spatially adaptive smoothing techniques for signal detection in functional MRI*, Workshop am Institut für Angewandte Wissenschaft in der Medizin, Salzburg, Österreich, 12. November.

——, *Adaptive weights smoothing with applications in imaging*, Seminarvortrag, Humboldt-Universität zu Berlin, 30. November.

——, *Adaptive weights smoothing with applications in imaging*, Seminarvortrag, Karls-Universität Prag, Tschechische Republik, 8. Dezember.

——, *Räumlich adaptive Glättungsverfahren zur Signalerkennung in fMRI*, Seminarvortrag, Leibniz-Institut für Neurobiologie, Magdeburg, 13. Dezember.

M. RADZIUNAS, *Hysteresis phenomenon in numerical simulations of multisectional DFB semiconductor lasers*, Fourth International Conference on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 99), Edinburgh, Schottland, 8. Juli.

——, *A model for semiconductor lasers with nonlocal delayed boundary conditions*, WIAS-Workshop „Dynamics of Semiconductor Lasers“, Berlin, 10. September.

——, *Hysteresis in the model for semiconductor laser*, WIAS-Workshop „Systems with Hysteresis“, Berlin, 24. September.

A. RATHSFELD, *Wavelet collocation for integral equations piecewise linear wavelets, quadrature, and approximation of the boundary*, 11th TMP International Conference on Recent Advances in Analytical and Numerical Treatment of Operator Equations in memory of Prof. Siegfried Prößdorf, Chemnitz, 28. März.

——, *The computation of the gravity field of the earth by boundary element method and wavelet algorithm*, Computational Techniques and Applications Conference (CTAC'99), Canberra, Australien, 20. September.

——, *Wavelet collocation for integral equations, linear basis functions and quadrature*, German-Australian Workshop in Numerical Analysis of Boundary Integral Methods and Application, Sydney, Australien, 29. September.

J. REHBERG, *Elliptische Operatoren zweiter Ordnung mit gemischten Randbedingungen generieren analytische Halbgruppen über L^p*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden" (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 28. April.

——, *Weitere Eigenschaften von elliptischen Operatoren mit gemischten Randbedingungen über L^p*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden" (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 2. Juni.

——, *Dissipative Schrödinger operators*, Festkolloquium zur Emeritierung von Prof. Hellmut Baumgärtel: Quantum Field Theory and Scattering Theory, Universität Potsdam, 1. Oktober.

O. REIß, *An introduction to volatility smiles*, Technische Universität Delft, Niederlande, 28. April.

——, *Numerical construction of a hedging strategy against the European claim*, Derivatives Day, EURANDOM, Eindhoven, Niederlande, 15. Juni.

W. RÖPKE, *Some aspects of process and device simulation of $HBTs$ and $HU-p\,MOSTs$*, Instituto Nazionale di Metodologie e Tecnologie per la Microelettronica, Catania, Italien, 30. September.

K. K. SABELFELD, *Stochastic Lagrangian models and consistency principle*, Second IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, Varna, Bulgarien, 8. Juni.

R. SCHLUNDT, *Lineare Gleichungssysteme für Mikrowellenschaltungen (MMIC)*, Technische Universität Chemnitz, 30. April.

I. SCHMELZER, *General ether theory*, XXIIth International Workshop on the fundamental problems of high energy physics and field theory, Institute for High Energy Physics, Protvino, Russland, 22. Juni.

G. SCHMIDT, *Analysis and numerics for diffractive gratings*, 11th TMP International Conference on Recent Advances in Analytical and Numerical Treatment of Operator Equations in memory of Prof. Siegfried Prößdorf, Chemnitz, 25. März.

——, *Direct and inverse conical diffraction problems*, Fourth International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 99), Edinburgh, Großbritannien, 7. Juli.

——, *Electromagnetic diffraction on periodic structures*, Universität Linköping, Schweden, 24. September.

——, *Über Approximationen mit Gauß- und verwandten Funktionen*, Universität Leipzig, 19. November.

O. SCHMIDTMANN, *Theoretische Untersuchungen von Verdichterinstabilitäten*, BMW Rolls-Royce AeroEngines Dahlewitz, 2. Februar.

——, *Numerische Untersuchungen von Verdichterinstabilitäten*, 18. Arbeitskreissitzung des Verbundprojektes Turbotech, Arbeitsgemeinschaft Hochtemperatur-Gasturbine, DLR Köln-Porz, 11. März.

K. R. SCHNEIDER, *Stabilitätswechsel in singulär gestörten Systemen*, Universität Rostock, 25. Januar.

——, *Dynamik von DFB-Halbleiterlasern*, GAMM-Workshop, Gesamthochschule Kassel, 2. März.

——, *Zur Erweiterung der Quasi-Steady-State-Annahme*, Kolloquium „Biologie und Mathematik“ der Humboldt-Universität zu Berlin, WIAS, 8. März.

——, *Boundary value problems for singularly perturbed systems*, Tagung „Gewöhnliche Differentialgleichungen“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 17. März.

——, *Control of bifurcations*, Tagung „Regelungstheorie“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 25. März.

——, *Model reduction by extended quasi-steady-state assumption*, EQUADIFF 99, Freie Universität Berlin, 3. August.

——, *Exchange of stabilities in singularly perturbed elliptic systems*, Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, Prag, Tschechische Republik, 30. September.

——, *A method for local state space reduction*, Staatliche Universität Moskau, Russland, 2. November.

——, *Excitability in lasers*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2. Dezember.

——, *Synchronization of chaotic systems*, Humboldt-Universität zu Berlin, 3. Dezember.

J. SCHOENMAKERS, *Variance reduced simulation of stochastic differential equations*, Seminar „Numerische Stochastik“, WIAS, Berlin, 27. Januar.

——, *LIBOR rate models, related derivatives and model calibration*, Seminarvortrag, Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt/Main, 15. April.

——, *Numerical construction of hedging strategy against the European claim II*, Seminar „Numerische Stochastik“, WIAS, Berlin, 2. Juni.

——, *LIBOR rate models, related derivatives and model calibration,* Derivatives Day, EURANDOM, Eindhoven, Niederlande, 5. Januar.

——, *Log-normal approximation and robust calibration of a multi-factor LIBOR market model*, Workshop „On Computational Finance and Insurance“, Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt/Main, 8. Oktober.

——, *Log-normal approximation and robust calibration of a multi-factor LIBOR market model*, Finance Workshop, Center of Applied Probability, Columbia University, New York, USA, 2. November.

V. SCHULZ, *Mehrgittermethoden für Topologie-Optimierungsprobleme*, Humboldt-Universität zu Berlin, 17. November.

——, *Praktische Optimierung diskretisierter Modelle*, Universität Heidelberg, 22. November.

——, *Numerische Lösung diskretisierter Optimierungsprobleme*, Freie Universität Berlin, 26. November.

J. SIEBER, *Stability analysis for a dynamic coupled wave model*, WIAS-Workshop „Dynamics of Semiconductor Lasers“, Berlin, 10. September.

M. SIEGFANZ, *Numerics of the one-dimensional wave equation with hysteresis*, WIAS-Workshop „Systems with Hysteresis“, Berlin, 22. September.

V. SPOKOINY, *Adaptive methods in image processing and dimension reduction*, Seminarvortrag, Purdue University, West Lafayette, USA, 30. März.

J. SPREKELS, *Sublimations-Züchtung von SiC-Einkristallen nach der modifizierten Lely-Methode*, Statusseminar zum BMBF-Förderprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“, Erlangen, 18. Februar.

——, *Mathematik — Motor der Hochtechnologie*, Berliner Akademie für Weiterbildende Studien, Vortragsreihe „Humboldts Erben“, Charité, Berlin, 24. Februar.

——, *Siegfried Prößdorf — A short review of his scientific career*, 11th TMP International Conference on Recent Advances in Analytical and Numerical Treatment of Operator Equations in memory of Prof. Siegfried Prößdorf, Chemnitz, 26. März.

——, *Angewandte Mathematik — die verborgene Schlüsseltechnologie*, Forschungspolitischer Dialog „Angewandte Mathematik — die verborgene Schlüsseltechnologie“, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, 30. April.

——, *Phase field models and hysteresis*, Dipartimento di Matematica, Università di Pavia, Italien, 1. Juni.

——, *Phase field models and hysteresis*, Dipartimento di Matematica „U. Dini“, Università degli Studi de Firenze, Italien, 4. Juni.

——, *A parabolic-hyperbolic system with hysteresis in 1-d magnetoelasticity*, 2nd International Symposium on Hysteresis Modeling and Micromagnetics (HMM'99), Perugia, Italien, 9. Juni.

——, *Hysteresis in phase-field systems*, Colloquium honouring Prof. Dr. Karl-Heinz Hoffmann, Technische Universität München, 1. Juli.

——, *Phase field models and hysteresis*, Workshop „Phase Transitions and Dissipation Phenomena“, Mailand, Italien, Vortragsreihe, 7., 8., 9. September.

——, *Phase field systems and hysteresis*, International Conference on Free Boundary Problems: Theory and Applications, Chiba, Japan, 8. November.

H. STEPHAN, *Lateralmodendynamik bei Halbleiterlasern*, Symposium „Analysis und Simulation nichtlinearer Muster“, Sonderforschungsbereich 555 „Komplexe Nichtlineare Prozesse“, Berlin, 28. Mai.

——, *Modellierung von Halbleiterlasern unter Berücksichtigung von Temperatureffekten*, I. Winterschule des Sonderforschungsbereichs 555 „Komplexe Nichtlineare Prozesse“, Rheinsberg, 26. November.

D. TIBA, *Existence for shape optimization problems in arbitrary dimension*, Workshop „Optimization de Forme“, Luminy, Marseille, Frankreich, 24. Juni.

——, *Shape optimization in free boundary systems"*, International Conference on Free Boundary Problems: Theory and Applications, Chiba, Japan, 12. November.

——, *On some control into coefficients problems*, University of Tokyo, Japan, 18. November.

D. TURAEV, *Loss of ergodicity in smooth billiard-like potentials*, Technische Universität Lissabon, Portugal, 3. April.

——, *On dimension of nonlocal bifurcational problems*, Technische Universität Dresden, 28. Juni.

——, *Stable periodic orbits in smooth billiard-like potentials*, Tagung „Nonlinear Science: Dynamics and Stochasticity", Freie Universität Brüssel, Belgien, 1. Juli.

——, *Arbitrarily complicated dynamics near homoclinic cycles*, EQUADIFF 99, Freie Universität Berlin, 6. August.

——, *Normal forms for laser equations*, WIAS-Kolloquium, Berlin, 4. Oktober.

W. WAGNER, *Variance reduction methods*, Conference on Foundations of Computational Mathematics, Workshop „Stochastic computation", Oxford, Großbritannien, 22. Juli.

K. WILMAŃSKI, *Sound and shock waves in porous and granular materials*, WASCOM 99, Xth International Conference „Waves and Stability in Continuous Media", Vulcano, Italien, 11. Juni.

