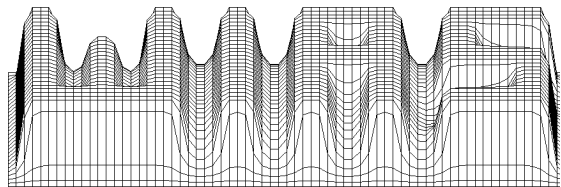


**Weierstraß–Institut  
für Angewandte Analysis und Stochastik  
(WIAS)**

im Forschungsverbund Berlin e. V.

**Jahresforschungsbericht 1995**



**Berlin 1996**

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

Fax: + 49 30 2044975  
e-mail (X.400): c=de;a=d400-gw;p=wias-berlin;s=preprint  
e-mail (Internet): [preprint@wias-berlin.de](mailto:preprint@wias-berlin.de)

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Vorwort</b>	<b>6</b>
1.1	Rückblick auf das Jahr 1995 . . . . .	6
1.2	Ausblick auf das Jahr 1996 . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Aufgabenstellung und Struktur des WIAS</b>	<b>9</b>
2.1	Aufgabenstellung des WIAS . . . . .	9
2.2	Organisatorische Struktur des WIAS . . . . .	9
2.2.1	Forschungsgruppe Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen . . . . .	10
2.2.2	Forschungsgruppe Dynamische Systeme und Steuerungstheorie . . . . .	10
2.2.3	Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen . . . . .	11
2.2.4	Forschungsgruppe Integralgleichungen und Pseudodifferentialgleichungen . . . . .	11
2.2.5	Forschungsgruppe Stochastische Systeme mit Wechselwirkung . . . . .	12
2.2.6	Forschungsgruppe Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik . . . . .	12
2.2.7	Forschungsgruppe Differenzierbare Dynamik und Ergodentheorie . . . . .	12
2.2.8	Wissenschaftlich-technische Dienste . . . . .	13
2.3	Wissenschaftlicher Beirat des WIAS . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Forschungsergebnisse und Anwendungsprojekte</b>	<b>15</b>
3.1	Forschungsgruppe Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen . . . . .	15
3.1.1	Zusammenfassung . . . . .	15
3.1.2	Projekte . . . . .	16
	Temperaturberechnung in Halbleiterbauelementen . . . . .	16
	Analytische und numerische Behandlung verschiedener Modelle zu Formgedächtnislegierungen . . . . .	18
	Simulation spinodaler Dekomposition durch Gittergase . . . . .	20
	Stabilität von Verdichtersystemen – Mathematische Aspekte . . . . .	22
	Simulation von Ladungstransport mit dem Drift-Diffusionsmodell . . . . .	23
	Modellierung und 2D-Simulation von Quantum-Well-Halbleiterlasern unter Einbindung des Schrödinger-Poisson-Systems . . . . .	27
	Elektro-Reaktions-Diffusionssysteme in Heterostrukturen . . . . .	29
	Lokale Existenz und Einzigkeit von Lösungen nichtglatter parabolischer Systeme zweiter Ordnung . . . . .	32
	Mathematische Modellierung der Wärmebehandlung von Stahl . . . . .	34
	Zu einigen Problemen bei der Modellierung und Simulation von SiGe-Heterojunction-Bipolartransistoren . . . . .	36
	Identifikation der Randbedingungen im Diffusionsmodell der optischen Tomographie . . . . .	39
	Approximation des Penrose-Fife Phasenfeld Modells und des Stefan-Problems . . . . .	41

	Halbleitergleichungen mit der Einteilchenenergie als einer unabhängigen Variablen . . . . .	43
	Selektive Differenzierung von Anregungszustandsprozessen in molekularen Aggregaten . . . . .	45
	Adaptive Optimierung von Flugprofilen mit Gedächtnislegierungen . . . . .	46
	Phasenübergänge und Hystereseerscheinungen . . . . .	48
	Operator-algebraische Lösungsmethoden für nichtlineare partielle Differentialgleichungen . . . . .	50
	Modellierung von Diffusionsprozessen mit Transportgleichungen im Phasenraum . . . . .	52
	Polymerabbau . . . . .	54
3.2	Forschungsgruppe Dynamische Systeme und Steuerungstheorie . . . . .	55
3.2.1	Zusammenfassung . . . . .	55
3.2.2	Projekte . . . . .	56
	Stabilisierung periodischer Lösungen dynamischer Systeme . . . . .	56
	Optimale Steuerung diskontinuierlicher Destillationsprozesse . . . . .	57
	Projektionsverfahren zur Simulation von Copolymerprozessen . . . . .	59
	Algorithmen zur äquivarianten Verzweigung . . . . .	62
	Erzwungene Symmetriebrechung . . . . .	63
	Bénard-Problem . . . . .	65
	Analytische und numerische Untersuchungen der nichtlinearen Dynamik von Mehrsektions-DFB-Lasern . . . . .	66
	Nichtlineare Systeme mit Unstetigkeiten . . . . .	68
	Existenz und Stabilität von Fronten und Pulsen in den FitzHugh-Nagumo-Gleichungen . . . . .	69
	Singulär gestörte Systeme mit Stabilitätswechsel . . . . .	71
	Strukturbildungsprozesse in Systemen mit kleiner Diffusion und Konvektion . . . . .	72
3.3	Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen . . . . .	73
3.3.1	Zusammenfassung . . . . .	73
3.3.2	Projekte . . . . .	74
	Numerische Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen . . . . .	74
	Numerische Lösung strukturierter DAE-Systeme . . . . .	77
	Numerische Lösung schwach besetzter Gleichungssysteme . . . . .	79
	Numerische Lösung schwach besetzter Systeme nichtlinearer Gleichungen . . . . .	80
	Adaptive monotone Mehrgittermethoden für freie Randwertprobleme . . . . .	81
	Kontakt mit Reibung . . . . .	83
	Entwicklung algebraischer Multilevelverfahren . . . . .	85
	Fluidtransport in porösen Medien . . . . .	87
	Finite-Volumen-Diskretisierung von Zweiphasenströmungen . . . . .	89
	Feldtheoretische Simulation von monolithisch integrierten Höchstfrequenzschaltungen . . . . .	90
	3D-Gittergenerierung und Geometriebeschreibung . . . . .	93
	KASKADE — eine Toolbox für adaptive Multilevelmethoden . . . . .	95
	Entwicklung und Einsatz von grafischen Werkzeugen . . . . .	96

	Portabilität von Software der linearen Algebra für Distributed Memory Systeme . . . . .	99
3.4	Forschungsgruppe Integralgleichungen und Pseudodifferentialgleichungen . . .	101
3.4.1	Zusammenfassung . . . . .	101
3.4.2	Projekte . . . . .	102
	Gezeitenmodell . . . . .	102
	Bodendurchlässigkeit . . . . .	103
	Regularisierung . . . . .	105
	Quadratur der hypersingulären Gleichung . . . . .	107
	Randelementmethoden für Kurven mit Ecken . . . . .	108
	Optische Gitter . . . . .	109
	Identifizierbarkeit . . . . .	110
	Waveletmethode für die Helmholtzgleichung . . . . .	111
	Multiskalen-Methoden für Kontrollprobleme . . . . .	114
	Scattered Data . . . . .	115
	Multiskalen-Methoden für Operatorgleichungen . . . . .	116
	Gekrümmte Tragflügel in schwingender Bewegung . . . . .	118
	Randelementmethoden mit nicht glatten Splines . . . . .	120
	Schnelle Löser für die Laplace-Gleichung . . . . .	121
	Waveletalgorithmus in der Geodäsie . . . . .	122
	Plattengleichung . . . . .	124
	Approximative Approximation . . . . .	125
3.5	Forschungsgruppe Stochastische Systeme mit Wechselwirkung . . . . .	127
3.5.1	Zusammenfassung . . . . .	127
3.5.2	Projekte . . . . .	128
	Spin-Gläser und Neurale Netze . . . . .	128
	Grenzflächen in zufälligen Medien . . . . .	129
	Ising Modelle auf Baumgraphen . . . . .	130
	Wulff-Konstruktion und Phasentrennung . . . . .	131
	Dünne organische Schichten . . . . .	132
	Katalytische Verzweigungsstrukturen . . . . .	133
	Clusterbildungseffekte wechselwirkender Diffusionen . . . . .	135
	Stochastische Teilchensysteme und Boltzmann-Gleichung . . . . .	136
3.6	Forschungsgruppe Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik .	137
3.6.1	Zusammenfassung . . . . .	137
3.6.2	Projekte . . . . .	138
	Numerische Modelle stationärer kinetischer Gleichungen . . . . .	138
	Asymptotische Analysis linearer Transportgleichungen . . . . .	140
	Identifikation von Streufeldern durch rückgestreute Teilchenströme . . .	141
	Simulation stochastischer Differentialgleichungen . . . . .	142
	Rekonstruktion stochastischer Prozesse . . . . .	143
	Stochastische globale Optimierung . . . . .	144
	Numerische Lösung von stochastischen Differentialgleichungen in be- randeten Gebieten . . . . .	145
	ClusCorr - Statistiksoftware unter Microsoft EXCEL . . . . .	146