——, *Thermodynamische und stochastische Argumente zu Nicht-Newton'schen Flüssigkeiten*, Thermodynamisches Seminar, WIAS, Berlin, 16. Juni.

——, *On shock waves in porous and granular materials*, International Congress of the American Society of Mechanical Engineering, Blacksburg, USA, 28. Juni.

——, *Elementary thermodynamic and stochastic arguments on non-Newtonian fluid*, R. L. Fosdick's Anniversary Symposium, Blacksburg, USA, 30. Juni.

——, *Mass exchange processes in porous and granular materials*, WIAS-Workshop „Systems with Hysteresis", Berlin, 22. September.

M. WOLFRUM, *Geometry of heteroclinic cascades in scalar semilinear parabolic PDE*, EQUADIFF 99, Freie Universität Berlin, 6. August.

K. ZACHARIAS, *Mathematische Modelle in der Chemie*, Festkolloquium anlässlich des 60. Geburtstages von Herrn Prof. Dr. Herbert Gajewski, WIAS, Berlin, 14. Juli.

——, *On a reaction-diffusion system modelling chemotaxis*, EQUADIFF 99, Berlin, 5. August.

J. -H. ZACHARIAS-LANGHANS, *Perturbations by a Poisson process*, Seminar „Numerische Stochastik", WIAS, Berlin, 24. November.

Poster

B. ALBERS, *Adsorption/Diffusion processes in granular and porous materials*, 215. WE-Heraeus-Seminar „Granular Gases“, Bad Honnef, 8. – 12. März.

U. BANDELOW, H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, *Modellierung und Simulation verspannter Quantenschichten in Halbleiterlasern*, Statusseminar zum BMBF-Förderprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“, Erlangen, 17. – 19. Februar.

J. BORCHARDT, K. EHRHARDT, F. GRUND, D. HORN, *Divide and conquer strategies in large scale dynamic process simulation*, Scientific Computing in Chemical Engineering II, Technische Universität Hamburg-Harburg, 25. – 28. Mai.

——, *Divide and conquer strategies in large scale dynamic process simulation*, European Symposium on Computer Aided Process Engineering (Escape-9), Budapest, Ungarn, 31. Mai – 2. Juni.

N. BUBNER, O. KLEIN, P. PHILIP, J. SPREKELS, K. WILMAŃSKI, *A transient model for the sublimation growth of silicon carbide single crystals*, Workshop „Crystal Growth Meeting Germany – Japan – Poland“, Institut für Kristallzüchtung, Berlin, 19. – 20. April.

——, *Optimale Steuerung der Sublimationszüchtung von SiC-Kristallen*, Statusseminar zum BMBF-Förderprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“, Erlangen, 17. – 19. Februar.

W. DREYER, F. DUDERSTADT, D. HÖMBERG, *Modellierung, Analyse und Simulation des Widerstands-Impulsschweißens*, Statusseminar zum BMBF-Förderprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“, Erlangen, 17. – 19. Februar.

J. ELSCHNER, R. HINDER, G. SCHMIDT, *Direkte und inverse Probleme bei diffraktiven Strukturen*, Statusseminar zum BMBF-Förderprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“, Erlangen, 17. – 19. Februar.

J. ELSCHNER, R. HINDER, F. PENZEL, G. SCHMIDT, *Efficient calculations of Rayleigh coefficients for the conical diffraction by gratings*, EOS Topical Meeting on Diffractive Optics, Jena, 23. – 25. August.

J. FUHRMANN, M. PETZOLDT, *Adaptive Verfahren für unterirdische Strömungs- und Transportprozesse*, Statusseminar zum BMBF-Förderprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“, Erlangen, 17. – 19. Februar.

R. HÜNLICH, W. RÖPKE, A. GLITZKY, *Modelling and simulation of power devices for high-voltage integrated circuits*, Statusseminar zum BMBF-Förderprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“, Erlangen, 17. – 19. Februar.

R. HENRION, A. MÖLLER, *Optimization of distillation columns under probabilistic constraints*, Workshop „Scientific Computing in Chemical Engineering II“ (SCCE II), Technische Universität Hamburg-Harburg, 26. – 28. Mai.

M. KRAFT, F. MAUSS, M. BALTHASAR, *A sensitivity study of soot and NOx formation in a stationary turbulent combustor*, Combustion Institute, Joint Meeting of the British, German and French Sections, Nancy, Frankreich, 18. – 21. Mai.

M. KUNIK, *Kinetic solution for the initial and boundary value problem of hyperbolic heat conduction*, Workshop „Hyperbolic Systems of Conservation Laws“, Lissabon, Portugal, 22. – 23. April.

J. NIEBSCH, *Solving evolution equations with approximate approximations*, 9th International Meeting of European Women in Mathematics, Kloster Loccum, 30. August – 4. September.

J. POLZEHL, *Spatially adaptive smoothing procedures for signal detection in functional and dynamic magnet resonance imaging*, Jahrestagung der WGL, München, 13. Oktober.

O. SCHMIDTMANN, *Numerical investigation of compressor instabilities*, Vth German-Israeli Winter School „Turbulence: Theory, Experiments and Simulations“, Minerva center for non-linear physics of complex systems, Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel, 21. – 26. Februar.

B. MAAR, V. SCHULZ, G. WITTUM, *Numerische Verfahren zur Parameterschätzung bei Pasten und zur Formoptimierung*, Statusseminar zum BMBF-Förderprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“, Erlangen, 17. – 19. Februar.

M. SIEGFANZ, *PDEs with hysteresis*, 9th International Meeting of European Women in Mathematics, Kloster Loccum, 30. August – 4. September.

6.5 Arbeitsaufenthalte von Mitarbeitern

A. BOVIER, Universität Rom II, Italien, 17. – 25. Februar.

——, EURANDOM, Eindhoven, Niederlande, 28. März – 1. Mai.

——, Universität Paris VII, Fachbereich Mathematik, Frankreich, 21. Juni – 16. Juli.

——, Karls-Universität Prag, Fachbereich Mathematik, Tschechische Republik, 4. – 11. September.

W. DREYER, Universität Stuttgart, Institut für Mechanik, 9. – 12. Mai.

——, Heriot-Watt University, Department of Mechanical and Chemical Engineering, Edinburgh, Großbritannien, 30. August – 10. September.

——, Universität Pavia, Gruppe „Numerische Analysis“, Pavia, Italien, 13. – 18. Dezember.

M. EFENDIEV, Università degli Studi di Firenze, Facoltà di Ingegneria, und Università degli Studi di Siena, Facoltà di Ingegneria, Italien, 12. – 16. April.

——, Universität Stuttgart, Mathematisches Institut A, 12. – 30. Juli.

K. FLEISCHMANN, University of Rochester, Department of Mathematics, USA, 7. – 13. Juni.

——, The Fields Institute, Toronto, Kanada, 13. – 27. Juni.

——, University of Knoxville, Department of Mathematics, Tennessee, USA, 30. September – 29. Oktober.

J. FUHRMANN, Texas A & M University, Institute for Scientific Computation, College Station, Texas, USA, 28. März – 5. April.

——, Université de Paris-Sud, Faculté des Sciences d’Orsay, Equations aux dérivées partielles et calcul scientifique, Paris, Orsay, Frankreich, 14. – 19. Juni.

——, Centre for Mathematics and Computer Science (CWI), MAS1 Applied Analysis and Scientific Computing for PDEs, Amsterdam, Niederlande, 20. – 25. Juni.

K. GÄRTNER, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Institut für Integrierte Systeme, Schweiz, 22. – 26. März.

——, Compaq Computer Corporation, Nashna, USA, 9. – 12. November.

J. GRIEPENTROG, Karls-Universität Prag, Fakultät für Mathematik und Physik, Tschechische Republik, 11. – 15. Oktober.

R. HÜNLICH, Università di Catania, Dipartimento di Matematica, Italien, 25. September – 2. Oktober.

O. KLEIN, Università di Pavia, Dipartimento di Matematica, Pavia, Italien, 29. August – 4. September.

TH. KOPRUCKI, Universität-Gesamthochschule-Paderborn, Fachbereich 6, Physik, 18. – 22. Oktober.

M. KRAFT, Churchill College, Cambridge, Großbritannien, Universität Stuttgart, Fachbereich Mathematik und ICT Karlsruhe, 12. – 23. März.

C. KÜLSKE, Karls-Universität Prag, Fakultät für Mathematik und Physik, Tschechische Republik, 15. – 19. Februar, 23. – 27. März und 21. April – 1. Mai.

P. MATHÉ, University of Minnesota, School of Statistics, St. Paul, USA, 10. – 20. Juni.

M. NUSSBAUM, University of California, Berkeley, und Yale University, New Haven, USA, 18. Januar – 2. Februar.

——, Universität Leiden, Niederlande, 20. – 30. April.

W. RÖPKE, Università di Catania, Dipartimento di Matematica, Italien, 25. September – 2. Oktober.

K. SABELFELD, Universität Helsinki, Finnland, 14. Juni – 31. Juli.

——, Yale University, New Haven, USA, 2. August – 26. September.

K. R. SCHNEIDER, Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, Prag, Tschechische Republik, 25. September – 1. Oktober.

——, Staatliche Universität Moskau, Fakultät für Physik, Russland, 1. – 11. November.

V. SPOKOINY, Purdue University, West Lafayette, USA, 27. – 31. März.

J. SPREKELS, Università degli Studi de Firenze, Dipartimento di Matematica „U. Dini“, Italien, 28. Mai – 3. Juni.

D. TURAEV, Technische Universität Lissabon, Fachbereich Mathematik, Portugal, 29. März – 11. April.

——, New York University, Courant Institute, New York, USA, 3. – 23. Mai.

W. WAGNER, Universität des Saarlandes, Fachbereich Mathematik, 9. – 13. August.

6.6 Vorlesungen und Seminare

A. BOVIER, Vorlesung *Extrema stochastischer Folgen und Prozesse*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99.

——, Vorlesung *Statistische Mechanik ungeordneter Systeme*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000.

I. BREMER, Übung *Grundlagen der EDV I*, Technische Fachhochschule Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1998/99.

——, Übung *Grundlagen der EDV II*, Technische Fachhochschule Berlin, 4 SWS, Sommersemester 1999.

——, Vorlesung und Übung *UNIX + C*, Technische Fachhochschule Berlin, 4 SWS, Sommersemester 1999.

W. DREYER, Vorlesung *Statistische Mechanik von Einkristallen*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99 und Sommersemester 1999.

M. A. EFENDIEV, Vorlesung *Kolmogorov-Entropie und dynamische Systeme*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1999.

——, Vorlesung *Neue Entwicklungen in der Theorie von nichtlinearen Riemann-Hilbert-Problemen*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000.

H. GAJEWSKI, Seminar *Numerische Mathematik/Scientific Computing*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99.

——, Vorlesung *Nichtlineare partielle Differentialgleichungen*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99 und Sommersemester 1999.