	Kredit Scoring . . . . .	147
	Adaptive Clusteranalyse . . . . .	149
	Nichtlineare Waveletmethoden zur Schätzung bei lokal stationären Zeitreihen . . . . .	150
	Optimale nichtparametrische Verfahren bei statistischen inversen Problemen . . . . .	151
	Asymptotische Theorie statistischer Experimente . . . . .	152
	Numerik für SDEs . . . . .	154
	Angewandte Stochastische Analysis I . . . . .	156
	Angewandte stochastische Analysis II . . . . .	158
	Statistische Modellwahl durch Hypothesentests . . . . .	160
3.7	Forschungsgruppe Differenzierbare Dynamik und Ergodentheorie . . . . .	162
3.7.1	Zusammenfassung . . . . .	162
3.7.2	Projekte . . . . .	163
	Geometrie und Maß bei Attraktoren, die durch Bifurkation aus einem hyperbolischen Attraktor entstehen . . . . .	163
	Einzugsbereiche hyperbolischer Attraktoren . . . . .	164
	Nicht invertierbare Hufeisenabbildungen . . . . .	165
	Probleme aus der Theorie der dynamischen Zeta-Funktionen . . . . .	166
	Nicht vollständig invertierbare Systeme . . . . .	168
	Dynamik von Verzweigungsprozessen . . . . .	169
<b>4</b>	<b>Wissenschaftlich-technische Dienste</b>	<b>170</b>
4.1	Bibliothek . . . . .	170
4.1.1	Zur Erwerbungsituation . . . . .	170
4.1.2	Literaturbeschaffung aus anderen Bibliotheken . . . . .	171
4.1.3	Ausblick . . . . .	171
4.2	Fachinformation . . . . .	172
4.2.1	Projekte . . . . .	172
	Nutzung naturwissenschaftlich-technischer Datenbanken . . . . .	172
	Verbesserung des benutzerorientierten Zugriffs auf fachspezifische Datenbanken . . . . .	173
4.3	Rechentechnik . . . . .	176
<b>5</b>	<b>Publikationen, wissenschaftliches Leben</b>	<b>178</b>
5.1	Veröffentlichungen . . . . .	178
5.2	Preprints, Reports . . . . .	183
5.2.1	WIAS-Preprint-Serie . . . . .	183
5.2.2	Preprints/Reports an anderen Einrichtungen . . . . .	187
5.3	Mitherausgabe von Zeitschriften . . . . .	189
5.4	Vorträge und Gastaufenthalte von Mitarbeitern . . . . .	190
5.4.1	Arbeitsaufenthalte von Mitarbeitern . . . . .	205
5.5	Vorlesungen und Seminare . . . . .	207
5.6	Dissertationen, Habilitationen und Rufe . . . . .	209
5.7	Eigene Tagungen und Veranstaltungen des WIAS . . . . .	210
5.8	Gastaufenthalte am WIAS . . . . .	213

5.9	Gastvorträge . . . . .	220
5.10	Mitveranstaltung auswärtiger Tagungen . . . . .	229
5.11	Produkte . . . . .	230
5.12	Drittmittelprojekte . . . . .	231
5.13	Auszeichnungen . . . . .	232

# 1 Vorwort

Das Berichtsjahr 1995 zeichnete sich für das Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS) durch zwei wesentliche Aspekte aus. Einerseits wurde die Gründungs- und Aufbauphase des Instituts mit dem Abschluß der Bau- und Sanierungsarbeiten am Institutsgebäude beendet, zum anderen gelang es dem Institut, seine nationale und internationale Stellung weiter auszubauen.

Die Bauarbeiten am Institut wurden Ende April 1995 abgeschlossen. Erfreulicherweise hat es während der gesamten Arbeiten keine Unfälle gegeben, wofür wir sehr dankbar sind. Die Bauabnahme erfolgte am 7. August, und am 13. Oktober wurde das renovierte Gebäude von Herrn Senator Prof. Erhardt im Rahmen einer öffentlichen Präsentation des Instituts durch einen symbolischen Scherenschnitt seiner Bestimmung übergeben. Erstmals seit Gründung des Instituts im Jahre 1992 werden die Forschungsarbeiten nicht durch drängende Enge, Lärm und Schmutz behindert, vergessen ist das Dröhnen der Preßluftbohrer und der Funkenflug der Schweißgeräte, der zeitweilig nur im Sprung überwunden werden konnte! Auch die Geschäftsstelle der Deutschen Mathematiker-Vereinigung konnte endlich den für sie vorgesehenen Raum beziehen. Der Dank des Instituts gilt allen, die an der Planung und der Durchführung der Arbeiten beteiligt waren, besonders aber den Zuwendungsgebern Bund und Land Berlin, die Mittel in Höhe von insgesamt 4,3 Mio DM für die Renovierung bereitstellten und durch Flexibilität und unbürokratische Maßnahmen sehr zur Beschleunigung der Arbeiten beitrugen.

Dank und Anerkennung gebührt aber auch den Mitarbeitern des Instituts, die trotz der teilweise sehr widrigen Arbeitsbedingungen mit großem Einsatz kontinuierlich weitergearbeitet haben. Nur dadurch konnte es dem Institut gelingen, seine jetzige Position in der Fachwelt zu erreichen.

## 1.1 Rückblick auf das Jahr 1995

In wissenschaftlicher Hinsicht kann das Institut auf ein erfolgreiches Jahr zurückblicken. Die Publikationsleistung war mit 60 im Druck erschienenen Veröffentlichungen und insgesamt 74 neu in die Preprintreihe des Instituts aufgenommenen Beiträgen wiederum sehr erfreulich; 5 Promotionen und 2 Habilitationen wurden erfolgreich abgeschlossen, und 2 Rufe auf Professuren an Universitäten ergingen an Mitarbeiter des Instituts. Insgesamt 230 Vorträge wurden von Mitarbeitern des Instituts auf wissenschaftlichen Fachtagungen, auf Kolloquien und an wissenschaftlichen Institutionen im In- und Ausland gehalten; die vier sehr erfolgreichen vom WIAS veranstalteten wissenschaftlichen Tagungen und insgesamt 169 Gastvorträge trugen wesentlich zur Vertiefung der wissenschaftlichen Kontakte und zur wachsenden Attraktivität des Instituts in der nationalen und internationalen Forschungslandschaft bei.

Letzteres manifestierte sich nicht zuletzt durch die beachtlichen Erfolge bei der Einwerbung von Drittmitteln. So konnten im Jahre 1995 für das Haushaltsjahr 1996 mehr als 875 TDM an Drittmitteln zur Beschäftigung von insgesamt 10 Wissenschaftlern eingeworben werden. Die internationale Bedeutung des Instituts läßt sich auch daran ablesen, daß seine Wissenschaftler an einer ganzen Anzahl europäischer Projekte und Netzwerke beteiligt sind; dabei werden je ein INTAS-Projekt und ein HCM-Projekt von Wissenschaftlern des WIAS koordiniert.

In die Berliner Forschungslandschaft ist das WIAS fest eingebunden. Neben den Kooperationsverträgen mit der Humboldt-Universität und mit dem Konrad-Zuse-Zentrum (ZIB) manifestierte



sich dies insbesondere durch die vielen Lehrveranstaltungen, die im Jahre 1995 von den Institutsmitarbeitern an den drei Berliner Universitäten abgehalten wurden.

In fachlicher Hinsicht war die Tätigkeit des WIAS seinem spezifischen Auftrag entsprechend projektbezogen und auf angewandte Forschung und interdisziplinäre Kooperation ausgerichtet. Es gelang, weitere angewandte Projekte mit Partnern aus Industrie und Forschung zu initiieren. Eine ganze Reihe von industriellen Kooperationsprojekten befindet sich im Stadium der Anbahnung. Als besonders erfolgreich im Bereich des Technologietransfers hat sich das *Industriekolloquium* des WIAS erwiesen, in dem seit Anfang des Jahres 1995 im 14tägigen Rhythmus Anwender aus Industrie und Wissenschaft über die in ihren Arbeitsbereichen auftretenden mathematischen Probleme berichten. Aus diesen Kolloquiumsveranstaltungen, die von den Anwendern gern wahrgenommen werden, haben sich eine Reihe interessanter Kooperationsmöglichkeiten für das WIAS eröffnet.

Eine weitere Neuerung ist die Einrichtung eines *Special-Guest-Stipendiums* am Institut. Mit Hilfe dieses Stipendiums soll sich in jedem Jahr ein besonders ausgewiesener Wissenschaftler für die Dauer von zwei Monaten am Institut aufhalten und während dieser Zeit eine Serie von Vorträgen halten. Special Guest des Jahres 1995 war Prof. G. Papanicolaou von der Stanford University; für das Jahr 1996 konnte Prof. K.-H. Hoffmann von der TU München gewonnen werden.