A. GLITZKY, Vorlesung *Reaktions-Diffusionssysteme*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000.

A. GLITZKY, K. R. SCHNEIDER, Seminar *Mathematische Modellierung biologischer Prozesse*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1999.

D. HÖMBERG, Vorlesung *Numerik partieller Differentialgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1998/99 und Wintersemester 1999/2000.

M. KUNIK, Vorlesung *Lösungsmethoden für hyperbolische Erhaltungsgleichungen in Physik und Technik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000.

M. NUSSBAUM, Vorlesung *Risikotheorie (Schadenversicherungen)*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99.

——, Seminar *Mathematische Statistik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99 und Sommersemester 1999.

——, Seminar *Kurvenschätzung und Resampling*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99.

——, Vorlesung *Versicherungsmathematik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1999.

J. POLZEHL, Seminar *Mathematische Statistik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000.

A. RATHSFELD, Vorlesung *Wavelets und Anwendungen*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1999.

G. TELSCHOW, Vorlesung *Einführung in die Datenverarbeitung I*, Technische Fachhochschule Berlin, 6 SWS, Wintersemester 1998/99.

——, Vorlesung *Einführung in die Datenverarbeitung II*, Technische Fachhochschule Berlin, 6 SWS, Sommersemester 1999.

——, Vorlesung *Einführung in die Datenverarbeitung III*, Technische Fachhochschule Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1999/2000.

——, Übung *Einführung in die Datenverarbeitung III*, Technische Fachhochschule Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000.

K. R. SCHNEIDER, Vorlesung *Qualitative Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99.

——, Seminar *Halbleiterlaser* (gemeinsam mit L. Recke und H.-J. Wünsche, Humboldt-Universität), Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99.

——, Seminar *Nichtlineare Dynamik* (gemeinsam mit B. Fiedler, Freie Universität Berlin), Wintersemester 1998/99 und 1999/2000 an der Freien Universität Berlin, Sommersemester 1999 am WIAS.

J. SPREKELS, Vorlesung *Funktionalanalysis*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1998/99.

——, Vorlesung *Mathematische Modelle von Phasenumwandlungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000.

W. WAGNER, Vorlesung *Grundlagen der Monte-Carlo-Methode*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99.

K. WILMAŃSKI, *Thermodynamisches Seminar* (gemeinsam mit I. Müller, Technische Universität Berlin), WIAS/Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1998/99, Sommersemester 1999 und Wintersemester 1999/2000.

——, *Theorie der porösen Körper*, Leopold-Franzens-Universität Innsbruck, 12 Stunden, 13. – 20. Oktober.

——, Vorlesung *Kristallplastizität*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000.

6.7 Dissertationen, Habilitationen und Rufe

Dissertationen

ST. HARTMANN, Dissertationsschrift: *Layout problems in VLSI circuit design*, Technische Universität Berlin, Betreuer: Prof. Dr. Dorothea Wagner (Universität Konstanz), Prof. Dr. Rolf H. Möhring (Technische Universiät Berlin), 29. Juni 1999.

M. JÄHNISCH, Dissertationsschrift: *Asymptotische Äquivalenz für ein Modell unabhängiger nicht identisch verteilter Daten,* Humboldt-Universität zu Berlin, Betreuer: PD Dr. Michael Nussbaum, 29. Juni 1999.

K. POST, Dissertationsschrift: *A system of non-linear partial differential equations modeling chemotaxis with sensitivity functions*, Betreuer: Prof. Dr. Herbert Gajewski, 3. September.

Rufe

M. NUSSBAUM, Professur an der Cornell University, Department of Mathematics, Ithaca, USA, zum 1. August 1999.

V. SPOKOINY, Professur an der Purdue University, Department of Statistics and Economics, West Lafayette, USA, zum 1. August 1999.

6.8 Eigene Tagungen und Veranstaltungen des WIAS

WORKSHOP „FACHINFORMATION“
Berlin, 12. Januar
Organisation: WIAS (Fachinformation)
Sponsoring: WIAS

Am 12. Januar 1999 war die Fachinformation des WIAS Gastgeber für den jährlichen Erfahrungsaustausch der Teilnehmerinstitute am BMBF-Drittmittelprojekt „Nutzung naturwissenschaftlich-technischer Datenbanken durch außeruniversitäre Forschungseinrichtungen in den neuen Bundesländern — NDF-Projekt“ (1994–1996). Die Fachinformationsbeauftragten von GFZ (Potsdam), IfW (Dresden), IfN (Magdeburg), FZ-Rossendorf (Dresden), PIK (Potsdam), PDI (Berlin), INP (Greifswald), ZfAL (Müncheberg), IPF (Dresden), MBI (Berlin), Umweltbundesamt (Berlin), DifE (Rehbrücke), IPK (Gatersleben) und WIAS (Berlin) informierten sich über „Neue Dienste der Informationsanbieter“ (OCLC, FIZ und Lange&Springer) und tauschten ihre Erfahrungen auf dem Gebiet der wissenschaftlichen Informationsvermittlung aus.

FESTKOLLOQUIUM ANLÄSSLICH DES 60. GEBURTSTAGES VON HERRN PROF. DR. FRIEDRICH GRUND
Berlin, 23. März
Organisation: WIAS (FG 3)
Sponsoring: WIAS

Das Programm umfasste entsprechend den Hauptarbeitsgebieten des Jubilars im Wesentlichen die Anwendungsfelder „Simulation großer elektrischer Netzwerke“ und „Chemische Prozess-Simulation“. In Überblicksvorträgen wurde die Analyse und Implementierung zugehöriger numerischer Verfahren zur Lösung hochdimensionaler Aufgaben der linearen Algebra, nichtlinearer Gleichungssysteme und von Algebro-Differentialgleichungen auf Workstations und Parallelrechnern dargestellt. Ein weiteres Thema des Kolloquiums war die Simulation von Mikrowellenschaltungen. Vortragende waren Frau Prof. R. März (Humboldt-Universität zu Berlin) und G. Hebermehl (WIAS).

KOLLOQUIUM „NICHTLINEARE DYNAMIK UND ANWENDUNGEN“ anlässlich des 60. Geburtstages von Herrn Priv.-Doz. Dr. Klaus R. Schneider
Berlin, 27. Mai
Organisation: WIAS
Sponsoring: WIAS

Das Programm des Festkolloquiums gab einen eindrucksvollen Überblick über das weite Feld von Forschungsthemen, denen sich der Jubilar in seiner langjährigen Tätigkeit widmete. Neben Vorträgen zur Nichtlinearen Dynamik, insbesondere der Theorie singulär gestörter Systeme von Prof. Nefedov (Moskau), Prof. Fiedler (FU Berlin) und Prof. Knobloch (Würzburg), kamen auch die verschiedensten Anwendungen, wie Optoelektronik (Dr. Recke, HU Berlin), Zellbiologie (Prof. Heinrich, HU Berlin) und Dynamik von Schienenfahrzeugen (Prof. True, Kopenhagen) zur Sprache.

FESTKOLLOQUIUM ANLÄSSLICH DES 60. GEBURTSTAGES VON HERRN PROF. DR. HERBERT GAJEWSKI
Berlin, 14. Juli
Organisation: WIAS (FG 1)
Sponsoring: WIAS

Die gemeinsam mit dem Fachbereich Mathematik und Informatik der Freien Universität Berlin durchgeführte Veranstaltung war dem 60. Geburtstag von H. Gajewski gewidmet. Sein langjähriges und verdienstvolles Wirken wurde in der Laudatio von K. Gröger (Humboldt-Universität zu Berlin, WIAS) eindrucksvoll herausgestellt. Es folgten zwei Festvorträge von E. Zeidler (Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften Leipzig, Universität Leipzig) zur Faszination der Variationsrechnung und von P. Deuflhard (Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Freie Universität Berlin) zur Numerik der Maxwell-Gleichungen. Die Beiträge im Nachmittagsprogramm wählten Themen aus verschiedenen Arbeitsgebieten von H. Gajewski aus. Zu Problemen aus der Mechanik sprachen A. Langenbach (Humboldt-Universität zu Berlin, em.) und P. Krejčí (WIAS). Mathematische Modelle in der Chemie behandelte K. Zacharias (WIAS). Den Abschluss bildeten Vorträge von R. Hünlich (WIAS), F. Nier (Universität Toulon) und B. Heinemann (Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder)) zur mathematischen Modellierung und Simulation von Halbleiterbauelementen.

WORKSHOP „DYNAMICS OF SEMICONDUCTOR LASERS“
Berlin, 9. - 11. September
Organisation: Humboldt-Universität zu Berlin, Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik, Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik, WIAS (FG 2)
Sponsoring: WIAS

Am Workshop nahmen 34 Wissenschaftler (überwiegend Physiker und Ingenieure) aus zehn europäischen Ländern und den USA teil, um gemeinsam über zeitabhängige Effekte in Halbleiterlasern zu diskutieren. Dabei wurden sowohl neueste experimentelle Ergebnisse als auch ihre mathematisch-physikalische Modellierung diskutiert und potentielle Anwendungsgebiete aufgezeigt. Im Mittelpunkt des Workshops standen Laser, die von sich aus, d. h. ohne durch eine Modulation des elektrischen Stromes dazu angeregt werden, kurze Lichtimpulse mit hohen Wiederholraten auszusenden. Diese können z. B. in zukünftigen Datenübertragungssystemen auf rein optischer Basis eingesetzt werden.

Eine Besonderheit des Workshops war, dass Mathematiker, Physiker und Ingenieure gemeinsam daran teilnahmen und somit jede dieser Gruppen über das eigene Gebiet hinaus neue Erkenntnisse gewinnen konnte. Den Physikern wurden von den Mathematikern die Eigenschaften der zur Modellierung der physikalischen Effekte verwendeten mathematischen Gleichungen aufgezeigt, und umgekehrt konnten die Mathematiker Anregungen über neue mathematische Problemstellungen mit nach Hause nehmen.

Während des Workshops wurde ausgiebig diskutiert. Dazu trugen der interdisziplinäre Charakter des Workshops und die aktuelle Thematik wesentlich bei. Alle Teilnehmer sind bereichert und mit neuen Ideen aus dem Workshop herausgegangen. Aus diesem Grund wird daran gedacht, den Workshop in zwei Jahren zu wiederholen.

WORKSHOP „SYSTEMS WITH HYSTERESIS“
Berlin, 20.–24. September
Organisation: WIAS (FG 1)
Sponsoring: DFG, WIAS

Der Workshop war dem 1997 verstorbenen Begründer der mathematischen Theorie der Hysterese, Mark Alexandrovich Krasnoselskii, gewidmet und stellte eine Fortsetzung der Tradition der Hysterese-Treffen von Oberwolfach (1987, 1994) und Trento (1989, 1991, 1993, 1996) dar. Vertreter der reinen und der angewandten Mathematik, Physiker und Ingenieure konnten zu einem Ideen- und Erfahrungsaustausch zusammengeführt werden.
In 35 Fachvorträgen wurden den 43 Teilnehmern aus zehn Ländern neueste Ergebnisse auf den folgenden Gebieten vorgestellt: thermodynamische Aspekte der Hysterese, numerische Behandlung von Systemen mit Hysterese, gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen mit Hysterese, Identifizierungsprobleme, Anwendungen in der Elastoplastizität, im Ferromagnetismus, in der Piezoelektrizität, in der Biologie, Phasenübergänge und Feedback-Steuerung.

FORSCHUNGSKONFERENZ „MEASURING RISK IN COMPLEX STOCHASTIC SYSTEMS“
Berlin, 25. – 30. September
Organisation: SFB 373, Humboldt-Universität zu Berlin, WIAS (FG 6)
Sponsoring: Deutsche Bank, BHF-Bank, Sachsen LB, West LB, Arthur Andersen, MD-Tech, Humboldt-Universität zu Berlin, WIAS

Gegenstand der Konferenz waren statistische Methoden zur Behandlung komplexer Probleme, wie sie insbesondere bei der Analyse von Finanzmarktdaten auftreten. Die Konzeption der Konferenz beinhaltete folgende Schwerpunktsetzungen: Risikotheorie (Value at Risk, Extreme Risiken, Risiko-Management), Modellierung von Volatilitäten, Change Point Analysis, Long Range Dependence, lokal stationäre Zeitreihen und nichtparametrische Inferenz.
Die Vortragsserien von P. Embrechts (gemeinsam mit A. McNeil und R. Frey) zum Thema „Risk Quantification in Finance and Insurance“ und von G. Kerkyacharian zum Thema „Nonlinear Approximation Theory and Estimation“ gaben einen Überblick zum aktuellen Stand der Theorie auf für die Modellierung ökonomischer Problemstellungen relevanten Forschungsgebieten. Hervorzuheben ist ebenfalls die Präsentation der Deutschen Bank zum Thema „Risk Management“. Das Programm umfasste insgesamt 54 Vorträge. Teilnehmer und Vortragende der Konferenz kamen sowohl aus dem nichtakademischen Bereich, insbesondere von Banken und Consulting-Unternehmen, als auch von akademischen Instituten mit Forschungsschwerpunkten in der Statistik und Ökonometrie.
Proceedings mit ausgewählten Beiträgen werden als Lecture Notes in Statistics im Springer-Verlag erscheinen.

WORKSHOP „MATHEMATICA“
Berlin, 18. November
Organisation: WIAS
Sponsoring: WIAS

Zur Vertiefung der Arbeit mit der Computeralgebra-Software „MATHEMATICA“ fand am 18. November 1999 ein interdisziplinärer Workshop statt. 25 Teilnehmer aus dem universitären Bereich, außeruniversitären Forschungsinstituten und der freien Wirtschaft tauschten ihre Erfahrungen mit der Anwendung dieser mathematischen Spezialsoftware aus. Neben der Vorstellung neuer Features durch die Vertreter des Entwicklungsteams wurde die Gelegenheit zu einer konstruktiven Diskussion zwischen Anwendern und Entwicklern genutzt.

3. KOLLOQUIUM DES SCHWERPUNKTPROGRAMMS „INTERAGIERENDE STOCHASTISCHE SYSTEME VON HOHER KOMPLEXITÄT“
Berlin, 13. – 15. Dezember
Organisation: DFG-Schwerpunkt, Technische Universität Berlin, Universität Erlangen, WIAS (FG 5)
Sponsoring: DFG

Das WIAS war Austragungsort des dritten wissenschaftlichen Kolloquiums des Schwerpunktprogramms „Interagierende Stochastische Systeme von hoher Komplexität“, in dem die FG 5 intensiv mitarbeitet. In 17 Vorträgen wurde den 63 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.

6.9 Gastaufenthalte am WIAS

A. M. ANILE, Universität Catania, Fachbereich Mathematik, Italien, 1. – 14. August.

V. ARNĂUTU, University Al. I. Cuza, Department of Mathematics, Iaşi, Rumänien, 29. Januar – 15. März.

M. BALTHASAR, Technische Hochschule Lund, Institut für Verbrennungsphysik, Schweden, 22. März – 1. April.

G. BAO, Michigan State University, Department of Mathematics, East Lansing, USA, 1. – 20. Dezember.

H. BERESTYCKI, Université Paris VI, Laboratoire d'Analyse Numérique, Paris, Frankreich, 14. – 17. Dezember.

N. BERGLUND, Georgia Tech, School of Physics, Atlanta, USA, 1. – 13. August und 14. – 23. Dezember.

R. BÜRGER, Universität Stuttgart, Mathematisches Institut A, 1. – 30. November.

V. BUTUZOV, Staatliche Universität Moskau, Fakultät für Physik, Russland, 4. – 31. Mai.

S. CAPRINO, Universität Rom „Tor Vergata“, Institut für Mathematik, Italien, 19. – 24. Juni.

G. CAPRIZ, Università di Pisa, Dipartimento di Matematica „Leonida Tonelli“, Italien, 10. – 15. Mai.

D. CHIBISOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Steklov-Institut für Mathematik, Moskau, 1. – 31. Mai.

J. TH. COX, Syracuse University, Department of Mathematics, USA, 29. Mai – 2. Juni.

D. A. DAWSON, The Fields Institute, Ottawa, Kanada, 10. – 18. Juni.

J. F. DELMAS, ENPC–CERMICS, Marne-la-Vallée, Frankreich, 3. – 12. Mai.

M. DEMUTH, Technische Universität Clausthal, Institut für Mathematik, 2. – 6. August.

C. J. VAN DUIJN, Centre for Mathematics and Computer Science (CWI), Amsterdam, Niederlande, 13. – 17. Januar.

M. ELŻANOWSKI, Portland State University, Department of Mathematical Sciences, USA, 1. – 30. September.

A. C. D. VAN ENTER, Universität Groningen, Institut für Theoretische Naturkunde, Niederlande, 16. – 29. Januar.

S. M. ERMAKOV, Universität St. Petersburg, Fakultät für Mathematik und Mechanik, Russland, 1. – 30. Oktober.

V. FATALOV, Institut für Probleme des Maschinenbaus, St. Petersburg, Russland, 1. – 30. September.

J. FRANCŮ, Technical University, Department of Mathematics, Brno, Tschechische Republik, 17. – 22. Januar.

A. L. GARCIA, San Jose State University, Department of Mathematics, USA, 27. Mai – 30. Juni.

V. GAYRARD, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Départment de Mathématiques, Schweiz, 19. Juli – 30. August und 11. – 23. Dezember.

G. GILARDI, Università di Pavia, Dipartimento di Matematica, Italien, 1. – 5. Dezember.

S. GONCHENKO, Institut für Angewandte Mathematik und Kybernetik, Nizhny Novgorod, Russland, 22. Juli – 3. August und 29. November – 31. Dezember.

I. GRAMA, Akademie der Wissenschaften Moldawiens, Institut für Mathematik, Kishinev, 2. Februar – 30. April und 1. Mai – 5. Juni.

P. GREENWOOD, University of British Columbia, Department of Mathematics, Vancouver, Kanada, 2. – 9. Juni.

E. HAIMERL, Universität Salzburg, Österreich, 29. November – 4. Dezember.

S. HANDROCK-MEYER, Technische Universität Chemnitz, Fachbereich Mathematik, 6. – 9. April.

M. HANKE, Royal Institute of Technology, NADA, Stockholm, Schweden, 31. Mai – 4. Juni.

S. B. HAZRA, National Aerospace Laboratories, Centre for Mathematical Modelling and Computer Simulation, Bangalore, Indien, 22. – 27. Oktober.

A. HELGET, BASF AG, Ludwigshafen, 1. – 28. März.

N. HOFMANN, Universität Erlangen, Fachbereich Mathematik, 22. – 25. Februar.

Y. INGSTER, Transport University, Department of Applied Mathematics, St. Petersburg, Russland, 21. Januar – 28. Februar und 1. Juni – 31. August.

L. V. KALACHEV, University of Montana, Department of Mathematical Sciences, Missoula, USA, 30. Juni – 10. Juli.

M. KAMENSKII, Universität Metz, Fachbereich Mathematik, Frankreich, 22. – 26. November.

J. KASHTANOV, Universität St. Petersburg, Fachbereich Mathematik, Russland, 3. – 30. Oktober.

F. KIRILLOVA, Nationale Akademie der Wissenschaften Belorusslands, Institut für Mathematik, Minsk, 25. – 29. Oktober.

Y. KOMLEV, Institut für Angewandte Mathematik und Kybernetik, Nizhny Novgorod, Russland, 8. – 21. November.

V. KONAKOV, Zentrales Ökonomisches und Mathematisches Institut, Moskau, Russland, 16. März – 15. April.

S. KOSTADINOV, Universität Plovdiv, Fachbereich Mathematik, Bulgarien, 18. – 28. Oktober.

V. KOZLOV, Universität Linköping, Mathematisches Institut, Schweden, 1. – 31. Juli.

M. KRAFT, University of Cambridge, Department of Chemical Engineering, Großbritannien, 13. – 19. Dezember.

A. M. KRASNOSELSKII, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau, 20. November – 18. Dezember.

M. KUČERA, Tschechische Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, Prag, 29. November – 3. Dezember.

O. KURBANMURADOV, Wissenschaftliches Zentrum „Climate“, Turkmenische Akademie der Wissenschaften, Aschchabad, 12. Januar – 10. März und 26. Oktober – 5. Dezember.

I. KURKOVA, EURANDOM, Eindhoven, Niederlande, 21. November – 1. Dezember.

B. LANI-WAYDA, Justus-Liebig-Universität Gießen, Mathematisches Institut, 15. – 18. Februar.

G. LEONOV, Universität St. Petersburg, Fakultät für Mathematik und Mechanik, Russland, 8. – 13. Dezember.

A. LEVYKIN, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Angewandte Mathematik und Geophysik, Novosibirsk, 1. – 31. März.

D. LOGASHENKO, Universität Heidelberg, Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen, 7. – 13. November.

M. LÖWE, EURANDOM, Eindhoven, Niederlande, 22. – 26. November.

I. LIU, Universität Rio de Janeiro, Institut für Mathematik, Brasilien, 1. – 30. September.

A. MAJORANA, Universität Catania, Fachbereich Mathematik, Italien, 17. – 21. November.

Š. MATUŠŮ–NEČASOVÁ, Tschechische Akademie der Wissenschaften, Mathematisches Institut, Prag, 1. – 7. August.

F. MAUSS, Universität Lund, Institut für Verbrennungsphysik, Schweden, 31. Mai – 11. Juni.

CH. MAZZA, Universität Lyon 1, Institut für Mathematik, Frankreich, 22. – 27. Mai.

G. MILSTEIN, Ural State University, Department of Mathematics, Ekaterinburg, Russland, 1. April – 30. Juni.

W. MÜLLER, Heriot-Watt University, Department of Mechanical and Chemical Engineering, Edinburgh, Großbritannien, 8. März – 1. April.