Im Berichtsjahr konnte wiederum eine Verbesserung der technischen Infrastruktur des Instituts erreicht werden. Die Rechenkapazität konnte durch die Beschaffung weiterer Workstations weiter vergrößert werden, und die Inbetriebnahme des ATM-Backbones brachte eine deutliche Verbesserung des internen Netzes mit sich. Weiterhin steht der Anschluß des Instituts an das MAN-Netz des Landes Berlin unmittelbar bevor. Dadurch werden sich insbesondere die Verbindungen zur Nutzung des T3D-Supercomputers des ZIB deutlich verbessern.

## 1.2 Ausblick auf das Jahr 1996

Zentrales Anliegen des Instituts für die Zukunft ist die Sicherung und der Ausbau der bisher erzielten Fortschritte bei der Umsetzung einer projektorientierten und anwendungsbezogenen Forschung. Das Institut wird sich weiterhin konsequent um die Ausweitung seiner Kooperationen mit Partnern aus Industrie und Wirtschaft bemühen. Es hofft dabei auf eine verstärkte Einbeziehung in die interdisziplinäre Projektförderung des BMBF; die erfolgreiche Präsentation des Instituts am 27.11.1995 im BMBF in Bonn gibt dazu Anlaß.

Die wissenschaftliche Ausrichtung des Instituts wird sich dabei auf die in seiner Sitzung vom 20.10.1995 vom Wissenschaftlichen Beirat des Instituts empfohlenen Gebiete

- Halbleiter, Nano- und Optoelektronik,
- Phasenübergänge,
- Stochastik und Statistik in Wirtschafts- und Ingenieurwissenschaften,
- Numerik, Simulation und Softwareentwicklung,
- Nichtlineare Optimierung und Optimale Steuerung,
- Kontinuumsmechanik

konzentrieren. Die erfolgreiche Umsetzung des Forschungskonzeptes macht eine vermehrte strukturelle Flexibilität innerhalb des Instituts zum optimalen Einsatz der vorhandenen personellen Ressourcen erforderlich.

Von herausragender Bedeutung für die wissenschaftliche Arbeitsfähigkeit des WIAS wird auch weiterhin die EDV-Ausstattung des Instituts sein. Zur Durchführung seiner Forschungsprojekte mit Anwendern ist das WIAS darauf angewiesen, über ausreichende Rechen- und Graphikkapazitäten im Hause zu verfügen und mit Hilfe modernster Netztechnologie innerhalb und außerhalb des Hauses kommunizieren zu können. Hierzu soll im Jahre 1996 das ATM-Backbone im Hause weiter ausgebaut werden.

Die erfolgreiche Umsetzung des Konzeptes einer projektorientierten und anwendungsnahen Forschung am WIAS setzt eine entsprechende finanzielle und personelle Ausstattung voraus. Das Institut hofft, daß ihm in Zeiten finanzieller Engpässe und knapper werdender Ressourcen von den Zuwendungsgebern auch zukünftig die für eine erfolgreiche wissenschaftliche Arbeit unerläßliche ideelle und finanzielle Unterstützung gewährt werden wird.

Das Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik dankt allen sehr herzlich, die ihm im Jahre 1995 mit Rat und Tat bei der Erfüllung seiner Aufgaben zur Seite gestanden haben.

Berlin, im Januar 1996

J. Sprekels  
Direktor

## **2 Aufgabenstellung und Struktur des WIAS**

### **2.1 Aufgabenstellung des WIAS**

Die Entwicklung und der Einsatz effizienter Methoden der Angewandten Mathematik ist in den letzten Jahren weltweit als wichtige Voraussetzung für die Zukunft moderner Industriegesellschaften anerkannt worden. Insbesondere die Entwicklung innovativer Technologien und die Optimierung industrieller Fertigungsprozesse wären ohne den Einsatz moderner Verfahren der Angewandten Mathematik nicht denkbar.

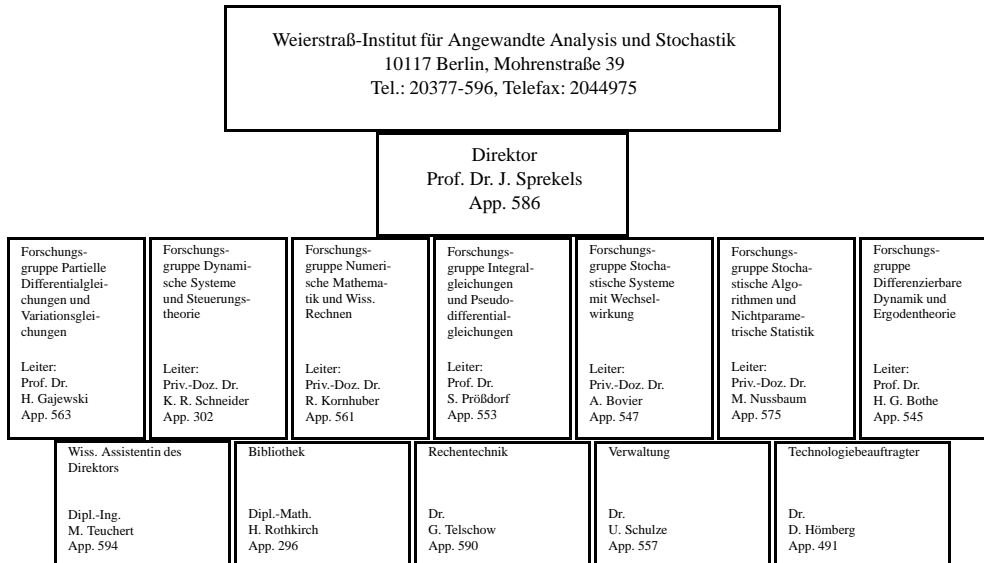
Die Aufgabenstellung des WIAS orientiert sich am zunehmenden Bedarf nach projektorientierter Forschung im Bereich der Angewandten Mathematik in Deutschland. Das WIAS soll insbesondere solche Fragestellungen der Angewandten Mathematik aufgreifen, die aus konkreten Anwendungssituationen in Medizin, Wirtschaft, Natur- und Ingenieurwissenschaften begründet sind. Die Herangehensweise ist dabei ganzheitlich, d. h. am WIAS wird der gesamte Problemlösungsprozeß von der interdisziplinären Modellierung über die mathematische Behandlung des Modells bis hin zur konkreten numerischen Simulation betrieben. Dabei treten in verschiedenen Stadien dieses Lösungsprozesses in der Regel auch solche Fragestellungen auf, die zum Bereich der mathematischen Grundlagenforschung zählen und umfangreicher mathematisch-theoretischer Untersuchungen bedürfen.

Das Konzept einer projektorientierten, anwendungsbezogenen Forschung ist bereits in einer Reihe von Anwendungsfeldern erfolgreich umgesetzt worden; so werden am WIAS konkrete Anwendungsprobleme in den Gebieten Halbleitertechnologie, chemische Verfahrenstechnik, Simulation elektrischer Schaltkreise, Finanzmathematik, statistische Methoden der Wirtschaftswissenschaften, Grundwasserströmungen, in Zusammenarbeit mit Anwendern untersucht; eine Reihe von weiteren Kooperationen mit Anwendern aus verschiedenen Gebieten der Industrie befindet sich im Anbahnungsstadium.

Das WIAS ist ständig um eine Erweiterung des Spektrums seiner Anwendungsfelder bemüht. Die vielfältigen diesbezüglichen Aktivitäten des Instituts werden vom Institutsbeauftragten für Technologietransfer koordiniert.

### **2.2 Organisatorische Struktur des WIAS**

Zur Erfüllung seiner wissenschaftlichen Aufgabenstellung ist das WIAS in sieben Forschungsgruppen gegliedert, aus denen Projektgruppen gebildet werden; hinzu kommen die wissenschaftlich-technischen Dienste. Im folgenden werden die Aufgabenfelder dieser Abteilungen im Berichtsjahr 1995 kurz charakterisiert.



### 2.2.1 Forschungsgruppe Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen

Viele grundlegende Prozesse in Natur und Technik lassen sich durch partielle Differential- bzw. Variationsgleichungen, insbesondere durch nichtlineare Evolutionsgleichungen, hinreichend genau beschreiben. Die Gruppe befaßt sich sowohl mit der analytischen Theorie dieser Gleichungen (Existenz, Eindeutigkeit, qualitatives Lösungsverhalten) als auch mit der Entwicklung, Begründung und Realisierung von Algorithmen zu ihrer numerischen Lösung. Die Algorithmen werden zur numerischen Simulation konkreter Anwendungsprozesse eingesetzt. Spezielle Forschungsschwerpunkte sind:

- 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 von Hysterese-Phänomenen, von diffusiven Phasenübergängen und von Gedächtnislegierungen,
- Wärmehandlung von Stählen.

Zu den genannten Themenkomplexen werden jeweils effiziente Software-Tools entwickelt.

### 2.2.2 Forschungsgruppe Dynamische Systeme und Steuerungstheorie

In dieser Forschungsgruppe wird das Verhalten dynamischer Systeme in Abhängigkeit von Parametern und unter Beachtung spezieller Strukturen wie Symmetrien und kleine Parameter untersucht. Neben der Herleitung qualitativer Resultate über das Langzeitverhalten der betrachteten Systeme geht es um die Entwicklung von Algorithmen zur numerischen Analyse und

Kontrolle großer strukturierter Systeme und zur Lösung von Randwertproblemen auf unendlichen Zeitintervallen. Die Verfahren werden u. a. zur Simulation und Kontrolle von Prozessen der chemischen Verfahrenstechnik eingesetzt.

Weitere Forschungsschwerpunkte sind:

- Probleme der Erregungsphysiologie und der Optoelektronik,
- Bifurkationstheorie,
- singular gestörte Systeme,
- Strukturbildung in Reaktions-Diffusionssystemen,
- Stabilisierung durch Rückkoppelung.

### 2.2.3 Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen

Die Arbeit dieser Forschungsgruppe ist geprägt vom Wechselspiel zwischen der Implementierung konkreter Problemlösungen in Kooperation mit externen Anwendern und der Entwicklung und Analyse innovativer numerischer Verfahren. Dabei sollen den Anwendern jeweils benutzerfreundliche Schnittstellen und Oberflächen zur Verfügung gestellt werden. Thematische Schwerpunkte sind dabei adaptive Multilevelmethoden zur Lösung partieller Differentialgleichungen, große differentiell-algebraische Systeme, Parallelisierung und Visualisation.

Die in der Gruppe entwickelten Algorithmen werden in einer Reihe von konkreten Anwendungsprojekten eingesetzt:

- Ein- und Zweiphasenströmungen sowie reaktiver Schadstofftransport in porösen Medien,
- Simulation komplexer physikalisch-chemischer Prozesse in der chemischen Verfahrenstechnik,
- rechnergestützter Entwurf komplexer mikroelektronischer Schaltkreise.

### 2.2.4 Forschungsgruppe Integralgleichungen und Pseudodifferentialgleichungen

Integralgleichungsmethoden werden zunehmend zur Modellierung und numerischen Behandlung schwieriger Anwendungsprobleme in Natur- und Ingenieurwissenschaften eingesetzt. Sie spielen z. B. bei der Behandlung inverser Probleme eine zentrale Rolle. Ferner lassen sich Randwertaufgaben bei Differentialgleichungen in vielen Fällen in äquivalente Randintegralgleichungen transformieren. Die Gruppe befaßt sich sowohl mit der Analyse neuer Klassen von Integraloperatoren als auch mit der Untersuchung numerischer Verfahren.

Unter anderem wird derzeit an folgenden Projekten gearbeitet:

- Analytische und numerische Lösung (Spline- und Waveletapproximation) von Randintegralgleichungen,
- Randelementmethoden und ihre Anwendung in Bruchmechanik und Aerodynamik,
- Gebietsdekompositionsverfahren mit Randelementmethoden,
- Regularisierungsverfahren bei schlechtgestellten (inversen) Problemen.

### 2.2.5 Forschungsgruppe Stochastische Systeme mit Wechselwirkung

Das wissenschaftliche Interesse der Forschungsgruppe gilt Phänomenen, die auf der mikroskopischen Wechselwirkung stochastischer Teilchensysteme und dem Einfluß zufälliger Medien beruhen. Die Untersuchungen erstrecken sich von der Modellierung interagierender Teilchensysteme über ihre theoretische Behandlung mit mathematischen Methoden der statistischen Physik bis hin zur Entwicklung und Implementierung effizienter Verfahren der stochastischen Numerik (Monte-Carlo-Simulation) zur Lösung der zugehörigen kinetischen Gleichungen.

Speziell wird an folgenden Themenkreisen gearbeitet:

- Herleitung makroskopischer Gleichungen und Studium der Fluktuation beim hydrodynamischen Grenzübergang,
- neuronale Netze,
- dynamische Phasenübergänge,
- Strukturbildung in parabolischen Systemen und bei Verzweigungsmodellen in zufälligen Medien.

### 2.2.6 Forschungsgruppe Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik

Die Forschungsgruppe betreibt eine algorithmische Stochastik, deren Ziel die Entwicklung, theoretische Begründung und Bewertung sowie die praktische Implementierung statistischer Verfahren ist. Dabei handelt es sich insbesondere um die Lösung inverser und schlechtgestellter Probleme mit Methoden der nichtparametrischen Statistik, um die Numerik und Statistik stochastischer Differentialgleichungen und um die Effizienz stochastischer Algorithmen.

Die Untersuchungen der Gruppe umfassen

- inverse Probleme der Bildverarbeitung und Tomographie,
- Methoden der optimalen statistischen Kurvenschätzung mit Hilfe von Wavelets,
- die numerische Lösung stochastischer Differentialgleichungen,
- Fragen der adaptiven Clusteranalyse.

Die Forschungsgruppe hat das Softwarepaket **ClusCorr** zur Clusteranalyse, Hauptkomponentenanalyse, Diskriminanzanalyse und multivariaten Graphik entwickelt, das von Anwendern aus verschiedenen Gebieten eingesetzt wird.

### 2.2.7 Forschungsgruppe Differenzierbare Dynamik und Ergodentheorie

Die Gruppe arbeitet auf zwei Gebieten, die durch ihre Methodik miteinander verknüpft sind. Zum einen handelt es sich um Grundlagenuntersuchungen mathematischer Strukturen, die aus der Modellierung von Evolutionsprozessen hervorgehen. Sie betreffen invariante Mengen und Attraktoren dynamischer Systeme mit den zugehörigen invarianten Maßen und numerischen

Invarianten. Dabei werden Fragen der stochastischen Dynamik behandelt. In der zweiten Arbeitsrichtung werden Ideen und Methoden der Dynamik auf klassische mathematische Probleme angewandt.

Gegenstand der Untersuchungen sind

- Hausdorff-Dimension und fraktale Struktur von Attraktoren,
- Konstruktion invarianter Maße für Anwendungen in der Physik,
- Anwendungen der Theorie geodätischer Flüsse auf Mannigfaltigkeiten mit negativer Krümmung.

### 2.2.8 Wissenschaftlich-technische Dienste

Zur Versorgung der Forschungsgruppen mit Fachliteratur und Fachinformationen betreibt das WIAS eine *wissenschaftliche Bibliothek* (vom Typ Spezialbibliothek) und eine *Fachinformationsstelle*. Die Bibliothek wird kontinuierlich geführt (laufende Erwerbung, Erschließung, Einband und Benutzung) und hinsichtlich EDV und neuer Medien und Technologien aktualisiert. Derzeit hält sie rd. 55 700 Einheiten zur Nutzung im Freihandbetrieb bzw. in Sofortbedienung aus dem Magazin bereit; ferner kann über rd. 240 laufend gehaltene Zeitschriften verfügt werden. Eine Katalogdatenbank zum Online-Zugriff über das Rechnernetz des WIAS befindet sich im Aufbau; die wichtigsten Referateorgane werden in Print- und CD-ROM-Version gehalten. Für die Online-Recherche stehen STN-Datenbanken zur Verfügung. Die Anwendung moderner Informationstechnologien wird durch ein BMBF-Projekt zur Fachinformation unterstützt.

Die Gruppe *Rechentchnik* 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* des Instituts ist für die Abwicklung der am Institut anfallenden administrativen und organisatorischen Vorgänge zuständig. Sie unterstützt die Institutsleitung bei der Aufgabe, die zur Verfügung stehenden Personal- und Sachmittel möglichst effektiv im Sinne der wissenschaftlichen Aufgabenstellung des Instituts einzusetzen. Zu den Aufgaben der Verwaltung gehört es, beim Entwurf der Wirtschaftspläne sowie der langfristigen Finanzpläne, einschließlich der Ausbau- und Investitionsprogramme, mitzuwirken.

### 2.3 Wissenschaftlicher Beirat des WIAS

Prof. Dr. A. Bensoussan  
Directeur Général I.N.R.I.A.  
Domaine de Voluceau  
Rocquencourt, B.P. 105  
  
F-78153 Le Chesnay Cédex  
France

Prof. Dr. P. Deuffhard  
Konrad-Zuse-Zentrum  
für Informationstechnik  
Berlin (ZIB)  
Heilbronner Straße 10  
  
10711 Berlin

Prof. Dr. H. Föllmer  
Humboldt-Univ. zu Berlin  
Math.-Naturwiss. Fakultät II  
Institut für Mathematik  
Unter den Linden 6  
  
10099 Berlin

Prof. Dr. K.-H. Hofmann  
Lehrstuhl für Angewandte  
Mathematik der Technischen  
Universität München  
Dachauer Straße 9 A  
  
80335 München

Prof. Dr. W. Jäger  
Interdisziplinäres Zentrum für  
Wissenschaftliches Rechnen  
Universität Heidelberg  
Im Neuenheimer Feld 368  
  
69120 Heidelberg

Dr. K. Merten  
Siemens AG  
Zentralabteilung Forschung  
und Entwicklung  
  
81730 München

Prof. Dr. M. J. Vishik  
Department of Mathematics  
and Mechanics  
Moscow State University  
Leninskiye Gori  
  
119899 Moscow  
RUSSIA

Prof. Dr. E. Zeidler  
Abteilung Analysis  
Mathematisches Institut  
Universität Leipzig  
Augustusplatz 10-11  
  
04109 Leipzig



## **3 Forschungsergebnisse und Anwendungsprojekte**

### **3.1 Forschungsgruppe Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen**

#### **3.1.1 Zusammenfassung**

Die Forschungsgruppe hat ihre langfristig konzipierten Arbeiten zur mathematischen und numerischen Untersuchung von Systemen nichtlinearer partieller Differentialgleichungen, die naturwissenschaftliche und technologische Prozesse modellieren, fortgesetzt. Im Mittelpunkt standen dabei Phasenübergänge und Elektro-Reaktions-Diffusionsvorgänge in mechanischen, chemischen, biologischen und Halbleitersystemen, wobei auch quantenmechanische Effekte einbezogen wurden. Ein Höhepunkt war der 3rd International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM '95), für den die Gruppe Minisymposien zu ihren Schwerpunktthemen Phasenübergänge und Halbleitermodellierung organisierte.