L. MYTNIK, University of British Columbia, Mathematics Department, Vancouver, Kanada, 9. – 17. Januar.

S. NAZAROV, Institut für Probleme des Maschinenbaus, St. Petersburg, Russland, 1. – 31. Oktober.

N. NEFEDOV, Staatliche Universität Moskau, Fakultät für Physik, Russland, 4. – 31. Mai und 1. – 21. August.

F. NIER, Centre de Physique Théorique, CNRS-Luminy, Marseille, Frankreich, 9. Juli – 9. August.

J. OUTRATA, Institute of Information Theory and Automation, Prag, Tschechische Republik, 15. Oktober – 15. November.

R. PAN, derzeit International School for Advanced Studies (SISSA), Trieste, Italien, 26. – 31. Juli.

M. G. PANTELYAT, National Academy of Sciences of Ukraine, Institute of Problems in Machinery, Kharkov, Ukraine, 22. November – 17. Dezember.

S. PEREVERZEV, Ukrainische Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, Kiew, 12. Januar – 25. Februar und 7. Juni – 7. September.

S. PERGAMENSHCHIKOV, Universität Tomsk, Mathematisches Institut, Russland, 28. April – 27. Juni.

M. PULVIRENTI, Universität Rom „La Sapienza“, Institut für Mathematik, Italien, 19. – 24. Juni.

E. PRESUTTI, Universität Rom „Tor Vergata“, Institut für Mathematik, 18. – 21. November.

D. RACHINSKII, derzeit Universität Regensburg, Naturwissenschaftliche Fakultät I, Mathematik, 27. November – 9. Dezember.

E. RADKEVICH, Staatliche Universität Moskau, Fachbereich Mathematik und Mechanik, Russland, 22. – 28. Juli und 1. Oktober – 30. November.

N. RAMAROSY, Laboratoire d’Analyse Numérique et E.D.F., Orsay, Frankreich, 27. Februar – 6. März.

B. ROSENSAFT, Universität Bremen, Institut für elektrische Antriebe, Leistungselektronik und Bauelemente, 29. November – 10. Dezember.

B. SCHMITHÜSEN, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Institut für Integrierte Systeme, Fachbereich Elektrotechnik, Schweiz, 5. – 9. Juli.

H. SCHURZ, University of Minnesota, Institute of Technology, Minneapolis, USA, 21. – 30. November.

I. SHALIMOVA, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Angewandte Mathematik und Geophysik, Novosibirsk, 1. April – 12. Juni und 15. Oktober – 14. November.

L. SHILNIKOV, Institut für Angewandte Mathematik und Kybernetik, Nizhny Novgorod, Russland, 1. März – 2. April.

N. SIMONOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Angewandte Mathematik und Geophysik, Novosibirsk, 24. März – 5. Mai.

I. V. SKRYPNIK, Nationale Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Institut für Angewandte Mathematik und Mechanik, Donetsk, 4. Juli – 7. August.

A. SKUBACHEVSKII, Justus-Liebig-Universität Gießen, Mathematisches Institut, 5. Dezember – 8. Dezember.

J. SOKOŁOWSKI, Université de Nancy I, Laboratoire de Mathématiques, Institut Elie Cartan, Vandœuvre-les-Nancy, Frankreich, 6. – 25. September.

D. TIBA, Rumänische Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, Bukarest, 16. Januar – 13. Februar.

V. TRONCIU, Technische Universität Moldawien, Fachbereich Physik, Chisinau, Moldawien, 23. November – 21. Dezember.

V. A. VATUTIN, Steklov-Institut für Mathematik, Moskau, Russland, 14. November – 19. Dezember.

A. VERETENNIKOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau, 1. – 31. Juli.

A. A. VLADIMIROV, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau, 17. November – 17. Dezember.

A. VOITISHEK, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, Novosibirsk, 28. Januar – 2. Februar.

U. WEIKARD, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Institut für Angewandte Mathematik, 10. – 14. Mai.

J. WELLNER, University of Washington, Department of Statistics, Washington, USA, 24. – 30. August.

J. XIONG, University of Tennessee, Department of Mathematics, Knoxville, USA, 27. Juli – 23. August.

M. YAMAMOTO, Universität Tokio, Institut für Mathematik, Japan, 28. März – 4. April und 23. – 27. September.

M. ZAHRADNÍK, Karls-Universität Prag, Fakultät für Mathematik und Physik, Prag, Tschechische Republik, 17. November – 23. Dezember.

S. V. ZELIK, Staatliche Universität Moskau, Fachbereich Mathematik und Mechanik, Moskau, Russland, 28. März – 2. Mai und 24. November – 25. Dezember.

S. ZHENG, Fudan-Universität, Institut für Mathematik, Shanghai, China, 4. Mai – 1. Juni.

W. ZULEHNER, Universität Linz, Institut für Analysis und Numerik, Österreich, 13. – 17. Dezember.

Stipendiaten

I. EDELMAN, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut der Physik der Erde, Moskau, 1. März – 31. Dezember (Alexander-von-Humboldt-Stipendium).

Am WIAS betreute Doktoranden und Postdoktoranden

P. MÖRTERS, Postdoktorand, Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Technische Universität Berlin, 1. Januar – 30. September.

J. ENGLÄNDER, Postdoktorand, HCM-Programm „Stochastic Analysis“, Humboldt-Universität zu Berlin, 1. Januar – 31. August.

J. SWART, Postdoktorand, Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Technische Universität Berlin, 1. September – 31. Dezember.

I. MEROLA, 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. Januar – 1. Oktober.

6.10 Gastvorträge

V. AFRAIMOVICH, Université Paris VII, Frankreich, *Symbolic dynamics for sticky sets in area-preserving maps*, 20. Juli.

L. ANGERMANN, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, *Adaptive Finite-Volumen-Diskretisierung zur Simulation dichtegetriebener Grundwasserströmungen*, 21. Januar.

S. ANTMAN, University of Maryland, USA, *The crucial roles of viscosity in solids*, 22. November.

G. BAO, Michigan State University, East Lansing, USA, *Mathematical modeling of diffractive optics*, 13. Dezember.

E. BARBERA, Technische Universität Berlin, *On the temperature of a rarefied gas in non-equilibrium*, 3. Februar.

TH. BARTSCH, Universität Gießen, *Existenz und Vorzeichen von Lösungen nichtlinearer Schrödingergleichungen*, 12. Januar.

H. BERESTYCKI, Université Paris VI, Frankreich, *The influence of advection on the propagation of fronts*, 15. Dezember.

D. BATES, University of Iowa, USA, *Post-'87 crash fears in the S & P futures options market,* 30. Juni.

J. R. BOEHNER, Prozess-Simulierung und Spezialsoftware, Betzdorf/Sieg, *Kontinuierliche Erstarrungsprozesse — ein Anwendungsfall für Modellbildung und Simulation*, 6. Dezember.

A. BORMANN, Technische Universität Berlin, *Lösungsansatz des Bénard-Problems für allgemeine Fluide*, 7. Juli.

——, *Lineare Stabilitätsanalyse in kompressiblen Fluiden*, 10. November.

A. BORODIN, Universität St. Petersburg, Russland, *On distribution of functionals of Brownian motion stopped at inverse range time*, 17. November.

P. BÜHLMANN, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Schweiz, *Markov-Ketten mit Gedächtnis von variabler Länge,* 27. April.

R. BÜRGER, Universität Stuttgart, *Mathematical modelling of sedimentation flows*, 24. November.

G. CAPRIZ, Universität Pisa, Italien, *Mathematical models of bodies*, 14. Mai.

S. CHANDLER-WILDE, Brunel University, Großbritannien, *Spectral and Fredholm properties of a class of integral operators on the real line, with applications to scattering problems*, 28. Januar.

R. CAROLL, Texas A & M University, USA, *Nonparametric function estimation for clustered data when the predictor is measured without/with error,* 14. Oktober.

S. X. CHEN, La Trobe University, Bundoora, Australien, *Confidence intervals based on a local linear smoother,* 10. November.

A. CONSTANTIN, Universität Zürich, Schweiz, *Some aspects of a shallow water equation: Solitons, wave breaking and stability of solitary waves*, 26. Januar.

J. T. COX, University of Syracuse, USA, *Rescaled voter models and super-Brownian motion*, 2. Juni.

H. CRAUEL, Technische Universität Berlin, *Random point and set attractors*, 15. Juni.

D. A. DAWSON, The Fields Institute, Toronto, Kanada, *Multiple space-time scale analysis of state dependent multitype spatial branching*, 14. Juli.

J.-F. DELMAS, ENPC-CERMICS, Frankreich, *Blow-up for solution of non-linear PDE, capacity and regularity for super-Brownian motion*, 5. Mai.

M. DEMUTH, Technische Universität Clausthal, *General results in stochastic spectral analysis*, 4. August.

T. DOBREV, Technische Universität Bergakademie Freiberg, *Strategien zur Entwicklung nebenläufiger und verteilter Applikationen in heterogenen Netzwerken*, 9. Dezember.

S. YU. DOBROKHOTOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau, *Hugeniot-Maslov chains for singular vortex solutions, and the connection between trajectories of typhoons*, 26. November.

C. J. VAN DUIJN, Centre for Mathematics and Computer Science, Amsterdam, Niederlande, *Free boundary problems in fresh salt groundwater flow*, 14. Januar.

E. DYNKIN, Cornell University, USA, *Diffusions, superdiffusions and non-linear analysis*, 13. Januar.

M. DZIEDZINA, Bankgesellschaft Berlin, *Value-at-Risk: Eine praktische Einführung bis zu: „Wo uns der Schuh drückt“*, 19. April.

I. EDELMAN, Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau, *Wave dynamics of saturated porous media*, 26. Mai.

M. EISWIRTH, Fritz-Haber-Institut, Berlin, *Pattern formation in reaction-migration systems*, 9. November.

M. ELŻANOWSKI, Portland State University, USA, *On cavitation in nonlinear elasticity*, 17. September.

A. ENGEL, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, *Statistische Mechanik lernender Maschinen*, 10. November.

H.-J. ENGELBERT, Friedrich-Schiller-Universität Jena, *Stochastische Differentialgleichungen für symmetrische stabile Prozesse*, 17. Februar.

S. M. ERMAKOV, Universität St. Petersburg, Russland, *On pseudo- and quasi-randomness*, 20. Oktober.

E. FLACHAIRE, Katholische Universität Louvain-la-Neuve, Belgien, *Bootstrap methods in heteroskedastic regression models,* 5. Mai.

J.-P. FLORENCE, Universität Toulouse, Frankreich, *Nonparametric estimate of ressource error with application to data,* 9. Juni.

J. FRANCŮ, Technische Universität Brno, Tschechische Republik, *Homogenization of scalar hysteresis operators*, 20. Januar.

K. FRANK, Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH, Leipzig, *Mathematische Modellierung in der Populationsökologie und ihren Anwendungen — Potential, Grenzen und Forschungsbedarf*, 17. Mai.