Das Spektrum der Gruppe reicht von grundlegenden qualitativen Untersuchungen zur Existenz, Einzigkeit, Regularität und dem asymptotischen Verhalten von Lösungen der Gleichungen über die Begründung und praktische Erprobung von Näherungsverfahren bis zur Installierung von Lösungsalgorithmen bei Kooperationspartnern.

Die Arbeiten der Forschungsgruppe werden zum großen Teil im Rahmen von Anwendungs- oder interdisziplinären Projekten durchgeführt. Im folgenden stellen wir die wichtigsten im Jahre 1995 bearbeiteten Projekte vor.

### 3.1.2 Projekte

#### Temperaturberechnung in Halbleiterbauelementen

**Bearbeiter:** G. Albinus

**Kooperation:** G. Wachutka, Lehrstuhl für technische Elektrophysik, TU München;  
K. Gärtner, Institut für Integrierte Systeme, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich;  
B. Heinemann, Institut für Halbleiterphysik, Frankfurt/Oder;  
U. Todt, Fraunhofer-Institut für Mikroelektronische Schaltungen und Systeme, Dresden

Ziel des Projektes ist die selbstkonsistente Temperaturberechnung in Halbleiterbauelementen auf der Grundlage phänomenologischer Energiemodelle. Solche Modelle werden durch ein System von vier partiellen Differentialgleichungen beschrieben. Das System besteht aus der Poissongleichung für das elektrostatische Potential und aus drei Transportgleichungen für den Elektronen- und Löchertransport sowie für die Wärmeleitung. Auf Grund der Zustands- und Stromgleichungen ist das System ausgeprägt nichtlinear. Erfahrungen mit dem Drift-Diffusionsmodell und auch mit dem Energiemodell zeigen, daß die Berücksichtigung der thermodynamischen Struktur der Prozesse von großer praktischer Bedeutung für die numerische Simulation ist. Unter diesem Gesichtspunkt ist der Übergang vom Drift-Diffusionsmodell zum Energiemodell eine wesentliche Veränderung, die sich keineswegs in dem quantitativen Aspekt einer zusätzlichen parabolischen Gleichung erschöpft.

In dem Berichtszeitraum wurde diese Struktur untersucht und beschrieben. Es zeigt sich dabei, daß

- erwartungsgemäß die Dichten der Elektronen, der Löcher und der Gesamtenergie zu bilanzieren sind,
- die Ströme der betreffenden Größen mit den Gradienten von  $\Phi_n/T$ ,  $\Phi_p/T$  und  $1/T$  beschrieben werden sollten, wenn  $\Phi$  die elektrochemischen Potentiale der Elektronen und der Löcher bezeichnet und  $T$  die Temperatur ist,
- die Aufgaben in der kontinuierlichen Beschreibung mit partiellen Differentialgleichungen, in der zeitlichen Diskretisierung, in der räumlichen Diskretisierung mittels Boxmethode und in der zeitlichen und räumlichen Diskretisierung ein und dieselbe Struktur aufweisen,
- diese Struktur eine physikalisch motivierte mathematische Stabilität der Aufgabenstellung sichert, die in der Konstruktion einer Ljapunovfunktion zum Ausdruck kommt, die auf dem thermodynamischen Potential  $S(n, p, u)$  der Entropie und auf dessen konjugiertem Potential  $H(\Phi_n/T, \Phi_p/T, 1/T)$  beruht.

Diese Ergebnisse sind in der bisherigen Simulationspraxis nicht berücksichtigt und werfen auch Fragen auf, die in Zusammenarbeit mit Fachleuten der irreversiblen Thermodynamik zu besprechen sind. Außerdem sollten die Ergebnisse über den Rahmen der Halbleitergleichungen hinaus überall dort von Interesse sein, wo eine nicht-lokale Wechselwirkung wie die elektrostatische auftritt und die Temperatur oder eine äquivalente Zustandsgröße eine dynamische Variable ist.

**Literatur**

1. G. ALBINUS, *Numerical Simulation of the Carrier Transport in Semiconductor Devices on the Base of an Energy Model.*, in *Mathematical Modeling and Simulation of Electrical Circuits and Semiconductor Devices* (Eds R. E. Bank, R. Burlisch, H. Gajewski, and K. Mertens), Birkhäuser, Basel 1994, 157–169.
2. ———, *Über ein Energiemodell des Ladungsträgertransports in Halbleitern*, *Z. Angew. Math. Mech.* **74** (1993), 6, T623–T624.
3. ———, *Thermodynamics of Energy Models of Semiconductor Devices*, ICIAM 95, Hamburg 1995, submitted to *Z. Angew. Math. Mech.*, Special Issue 2
4. ———, *A thermodynamically motivated Formulation of the Energy Model of Semiconductor Devices*, WIAS-Preprint No. 210, Berlin 1995.
5. H. GAJEWSKI, *Analysis und Numerik des Ladungsträgertransports in Halbleitern*, *GAMM Mitt.* **16** (1993) 1, pp. 35–57.
6. H. GAJEWSKI, K. GÄRTNER, *On the discretization of van Roosbroeck's equations with magnetic field*, Technical Report 94/14, Integrated Systems Laboratory, ETH Zurich, 1994.
7. H. GAJEWSKI, K. GRÖGER, *Semiconductor equations for variable mobilities based on Boltzmann statistics or Fermi-Dirac statistics*, *Math. Nachr.* **140** (1989), 7–36.
8. G. WACHUTKA, *Rigorous thermodynamic treatment of heat generation and conduction in semiconductor device modelling*, *IEEE Trans. CAD* **9** (1990), 1141–9.

## Analytische und numerische Behandlung verschiedener Modelle zu Formgedächtnislegierungen

**Bearbeiter:** N. Bubner, M. Schwarz

**Kooperation:** I. Müller, S. Seelecke; Institut für Thermodynamik und Reaktionstechnik, Technische Universität Berlin

In diesem Projekt wird in Fortführung aus dem Vorjahr an der Modellierung, Analyse und Numerik der Modelle von I. Müller u.a. [1,2] sowie eines Landau-Ginzburg-Modells zur Simulation des Verhaltens von Formgedächtnislegierungen (SMA) gearbeitet.

Der Grund für die Verbreitung dieser sogenannten „smart materials“ in vielen Anwendungen ist der SMA-Effekt, der auf einem temperatur- und/oder spannungs- bzw. dehnungsinduzierten Phasenübergang erster Ordnung zwischen zwei prinzipiellen Gitterkonstellationen *Austenit* und *Martensit* beruht, wobei letztere oft als Zwilling in den gescherten Varianten Martensit-Plus und -Minus auftritt.

Hauptanliegen des Projekts im Berichtszeitraum war

- der Abschluß der Umstellung der Modelle [1,2] von der Simulation lastgesteuerter Experimente (sog. „soft loading devices“) auf solche mit Kontrolle der Dehnung (sog. „hard loading devices“; vgl. die Animation auf dem WIAS-WWW-Server<sup>1</sup>)
- und die Simulation der experimentell beobachteten sogenannten „inner loops“ in einer größeren Hysteresis-Schleife in einem dehnungsgesteuerten Experiment.

Bezüglich der Müller-Modelle zeigte das in jüngerer Zeit formulierte Modell [2] trotz simplifizierenderer Annahmen (Unikristall i.Ggs. zu [1]) auf Grund der Berücksichtigung der „interfacial energy“ seine Überlegenheit, wenn man das Ergebnis der Simulation der Modelle (Abb. 2, Modell [1] in dünner Linie, Modell [2] in dicker Linie) mit einer Messung (Abb. 1 mit freundlicher Genehmigung durch U. Glasauer, TU Berlin) vergleicht.