M. FREIDLIN, Maryland University, USA, *Stochastic behavior of perturbed Hamiltonian system*, 20. Januar.

N. GANTERT, Technische Universität Berlin, *Large deviation for random walks in random environments and on Galton-Watson trees*, 27. Oktober.

A. GARCIA, San Jose State University, USA, *Stochastic particle algorithms, From DSMC to CUBA*, 16. Juni.

H. GARCKE, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, *Degenerierte parabolische Differentialgleichungen vierter Ordnung: Analysis und Numerik*, 24. Februar.

H. GEYS, Universität Limburg, Belgien, *Pseudo-likelihood and generalized estimating equations: Efficient estimation techniques for the analysis of toxicology studies,* 27. Oktober.

G. GILARDI, Universität Pavia, Italien, *Toward the mathematical analysis of a model for tin/lead solders*, 2. Dezember.

J. GOTTLIEB, Colorado State University, Fort Collins, USA, *Inverse Probleme der Feuchtigkeitsmessung*, 4. Mai.

F. GÖTZE, Universität Bielefeld, *Asymptotische Approximationen nichtlinearer Formen*, 9. Juni.

P. GREENWOOD, University of British Columbia, Vancouver, Kanada, *Stochastic resonance: Statistical aspects*, 4. Juni.

B. GRUND, University of Minnesota, USA, *Goodness of fit tests in nonparametric survival models,* 24. Februar.

M. HABIP, Siemens AG, Offenbach, *Numerische Simulation von Schweißvorgängen*, 1. März.

A. VON HAESELER, Max-Planck-Institut für evolutionäre Anthropologie, Leipzig, *DNA — Sequenz Alignment und die Rekonstruktion der Evolution von Sequenzen*, 8. November.

M. HANKE, Royal Institute of Technology, Stockholm, Schweden, *Simulated Annealing für Batch-Destillationsprozesse*, 31. Mai.

S. HEILER, Universität Konstanz, *Data-driven decomposition of seasonal time-series,* 20. Januar.

B. HEINRICH, Technische Universität Chemnitz, *The Fourier-finite-element method and its application to elliptic problems in axisymmetric domains*, 1. Juli.

A. HELGET, BASF AG, Ludwigshafen, *gPROMS: Ein Simulator für Modelle verfahrenstechnischer Prozesse und Anlagen*, 18. März.

A. HERZ, Humboldt-Universität zu Berlin, *Global analysis of dynamical systems with delayed nonlinear feedback*, 4. Mai.

R. HIPTMAIR, Eberhard-Karls-Universität Tübingen, *Kantenelemente*, 15. Juli.

Z. HLAVKA, Humboldt-Universität zu Berlin, *Robust fixed width confidence intervals,* 15. Dezember.

N. HOFMANN, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, *Optimale Approximation stochastischer Differentialgleichungen durch adaptive Schrittweitensteuerung*, 24. Februar.

I. HOROVA, Karls-Universität Prag, Tschechische Republik, *Kernel smoothing and its applications,* 27. Januar.

J. HOROWITZ, University of Iowa, USA, *An adaptive, rate-optional test of a parametric model against a nonparametric alternative,* 30. Juni.

G. C. HSIAO, University of Delaware, Newark, USA, *Some problems in electromagnetics*, 29. März.

G. JAIANI, Vekua-Institut, Tbilissi, Georgien, *Über die mathematische Theorie von Platten und Stäben mit Spitzen*, 28. Juli.

P. JANSSEN, Universität Limburg, Diepenbeck, Belgien, *Sparse contingency tables and local polynomial smoothing,* 6. Oktober.

W. JUST, Max-Planck-Institut für Strömungsforschung, Göttingen, *Chaos-Kontrolle mittels zeitverzögerter Rückkopplung*, 22. Juni.

L. V. KALACHEV, University of Montana, Missoula, USA, *Practical applications of asymptotic methods*, 6. Juli.

M. KAMENSKI, Staatliche Universität Voronezh, Russland, *Applications of measure of noncompactness for nonlinear partial differential equations*, 24. November.

J. KASHTANOV, Universität St. Petersburg, Russland, *Using Fredholm representation in vortex simulation,* 28. Oktober.

Y. KEVREKIDIS, Princeton University, USA, *Pattern formation on microcomposite surfaces*, 23. November.

A. A. W. KHAMMAS, SYN.TECH Rotorblatt GmbH i. Gr., Berlin, *Über das geschlitzte Rotorblatt*, 28. Januar.

W. KIM, Yale University, USA, *Econometric analysis of evolutionary time series,* 3. März.

F. KIRILLOVA, Nationale Akademie der Wissenschaften Belorusslands, Minsk, *Stabilization of dynamical systems by bounded control*, 26. Oktober.

M. KLEIN, Universität Potsdam, *Stochastische Dynamik von Mean-Field-Modellen*, 19. Mai.

R. KLENK, Hahn-Meitner-Institut Berlin, *Dünnschichtsolarzellen auf der Basis von Chalkopyriten*, 29. März.

CH. KLINGENBERG, Universität Würzburg, *Hyperbolic conservation laws with space dependent flux*, 27. April.

C. KLÜPPELBERG, Technische Universität München, *Extremal behavior of stochastic models in finance*, 3. Februar.

A. KNAUF, Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig, *Bewegung in periodischen Potentialen*, 16. Februar.

R. KOENKER, University of Illinois, Chicago, USA, *Goodness of fit and related inference processes for quantile regression,* 16. Juni.

P. KOKOSZKA, Universität Liverpool, Großbritannien, *Inference for linear and non-linear long memory models,* 13. Januar.

N. KOKSCH, Technische Universität Dresden, *A comparison principle approach to improve existence results for smooth integral manifolds*, 24. Juni.

D. KOLYMBAS, Universität Innsbruck, Österreich, *Probleme der modernen Bodenmechanik*, 3. Mai.

J. KORONACKI, Polnische Akademie der Wissenschaften, Warschau, *On cluster analysis based on contingency label,* 2. Juni.

S. KOSTADINOV, Universität Plovdiv, Bulgarien, *Qualitative Untersuchung von Impulsdifferentialgleichungen*, 21. Oktober.

P. KOTELENEZ, Case Western University, USA, *Macroskopic limit for mesoscopic partial differential equations*, 16. Juni.

V. KOZLOV, Universität Linköping, Schweden, *On Kneser solutions to high order nonlinear ordinary differential equations*, 8. März.

——, *Boundary singularities of solutions to quasilinear elliptic equations*, 15. Juli.

A. KRASNOSELSKII, Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau, *Hopf-Bifurkationen*, 2. Dezember.

T. KRÜGER, Technische Universität Berlin, *Models of self-organized criticality and dynamical systems*, 18. Mai.

M. KUČERA, Tschechische Akademie der Wissenschaften, Prag, *Bifurcations for variational inequalities and spatial patterning in reaction-diffusion systems*, 1. Dezember.

M. KURZ, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, *CrysVUN++ — ein Softwaresystem zur Modellierung und Steuerung von Kristallzüchtungsanlagen*, 21. Juli.

B. LANI-WAYDA, Universität Gießen, *Mehrdimensionale Poincaré-Abbildungen und eindimensionale Zeitintervalle*, 15. Februar.

Y. VAN LEEUWEN, Delft University of Technology, Niederlande, *Phase transitions in low carbon steel — Numerical simulation and experimental validation*, 19. November.

R. LÉANDRE, Université de Nancy I, Frankreich, *Stochastic cohomology of Chen-Souriau and application*, 27. Januar.

Y. LE JAN, Université Paris VI, Frankreich, *Statistical solutions of stochastic differential equations*, 5. Mai.

G. LEONOV, Universität St. Petersburg, Russland, *Existence of homoclinic orbits in the Lorenz system*, 25. November.

J. LILLESTOL, Norwegian School of Economics and Business Administration, Bergen, Norwegen, *Fat and skew: Can NIG cure? — On the prospects of using the normal inverse Gaussian distribution for risk analysis,* 1. Dezember.

I. LIU, Universität Rio de Janeiro, Brasilien, *Inaccessibility assumption and thermodynamics*, 8. September.

M. A. LUBIANO, University of Oviedo, Spanien, *Variation measures for random sets,* 24. November.

YU. MAISTRENKO, Nationale Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Kiew, *Chaotic synchronization in coupled map systems*, 22. Januar.

A. MAJORANA, Universität Catania, Italien, *Mobility and diffusivity in silicon devices according to the Chapman-Enskog expansion*, 18. November.

ST. MARRON, University of North Carolina, USA, *Significance in scale space,* 26. Mai.

CH. MÄRZ, Bankgesellschaft Berlin, *Convertible bonds alias Wandelanleihen: Charakterisierung und Bewertungsproblematik*, 28. Juni.

K. MATTHIES, Freie Universität Berlin, *Time-averaging of reaction-diffusion systems: The Neishtadt result*, 19. Januar.

Š. MATUŠŮ-NEČASOVÁ, Tschechische Akademie der Wissenschaften, Prag, *Existence, uniqueness and asymptotic behaviour of solutions to equations of viscoelastic compressible fluids*, 5. August.

C. MAZZA, Universität Lyon I, Frankreich, *On the decay of correlations in +-J Ising spin glasses*, 26. Mai.

J. MENCK, Technische Universität Hamburg-Harburg, *Eine effiziente Newton-ähnliche Kopplung von Subsystemlösern*, 19. August.

A. MEYER, Technische Universität Chemnitz, *Parallele Realisierung von Finite-Elemente-Rechnungen via Gebietszerlegung und hierarchische Techniken*, 18. November.

A. S. MIKHAILOV, Fritz-Haber-Institut, Berlin, *Modelling spiral waves in excitable media: A historical overview*, 30. November.

G. MILSTEIN, Staatliche Universität Ekaterinburg, Russland, *Numerical construction of hedging strategy against the European claim,* 19. Mai.

S. MOLCHANOV, University of North Carolina, USA, *Cell-dynamo*, 14. Juli.

B. MORDUKHOVICH, Wayne State University, Detroit, USA, *Variational analysis of differential and delay-differential inclusions*, 17. Mai.

P. MÖRTERS, zzt. WIAS, Berlin, *Hausdorffmaß und Hausdorffdimension*, Berliner Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis", Berlin, 20. Februar.

——, *Eine Dimensionsformel für die Brownsche Schlange*, Berliner Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis", Berlin, 26. Mai.

M. MOSER, Universität Heidelberg, *Bandwidth selection for backfitting in additive regression models,* 23. Juni.

G. MÜLLER, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, *Numerische Simulation der Züchtung von Silizium- und Galliumarsenidkristallen*, 14. Juni.

I. MÜLLER, Technische Universität Berlin, *Zur Soziobiologie von Falken und Tauben — ein Phasendiagramm für Integration und Segregation*, 12. Mai.

——, *Temperatursprünge in der 14-Momenten-Theorie verdünnter Gase*, 8. Dezember.

S. MÜLLER, Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig, *Mathematical tools for microstructure: Young measure and beyond*, 27. Januar.

A. MUNK, Universität Bochum, *Modell-Tests in der Regressionsanalyse,* 17. Februar.

J. NAKANO, Universität Tokio, Japan, *Grafical user interface for statistical software using the internet,* 13. Januar.

S. A. NAZAROV, Institute for Mechanical Engineering Problems, St. Petersburg, Russland, *Wood's anomalies and augmented scattering matrix*, 13. Oktober.

J. OLSCHEWSKI, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Berlin, *Spanen bei hohen Geschwindigkeiten — eine Herausforderung für Experiment, Mechanik, Thermodynamik und Numerik*, 11. Oktober.

J. OUTRATA, Institute of Information Theory and Automation, Prag, Tschechische Republik, *Ein verallgemeinertes Optimierungsproblem mit Gleichgewichtsrestriktionen*, 4. November.

R. PAN, zzt. International School for Advanced Studies, Trieste, Italien, *1-d compressible flow through porous media*, 28. Juli.

M. G. PANTELYAT, Nationale Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Kharkov, *Thermo-mechanical problems in electroheat technology*, 2. Dezember.

S. PENEV, University of New South Wales, Sydney, Australien, *On some cross validation approaches in wavelet estimation,* 24. Juni.

S. PEREVERZEV, Nationale Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Kiew, *When is special regularization of ill-posed problems actually needed?*, 28. Juni.

R. PLATO, Technische Universität Berlin, *Inverse Probleme und ihre Regularisierung*, 4. Mai.

A. POMP, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Schweiz, *Numerische Simulation optischer und optoelektronischer Bauelemente im Hinblick auf inverse Aufgaben und Optimierung*, 4. Mai.

S. PRIGARIN, Institut für Biomathematik und Biometrie, München, *Optimization of functional Monte Carlo estimators in Sobolev spaces,* 8. Dezember.

E. RADKEVICH, Staatliche Universität Moskau, Russland, *Estimate of the width of mushy region between two liquids with different densities*, 23. Juli.

——, *Asymptotic profile for the Buckley-Leverett system and generalization of the Veregin-Muskat problem*, 28. Juli.

——, *A Riemann problem for poroelastic materials with the balance equation for porosity*, 1. Dezember.

N. RAMAROSY, Laboratoire d'Analyse Numérique et E.D.F., Orsay, Frankreich, *Some applications of the finite volume schemes*, 4. März.

G. REISZIG, Technische Universität Dresden, *Diskrete Algorithmen zur Unterstützung der Systemsimulation*, 28. Januar.

H. RIEDER, Universität Bayreuth, *Robuste Kalman-Filter,* 19. Mai.

B. RUBIN, Hebrew University, Jerusalem, Israel, *Some inverse problems of integral geometry and spherical wavelet transforms*, 13. Juli.

T. RUGGERI, Università di Bologna, Italien, *On the nonlinear closure problem of moment equation*, 6. September.

M. RUMPF, Universität Bonn, *Konvektion und anisotrope, nichtlineare Diffusion in der Datenanalyse*, 9. Februar.

A. RYBKO, Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau, *Non-ergodicity of queuing networks under non-stability of their fluid models*, 7. Juni.

R. VON SACHS, Université Louvain-la-Neuve, Belgien, *Automatic statistical analysis of biovariate nonstationary time series,* 14. Juli.

G. SAPORTA, Conservatoire National des Arts et Métiers, Paris, Frankreich, *Principal components of trajectories of stochastic process,* 3. November.

B. SCHMITHÜSEN, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Schweiz, *Gitteradaption für die Halbleiter-Bauelemente-Simulation*, 8. Juli.

V. SCHULZ, Universität Heidelberg, *Praktische Optimierung diskretisierter Modelle*, 4. Mai.

A. SCHUPPERT, Bayer AG, Leverkusen, *Mathematical foundations of structured hybrid modelling*, 19. Oktober.

I. SHALIMOVA, Russische Akademie der Wissenschaften, Novosibirsk, *Stochastic Lagrangian models and consistency principle,* 26. Mai.

L. P. SHILNIKOV, Institut für Angewandte Mathematik und Kybernetik, Nizhny Novgorod, Russland, *Homoklines Chaos*, 11. März.

A. N. SHIRYAEV, Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau, *Some distributional properties of the Brownian motion with DRIFT and an extension of P. Levy Theorem*, 23. Juni.

S. SHLOSMAN, CNRS Marseille, Frankreich, *Path large deviations, percolation and weakly Gibbsian states*, 16. Juni.

N. SIMONOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Novosibirsk, *On self-organizing grid generation,* 28. April.

I. V. SKRYPNIK, Institute for Applied Mathematics and Mechanics, Donetsk, Ukraine, *Degree theory for densely defined operators and applications*, 15. Juli.

——, *Degree theory for* (S_+) *operators and applications to fully nonlinear PDE*, 21. Juli.

A. L. SKUBACHEVSKII, Universität Gießen, *Elliptic functional differential equations and applications*, 7. Dezember.

J. SOKOŁOWSKI, Universität Nancy I, Frankreich, *The topological derivative and neural networks for the numerical solution of inverse problems*, 16. September.

E. SONNENDRUCKER, Université Louis Pasteur, Strasbourg, Frankreich, *Finite Element PIC methods for the numerical resolution of the Vlasov-Maxwell equations*, 4. November.

F. SPAHN, Universität Potsdam, *Structures in planetary rings*, 22. November.

ST. SPERLICH, Universität Carlos III, Madrid, Spanien, *Semiparametric estimation of generalized additive models with its application simultaneous equation system,* 6. Januar.

A. STEVENS, Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig, *Variational principles for propagation speeds in inhomogeneous media*, 14. Dezember.

D. STOLTEN, Forschungszentrum Jülich, *Brennstoffzellentechnologie — Überblick und Forschungsbedarf im Modelling*, 22. Februar.

P. STREHLOW, Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Berlin, *Phasenübergänge in Gläsern bei tiefen Temperaturen — Ein neuer makroskopischer Quantenzustand?*, 27. Januar.

K. T. STURM, Rheinische-Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, *Nonlinear heat flow, Gamma-martingales and harmonic maps with values in NPC metric spaces*, 6. Januar.

J. SWART, zzt. WIAS, Berlin, *Renormalisation of interacting diffusions*, Berliner Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Berlin, 25. Oktober.

A. THESS, Technische Universität Ilmenau, *Magnetohydrodynamik — Anwendungen und Mathematische Modellierung*, 15. März.

M. TORRILLHON, Technische Universität Berlin, *Das Riemann-Problem in der Erweiterten Thermodynamik*, 15. Dezember.

H. TRUE, Technische Universität Kopenhagen, Dänemark, *Bifurcation and chaos in nonlinear railway vehicle dynamics*, 27. Mai.

J. A. VISEK, Tschechische Akademie der Wissenschaften, Prag, *Theory, implementation and application of the least trimmed squares,* 8. Dezember.

A. A. VLADIMIROV, Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau, *Deterministic Skorokhod models with applications to stochastic processes*, 10. Dezember.

U. WEIKARD, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, *Zur Nutzung von GRAPE (GRAphics Programming Environment)*, 11. Mai.

W. WEISS, Technische Universität Berlin, *Nichteindeutige Lösungen in der Erweiterten Thermodynamik*, 21. April.

B. WERKER, Universität Tilburg, Niederlande, *Semiparametrically efficient invariant inference,* 14. April.

I. WITT, Universität Potsdam, *Trajectory attractors for a nonlinear elliptic system in a cylindrical domain with piecewise smooth boundary*, 1. Juni.

U. WYSTRUP, Sal. Oppenheim jr. & Cie, Frankfurt/Main, *Aspects of symmetry, homogenuity and duality in the Black-Scholes option pricing formula and their relevance for changing from national currencies to the Euro*, 31. Mai.

A. G. YAGOLA, Staatliche Universität Moskau, Russland, *Ill-posed problems and a priori information*, 18. Februar.

M. YAMAMOTO, Universität Tokio, Japan, *Exotic unique continuation for the wave equation and its application to an inverse wave source problem*, 1. April.

——, *On determination of coefficients in a parabolic equation*, 27. September.

N. YOSHIDA, Universität Kyoto, Japan, *The log-Sobolev inequality for unbounded spin systems on the lattice*, 23. Juni.

M. ZAHRADNÍK, Karls-Universität Prag, Tschechische Republik, *Cluster expansions and interfaces in models with multiple well potentials*, 1. Dezember.

S. V. ZELIK, Staatliche Universität Moskau, Russland, *The attractor of the equation of thermoconvective flow in porous media*, 16. Dezember.

——, *On attractors of reaction diffusion equations in R^n and their related Kolmogorov entropy*, 21. April.

S. ZHENG, Fudan-Universität, Shanghai, China, *The maximal attractor for the coupled Cahn-Hilliard equation*, 25. Mai.

W. ZULEHNER, Universität Linz, Österreich, *Löser und Glätter für Sattelpunktsprobleme*, 16. Dezember.

Prof. Dr. S. A. Nazarov, Institute for Mechanical Engineering Problems, St. Petersburg, Russland, hielt im Zeitraum vom 18. – 26. Oktober eine Gastvorlesungsreihe (fünf Vorlesungen) zum Thema *Three-dimensional fracture problems. Asymptotic and variational analyses*.

6.11 Mitveranstaltung auswärtiger Tagungen

A. BOVIER, Mitglied des Organisationskomitees, *Workshop „Stochastic models in physics"*, EURANDOM, Eindhoven, Niederlande, 19. – 24. April.

J. ELSCHNER, Mitorganisator, *11th TMP International Conference on Recent Advances in Analytical and Numerical Treatment of Operator Equations in memory of Prof. Siegfried Prößdorf*, Chemnitz, 25. – 28. März.

P. KREJČÍ, Mitglied des Organisationskomitees, *International Conference on Free Boundary Problems: Theory and Applications*, Chiba, Japan, 7. – 13. November.

K. SCHNEIDER, Mitglied des lokalen Organisationskomitees, *Tagung „EQUADIFF 99"*, Berlin, 1. – 7. August.

——, Mitglied des lokalen Organisationskomitees, *Plenum im DFG-Schwerpunktprogramm „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme"*, Berlin, 7. – 10. August.

J. SCHOENMAKERS, Mitorganisator, *Workshop „On Computational Finance and Insurance"*, Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt/Main, 8. Oktober.

J. SPREKELS, Mitorganisator, *Forschungspolitischer Dialog „Angewandte Mathematik — die verborgene Schlüsseltechnologie"*, Berlin, 30. April.

——, Mitglied des lokalen Organisationskomitees und Sektionsleiter, *Tagung „EQUADIFF 99"*, Berlin, 1. – 7. August.

——, Mitglied des Organisationskomitees, *International Conference on Free Boundary Problems: Theory and Applications*, Chiba, Japan, 7. – 13. November.