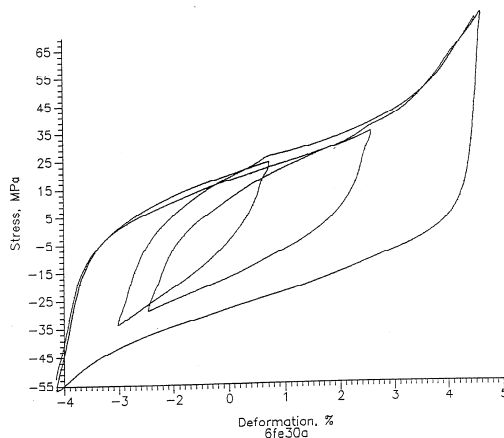


Abb. 1: gemessene „inner loops“

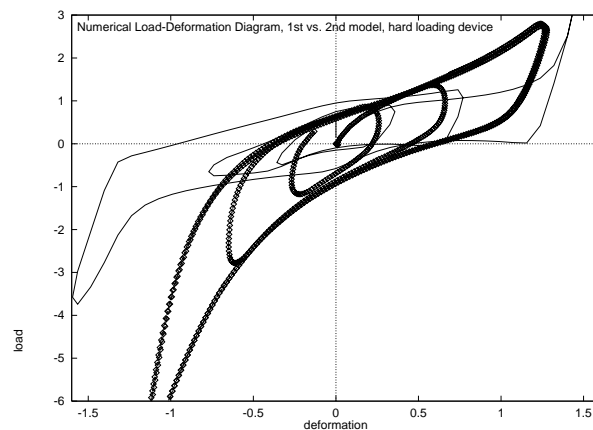


Abb. 2: simulierte „inner loops“

In Zukunft soll deshalb das Modell [2] genauer untersucht werden ([3]), später auch auf „inner loops“ im höheren Temperaturbereich. Weiter könnte man daran denken, beide Modelle zu einem zusammenzuführen.

<sup>1</sup><http://www.wias-berlin.de/~schwarz/Animation/index.html>

Im Berichtszeitraum 1994 wurde gezeigt [4], daß das Landau-Ginzburg-Modell bei geeigneter Wahl des die Grenzflächenenergie regulierenden Ginzburg-Koeffizienten  $\delta$  in der numerischen Simulation Hysteresis-Schleifen reproduziert, die quantitativ gut mit dem Experiment übereinstimmen. Es konnten innere Schleifen reproduziert werden, die teilweise qualitativ mit dem Experiment übereinstimmen. Während des Berichtszeitraumes 1995 konnte bei der Berechnung der Spannung unter Einbeziehung des Ginzburg-Terms die Übereinstimmung der simulierten mit den gemessenen Hysteresis-Schleifen noch erhöht werden (siehe Abb. 3 und 4).

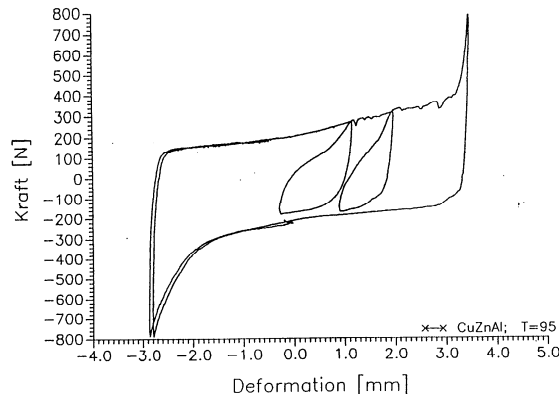


Abb. 3: Experiment

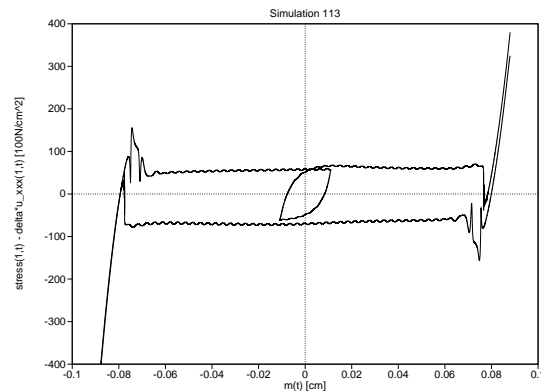


Abb. 4: Simulation

## Literatur

1. M. ACHENBACH, T. ATANACKOVIC, I. MÜLLER, *A model for memory alloys in plane strain*, Int. J. Solids Structures, 22 (1986), pp. 171–193.
2. Y. HUO, I. MÜLLER, S. SEELECKE, *Quasiplasticity and pseudoelasticity in shape memory alloys*, in Phase Transitions and Hysteresis, A. Visintin, ed., vol. LN1584 of Springer Lecture Notes in Mathematics, Springer, 1993, pp. 87–147.
3. M. SCHWARZ, *Phase Transitions of Shape Memory Alloys in soft- and hard loading devices*, Preprint, in Vorbereitung.
4. N. BUBNER, *Landau-Ginzburg Model for a Deformation-Driven Experiment on Shape Memory Alloys*, WIAS-Preprint 171, Berlin 1995, erscheint in Continuum Mechanics and Thermodynamics.

### Simulation spinodaler Dekomposition durch Gittergase

**Bearbeiter:** Th. Czapiewski

**Kooperation:** E. Rank, M. Krafczyk; Universität Dortmund

**Förderung:** DFG Schwerpunktprogramm „Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung“

Gittergase sind eine Klasse zellulärer Automaten zur Simulation von Strömungsvorgängen. Auf einem Gitter bewegen sich Teilchen gleicher Masse mit betragskonstanter Geschwindigkeit, die in den Gitterknoten kollidieren und sich ansonsten nicht beeinflussen. Der Algorithmus besteht aus einem sich wiederholenden Zyklus der *Propagation* (deterministische Fortbewegung zum nächsten Knoten) und *Kollision* (i.a. nichtdeterministisch) der Partikel unter Erhaltung der Gesamtmasse.

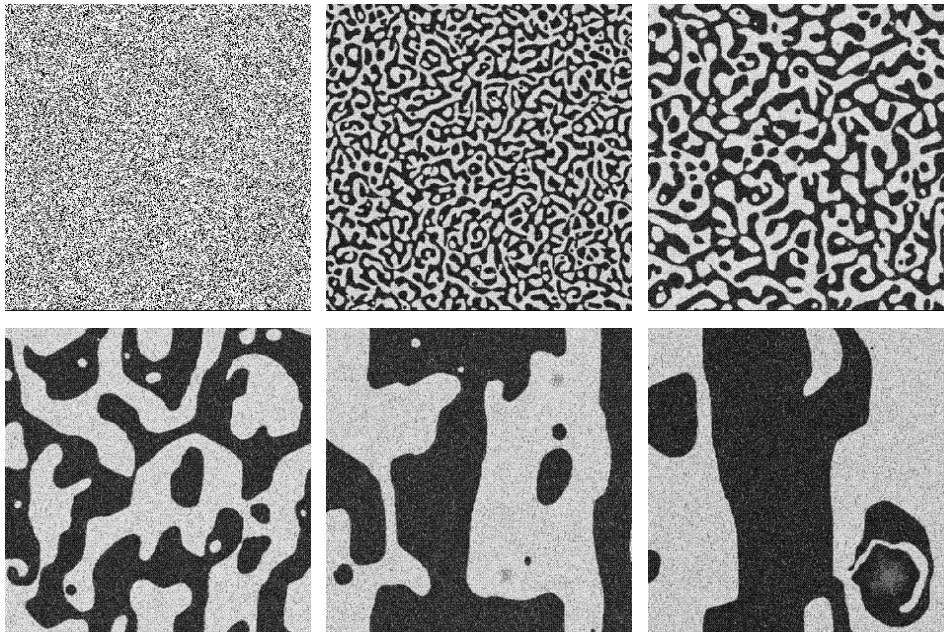


Abb. 1: Simulation mit gleichgroßen Phasenfraktionen

Im Berichtszeitraum wurde das Phänomen der spinodalen Dekomposition eines Gemisches aus einer weißen und einer schwarzen Phase untersucht. Dabei wurden die Kollisionen so modelliert, daß sich Partikel einer Farbe mit höherer Wahrscheinlichkeit in Richtung einer Mehrheit von Partikeln derselben Farbe bewegen als in die entgegengesetzte Richtung. Speziell wurden die Entmischungsregeln aus [1] verwendet.

Die Gittergas-Simulationen wurden mit einer hohen Anzahl an Restpartikeln durchgeführt. Durch die dekompositiven Kollisionsregeln trat dabei ein Gittereinfluß auf: Die Phasengrenzen richteten sich bevorzugt orthogonal zu den Gitterverbindungen aus. Dieser Effekt war nicht bei kleinen entmischten Bereichen zu beobachten.

Die folgenden Simulationen wurden unter Verwendung der Entmischungsregeln aus [1] mit

periodischen Randbedingungen auf einem triangulären  $700 \times 800$ -Knoten-Gitter mit ca.  $10^7$  Partikeln gerechnet.

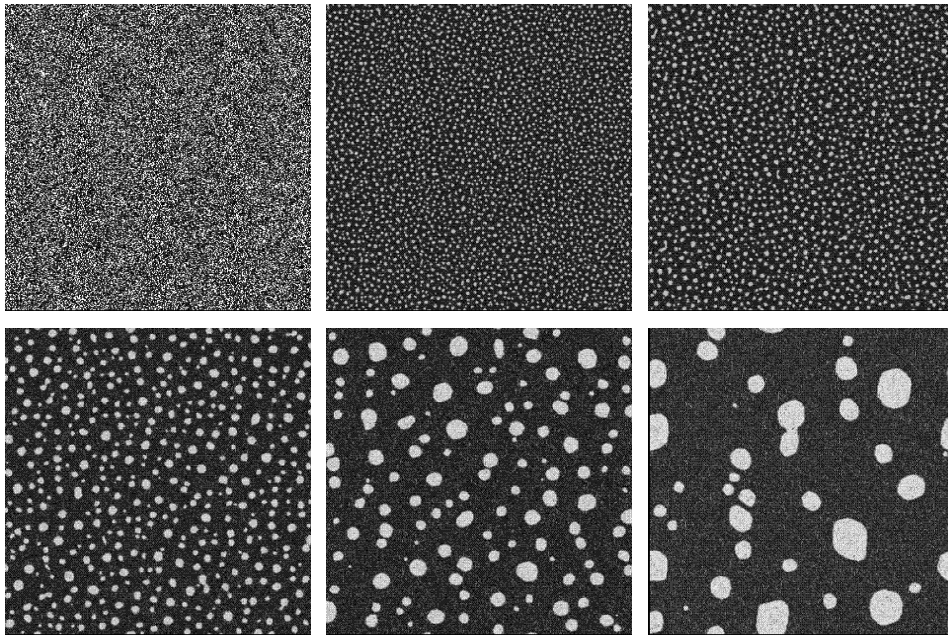


Abb. 2: Simulation mit Phasenanteilen im Verhältnis 1:6

### Literatur

1. A. K. GUNSTENSEN, D. H. ROTHMANN, „A Galilean-invariant immiscible lattice gas“ in *Physica D* 47, (1991) p. 53.

## Stabilität von Verdichtersystemen – Mathematische Aspekte

**Bearbeiter:** J. Förste, W. Höppner

**Kooperation:** J. Anders, BMW Rolls-Royce AeroEngines, Dahlewitz

**Förderung:** Förderantrag wird zur Zeit bearbeitet

Ausgangspunkt des Projektes sind Verdichtersysteme, wie sie in Turbomaschinen, insbesondere in Triebwerken, Anwendung finden. Die Betriebssicherheit solcher Systeme wird durch Instabilitäten eingeschränkt. Dazu gehören das Verdichterpumpen („surge“) und die rotierende Ablösung („rotating stall“).

Zur Modellierung dieser Phänomene wird von den Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie ausgegangen, die wegen der Komplexität der Vorgänge durch zusätzliche Annahmen häufig stark vereinfacht werden. In den einfachsten Situationen führt dies auf kleinere Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen, die in der vorliegenden Literatur bereits gründlich diskutiert wurden.

In neuerer Zeit (vgl. [1]) ist man zu einer komplexen Modellierung von Verdichtungssystemen übergegangen. Das Ziel besteht darin, Verfahren zu entwickeln, die es gestatten, instationäres Verhalten wie Pumpen und rotierende Ablösung aktiv zu steuern. Ein erster Schritt in Richtung auf dieses Ziel ist es, festzustellen, bei welchen Parameterwerten Instabilität einsetzt (Eigenwertproblem). Hinsichtlich der Kraftterme in den Bilanzgleichungen ist man auf Messungen angewiesen.

Das System der Erhaltungsgleichungen wird zweckmäßigerweise räumlich diskretisiert. Auf diesem Wege lassen sich in natürlicher Weise die verschiedenen Komponenten des Verdichtungssystems erfassen.

An dieser Stelle setzen auch die seit Anfang 1995 laufenden Arbeiten zum vorliegenden Projekt ein. Es werden Modelle studiert, in denen die Strömungen in den Leitungen der Verdichtersysteme detailliert behandelt werden. Dies führt auf nichtlineare hyperbolische Systeme partieller Differentialgleichungen, die sich aus dem hydraulischen Modell für kompressible Rohrströmungen herleiten. Besonderheiten liegen u.a. im Auftreten von Quelltermen und zeitabhängigen Randbedingungen. Für diese Systeme wurden Differenzenverfahren implementiert und erprobt.

Es wurde auch das Eigenwertproblem betrachtet. Seine Lösung konnte im isentropen Fall auf die klassischen Algorithmen für symmetrische Eigenwertprobleme zurückgeführt werden.

Die Software wurde in C geschrieben und läuft unter UNIX.

## Literatur

1. O. O. BADMUS, S. CHOWDHURY, K. M. EVEKER, C. N. NETT, *Control-Oriented High-Frequency Turbomachinery Modeling: Single-Stage Compression System One-Dimensional Model*, Journal of Turbomachinery, vol. 117 (1995), 47–61.



## Simulation von Ladungstransport mit dem Drift-Diffusionsmodell

**Bearbeiter:** H. Gajewski, R. Nürnberg

**Kooperation:** Gruppe Prozeßintegration des Instituts für Halbleiterphysik Frankfurt/Oder;  
D. Schipanski, Institut für Festkörperelektronik der Technischen Universität Ilmenau;  
Gruppe Simulationstechnik des Fraunhofer-Instituts für Mikroelektronische Schaltungen und Systeme, Institutsteil Dresden;  
E. Schöll, Institut für Theoretische Physik der Technischen Universität Berlin;  
W. Gerlach, Institut für Werkstoffe der Elektrotechnik der Technischen Universität Berlin;  
Nathan S. Lewis, California Institute of Technology, Division of Chemistry and Chemical Engineering

Das von der Gruppe entwickelte Programmsystem **ToSCA** zur numerischen Simulation von Ladungstransportvorgängen in Halbleitern auf der Basis des Drift-Diffusionsmodells wurde in enger Kooperation mit den genannten Partnern im Hinblick auf neue physikalische Effekte weiterentwickelt:

### Heiße Ladungsträger (Verbesserung des Avalanche-Modells)

Im Rahmen des BMBF-Forschungsschwerpunktes „Nanoelektronik“ wird am IHP ein hochleistungsfähiger Silizium-Germanium-Heterobipolar-Transistor (HBT) entwickelt. Bei hohen Feldstärken kommt es in elektronischen Bauelementen zu einer Ladungsträgererhitzung und infolgedessen zu einer lawinenartigen Ladungsträgergeneration. Das Betriebsregime und die Lebensdauer von MOS- und Bipolartransistoren werden entscheidend durch die Wirkung dieser sogenannten „heißen“ Elektronen begrenzt. Eine optimale Gestaltung der Halbleiterstrukturen mit dem Ziel hoher Zuverlässigkeit erfordert, diese Effekte mit den Simulationsprogrammen ausreichend gut nachzubilden. Experimente wiesen darauf hin, daß die Avalanche-Generation (Stoßionisation) in räumlich stark veränderlichen Feldern deutlich überschätzt wird, wenn in das Modell der lokale Wert der elektrischen Feldstärke eingeht, d. h. in den Kontinuitätsgleichungen für Elektronen und Löcher ein Generationsterm der folgenden Form berücksichtigt wird [2]:

$$g = \alpha_n |J_n| \exp(-\beta_n/E_n) + \alpha_p |J_p| \exp(-\beta_p/E_p).$$

Dabei sind  $\alpha_n, \beta_n, \alpha_p, \beta_p$  positive Koeffizienten und

$$E_n = (E, J_n)/|J_n| \text{ bzw. } E_p = (E, J_p)/|J_p|$$

die Projektionen des elektrischen Feldstärkevektors  $E$  auf die Stromvektoren  $J_n$  bzw.  $J_p$ . Dieses Verhalten ist auf den im Vergleich zu einem steilen Potentialanstieg verzögerten Energiegewinn der Ladungsträger zurückzuführen. Durchbruchspannungen konnten so nicht hinreichend genau berechnet werden. Diese Schwierigkeiten lassen sich mit Hilfe eines vereinfachten Energie-Modells überwinden. Zur Beschreibung des Lawineneffekts wurde die lokale Feldstärke durch von den Ladungsträgertemperaturen  $T_n$  bzw.  $T_p$  abhängende Ausdrücke

$$E_n(T_n) = \frac{5}{2} u_t (T_n - 1) / \lambda_n, \text{ bzw. } E_p(T_p) = \frac{5}{2} u_t (T_p - 1) / \lambda_p$$

ersetzt. Dabei sind  $\lambda_n$  bzw.  $\lambda_p$  Energierelaxationslängen und die Temperaturen  $T_n$  bzw.  $T_p$  Lösungen der (vereinfachten [4]) Energiebilanzgleichungen [1,3]

$$-\nabla \cdot (u_t \mu_n n \nabla T_n + T_n J_n) + (T_n - 1) |J_n| / \lambda_n = \frac{2}{5} (J_n, E) / u_t,$$

bzw.

$$-\nabla \cdot (u_t \mu_p p \nabla T_p + T_p J_p) + (T_p - 1) |J_p| / \lambda_p = \frac{2}{5} (J_p, E) / u_t,$$

bei geeigneten Randbedingungen. Dabei ist:

$$u_t = \frac{kT_0}{q}, \quad k = \text{Boltzmannkonstante}, \quad q = \text{Elementarladung}, \quad T_0 = \text{Gittertemperatur}.$$

Die Abbildung 2 zeigt die deutlichen Abweichungen bei der Simulation des Durchbruchverhaltens eines Bipolartransistors, wenn an Stelle der Feldstärke die Elektronentemperatur tritt, die eine nichtlokale Aufheizung der Ladungsträger beschreibt.