6.12 Produkte

COG (Kontakt: I. Schmelzer, Tel.: 030/20372-463)

COG ist ein Paket zur Generierung von Geometriebeschreibungen und Gittern. Der Gittergenerator ermöglicht die vollautomatische Erzeugung von Delaunay-Gittern in 1D, 2D und 3D. Er erlaubt es, die Gitterdichte lokal und richtungsabhängig zu steuern. COG gestattet eine einfache Erzeugung und Veränderung auch sehr komplizierter Geometrien.
COG ist eine Neuimplementierung und Weiterentwicklung des Gittergenerators IBG.
Ausführliche Informationen: http://www.wias-berlin.de/research/groups/nummath/projects/cog.

`ClusCorr98`® — Statistiksoftware zur Clusteranalyse, Klassifikation und multivariaten grafischen Darstellung (Kontakt: J. Mucha, Tel.: 030/20372-573)

Die Statistiksoftware `ClusCorr98`® extrahiert Wissen aus umfangreichen und hochdimensionalen Datenmengen hauptsächlich mit adaptiven Methoden der Clusteranalyse, Klassifikation und multivariaten Graphik. Sowohl numerische als auch alphanumerische Informationen können verarbeitet werden. Die Ergebnisse werden mit statistischen Simulationstechniken bewertet. Durch die Visualisierung von Daten und Ergebnissen soll das Verständnis für Daten und angewandte Methoden erhöht und die Hypothesensuche erleichtert werden. Über die Excel-Umgebung der in Visual Basic for Applications (VBA) geschriebenen Software ist der Zugriff auf interne oder externe Datenbanken realisiert. Im Rahmen der computerorientierten Statistik wurden die Arbeiten an der Statistiksoftware `ClusCorr98`® insbesondere mit den Schwerpunkten „Data Mining“ und „Intelligente Clusteranalyse“ fortgesetzt. Speziell sind hierzu neue adaptive Clusteranalysemethoden, weitere Visualisierungstechniken (z. B. neue Dendrogrammdarstellungen, dynamische Scatterplotmatrizen), zeitlich effektive Validierungstechniken für die Bewertung der Daten- und Clusteranalysen sowie Entscheidungshilfen zur Metrik- und Methodenwahl verfügbar gemacht und unter anderem auf der CeBIT99 präsentiert worden. Diese Erweiterungen resultieren aus Anforderungen der Praxis und werden in realen Anwendungsprojekten, z. B. in Archäometrie, Marketing und Fernerkundung, erprobt. Die Statistiksoftware `ClusCorr98`® ist unter Windows oder Windows NT lauffähig.
Nähere Informationen: http://www.wias-berlin.de/products/cluscorr

DIPOG, Direkte und inverse Probleme bei optischen Gittern (Kontakt: G. Schmidt, Tel.: 030/20372-456)

Das System dient zur Simulation und Optimierung von periodischen Beugungsgittern. Beim direkten Problem werden die Beugungseffizienten von vorgegebenen periodischen diffraktiven Strukturen für TE- und TM-Polarisation sowie die konische Diffraktion berechnet. Beim inversen Problem wird der optimale Entwurf von Beugungsgittern behandelt, die vorgegebene Funktionen, z. B. Effektivitätsverläufe oder Phasenverschiebungen, realisieren sollen. 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.
Nähere Informationen unter: http://www.wias-berlin.de/research/projects/optik

gltools (Kontakt: J. Fuhrmann, Tel.: 030/20372-560)

gltools wurde entwickelt, um die speziellen Bedürfnisse der Entwickler von Numerik-Codes zufriedenzustellen. Die Toolbox zur Entwicklung von OpenGL-basierten Graphikausgaben kann problemlos zur Erweiterung vorhandener Codes mit interaktiver 3D-Graphik eingesetzt werden. Ausführliche Informationen finden sich unter http://www.wias-berlin.de/~gltools.

NUMATH (Kontakt: G. Hebermehl, Tel.: 030/20372-562)

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),
Volterra'sche und Fredholm'sche Integralgleichungen,
elementare und spezielle Funktionen,
partielle Differentialgleichungen.

Die hierarchische Struktur des in FORTRAN IV implementierten Programmpaketes besteht aus Solvern, Basismoduln sowie Elementarmoduln (Level 1) und Moduln zur Matrixmanipulation.

Die Aufgabenklassen und Quellmoduln sind umfangreich dokumentiert.

Mit der NUMATH-Testbibliothek kann die Lauffähigkeit des Paketes geprüft werden.
Weitere Informationen unter:
http://www.wias-berlin.de/research/groups/nummath/projects

pdelib (Kontakt: J. Fuhrmann, Tel.: 030/20372-560)

pdelib ist eine Kollektion von Softwarekomponenten für die Erstellung von Simulationscodes auf der Basis von partiellen Differentialgleichungen. Hauptmerkmal der Kollektion ist die mit Hilfe eines schnittstellenorientierten Bottom-up-Designs erreichte Modularität. Die Nutzerschnittstelle basiert auf der Skriptsprache *lua*. Moderne 3D-Graphikhardware kann für Online-Visualisierung und softwarebasierte Videoaufzeichnung der Resultate genutzt werden.
Ausführliche Informationen finden sich unter http://www.wias-berlin.de/~pdelib.

`WIAS-TeSCA` (Kontakt: R. Nürnberg, Tel.: 030/20372-570)

`WIAS-TeSCA` (**T**wo and thre**e** dimensional **S**emi-**C**onductor **A**nalysis 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 `WIAS-TeSCA` sind sowohl für den stationären als auch für den zeitabhängigen Fall sehr effiziente numerische Verfahren implementiert. Die Finite-Elemente-Methode gestattet, weitgehend beliebige räumlich zweidimensionale Strukturen zu behandeln.
`WIAS-TeSCA` 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).
Nähere Informationen: http://www.wias-berlin.de/products/tesca

6.13 Drittmittelprojekte

Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (BMBF)

- **Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft**[1]

  „Modellierung und Simulation von hochsperrenden Bauelementen für Schaltkreise der angesteuerten Leistungselektronik" (FG 1)

  „Modellierung und Simulation verspannter Quantenschichten in Halbleiterlasern" (FG 1)

  „Entwicklung von adaptiven Lösungsstrategien und effizienten Auflösungsverfahren für die numerische Simulation unterirdischer Strömungs- und Transportprozesse in räumlich dreidimensionalen Gebieten" (FG 3)

  „Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen" (FG 3)

  „Analytische und numerische Behandlung direkter und inverser Probleme für diffraktive Strukturen" (FG 4)

  „Entwicklung der mathematischen Grundlagen für ein neues Ultraschallpulsmessverfahren" (FG 6)

  „Optimale Steuerung der Sublimationszüchtung von SiC-Kristallen" (FG 1)

  „3D-Simulation von Halbleiterdetektoren" (FG 1)

  „Modellierung, Analyse und Simulation des Widerstands-Impulsschweißens" (FG 1)

  „Numerische Verfahren zur Parameterschätzung bei Pasten und zur Formoptimierung" (FG 4)

DAAD

- VIGONI (FGn 1, 7)

Deutsche Forschungsgemeinschaft, Bonn

- „Hysterese-Operatoren in Phasenfeld-Gleichungen" (FG 1)
- „Numerische Verfahren für Schrödinger-Poisson-Systeme zur Modellierung von Halbleitern" (FG 1)
- „Adaptive Multiskalenmethoden zur Lösung von Randintegralgleichungen" (FG 4)
- „Analytische Untersuchungen von Elektro-Reaktions-Diffusionsgleichungen mit nichtglatten Daten" (FG 1)
- „Effektive Steuerung von stochastischen Partikelverfahren für Strömungen in verdünnten Gasen" (FG 5)
- Schwerpunktprogramm: „Halbleiterbauelemente hoher Leistung" (FG 1)

[1] http://www.wias-berlin.de/WIAS/projects/BMBF/MVPIW

- Schwerpunktprogramm: „Interagierende Stochastische Systeme von hoher Komplexität“ (FG 5)
- Schwerpunktprogramm: „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“ (FG 2)
- Schwerpunktprogramm: „Echtzeitoptimierung großer Systeme“ (FG 4)
- Kooperationsprojekt zum Thema „Singulär gestörte Systeme und Stabilitätswechsel“ deutscher und russischer Wissenschaftler im Rahmen des *Memorandum of Understanding* zwischen DFG und RFFI (FG 2)
- Kooperationsprojekt zum Thema „Statistik in Funktionenräumen: asymptotische Theorie“ deutscher und russischer Wissenschaftler im Rahmen des *Memorandum of Understanding* zwischen DFG und RFFI (FG 6)
- Sonderforschungsbereich 373, Humboldt-Universität zu Berlin,
„Quantifikation und Simulation ökonomischer Prozesse“ (FG 6)
- Sonderforschungsbereich 555, Humboldt-Universität zu Berlin,
„Komplexe Nichtlineare Prozesse“ (FG 1)
- Graduiertenkolleg Technische Universität Berlin,
„Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“ (FGn 5, 6)
- Wissenschaftleraustausch mit der Ukraine
- Wissenschaftleraustausch mit Turkmenistan

Alexander von Humboldt-Stiftung

- eine Stipendiatin (FG 7)

Internationale Projekte

- **(EU) HCM:** „Stochastic Analysis“ (FG 5)
- **(EU) INTAS:** „Nonlinear and singular partial differential equations and their applications“ (FG 1)
- **(EU) INTAS:** „Development of constructive and numerical methods for solving nonlocal linear and nonlinear problems for partial differential equations“ (FG 4)
- **(EU) INTAS:** „Stochastic models of nucleation, transformation and transport of aerosol particles in the turbulent atmosphere“ (FG 6)
- **(EU) TMR:** „Breakthrough in the control of nonlinear systems“ (FG 2)
- **NATO Linkage Grant:** „Stochastic modelling of aerosol particle transport and reacting pollutants in the atmosphere“ (FG 6)

Auftragsforschung

- Bankgesellschaft Berlin AG: „StatisticsDB“ (FG 6)
- CADAC GmbH, Bankgesellschaft Berlin AG: „StatisticsDB“ (FG 6)
- Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik, Berlin: „Simulation von Mikrowellenschaltungen“ (FG 3)
- Forschungszentrum Jülich: „Numerische Simulation von Methanol-Brennstoffzellen (DMFC)“ (FGn 7, 3)
- GeoForschungsZentrum Potsdam: „Simulation des gekoppelten Fluid- und Energietransports im Untergrund auf der Basis der Methode der finiten Volumina“ (FG 3)
- Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin: „Modellrechnungen zur Optimierung von Selbstpulsationen in DFB-Lasern“ (FG 2)
- Stiftung Industrieforschung: „Numerische Simulation von Temperaturfeldern bei der Strahlbearbeitung von kompliziert geformten Bauteilen“ (FG 1)
- Technische Universität Delft, Projekt NWO, Niederlande: „LIBOR Zinsderivate, Zinsmodelle und Kalibration“ (FG 6)

Index

T

U

V

W

Z