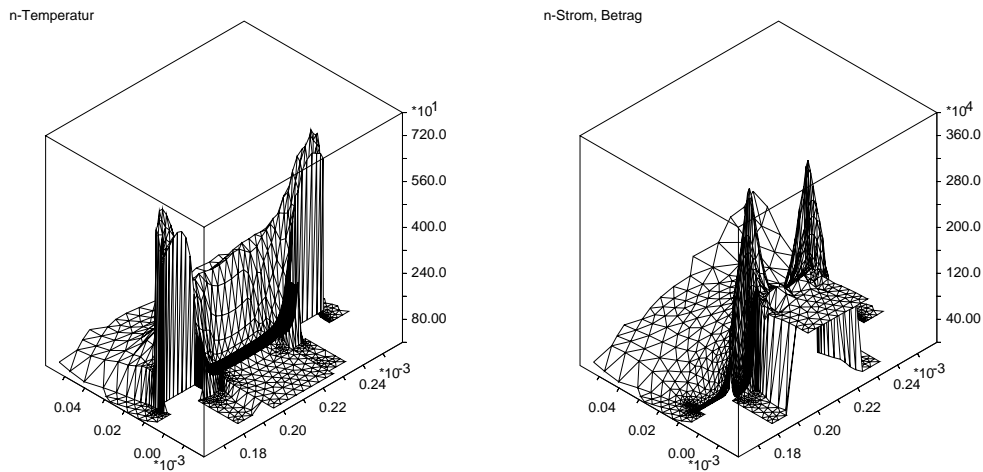


Abb. 1: Lokale Verteilung der Elektronen-Temperatur und des Avalanche-Stroms bei einer Hetero-Bipolar-Transistor-Struktur

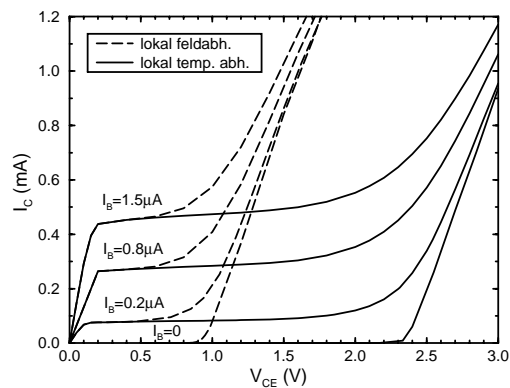


Abb. 2: Ausgangskennlinie eines Bipolartransistors mit und ohne Berücksichtigung heißer Elektronen

### Tiefe Störstellen (Trapmodell)

Das Drift-Diffusionsmodell des Ladungstransports wurde im Hinblick auf tiefe Störstellen (traps) im Volumen und auf Grenzflächen erweitert. Der Einfang von Ladungen und die Generations-/Rekombinationsvorgänge an diesen räumlich verteilten Zentren führen unter Gleichgewichtsbedingungen zu der bekannten Shockley-Read-Hall-Formel. Diese setzt voraus, daß die Relaxationszeit der Umladeprozesse an den tiefen Störstellen kleiner ist als die Zeitskalen der sonstigen elektrischen oder thermischen Vorgänge. Im allgemeinen ist das aber nicht der Fall, und das wird insbesondere in den Meßmethoden zur Charakterisierung der tiefen Zentren ausgenutzt. Für akzeptorartige Störstellen im Volumen lauten die erweiterten Gleichungen:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\epsilon \nabla u) &= D + p - n - N_a f_a, \\ dn/dt - \nabla \cdot J_n &= G + N_a s_n [f_a e_n - (1 - f_a) n], \\ dp/dt + \nabla \cdot J_p &= G + N_a s_p [(1 - f_a) e_p - f_a p], \\ df_a/dt + z f_a &= z f. \end{aligned}$$

Dabei haben die neueingeführten Größen folgende Bedeutung:

$$\begin{aligned} z &= s_n(n + e_n) + s_p(p + e_p), \\ f &= 0.5[1 + (s_n(n - e_n) - s_p(p - e_p))/z], \\ e_n &= n_i \exp(-e_r), \quad e_p = n_i \exp e_r, \\ e_r &= \frac{E_i - E_t}{kT_0}, \\ E_i &= \text{Intrinsic - Fermi - Energie}, \quad E_t = \text{Energieniveau der traps}, \\ N_a &= \text{Akzeptordichte}, \quad s_{n,p} = \text{Einfangkoeffizienten}. \end{aligned}$$

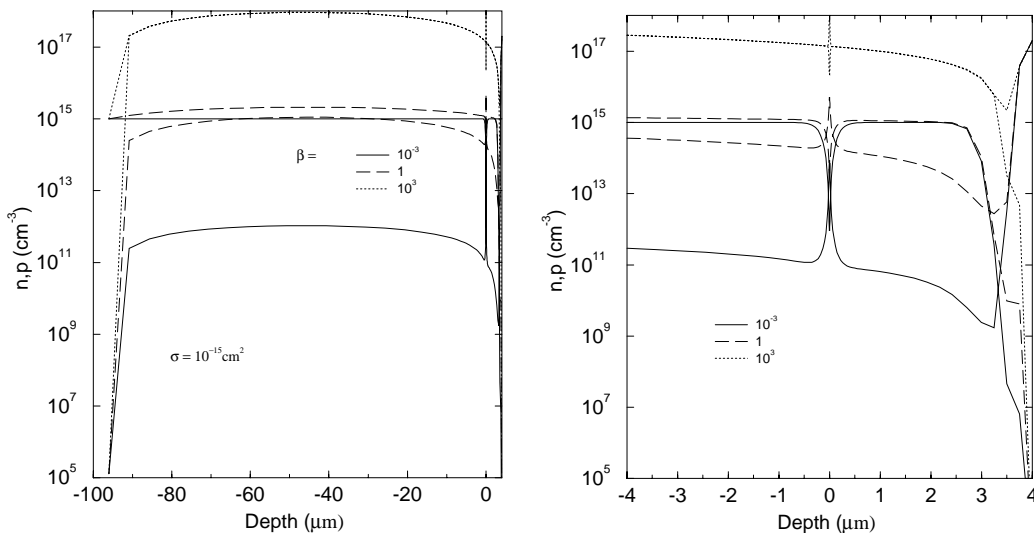


Abb. 3: Elektronen- und Löcherkonzentration entlang einer Schnittlinie ohne (links) und mit (rechts) tiefen Störstellen bei zusätzlicher Generation von Elektronen-Loch-Paaren

Die Abbildung 3 zeigt Schnittbilder durch ein Gebiet mit lokal sehr hoher Störstellendichte bei unterschiedlich starker Generation von Ladungen. Der Einfang der Überschußladungen ist deutlich an den Spitzen der Dichteverteilungen zu erkennen. Dies führt zu einem lokal eng begrenzten Anstieg der Rekombination.

#### **Photolumineszenz (Photokorrosions-Modell)**

In Zusammenarbeit mit dem California Institute of Technology, Division of Chemistry and Chemical Engineering, wurde das in **ToSCA** realisierte Modell zur Simulation der zeitaufgelösten Band-Band-Photolumineszenz an Halbleiter/Elektrolyt-Kontakten weiterentwickelt.

Mit dem Programm konnten verschiedenartigste experimentelle Ergebnisse zum Ladungstransfer an der Grenzfläche Halbleiter/Elektrolyt durch Simulation qualitativ analysiert und Systemparameter quantitativ ermittelt werden. Als Festkörper stehen Silizium und Indiumphosphid im Mittelpunkt des Interesses und als Elektrolyt verschiedene Redoxpaare in Methanol. Insbesondere wurde der Einfluß der Geschwindigkeit von Ladungstransfer und Oberflächenrekombination auf unterschiedliche Meßgrößen untersucht:

- Strom-Spannungs-Kennlinien mit und ohne Beleuchtung,
- Photolumineszenzintensität-Spannungs-Kurven,
- Photolumineszenzabklingkurven als Funktion der angelegten Spannung,
- Mikrowellenreflektivität als Funktion der angelegten Spannung und
- quasi-Fermienergieaus.

#### **Literatur**

1. G. ALBINUS, *Über ein Energiemodell des Ladungsträgertransports in Halbleitern*, Z. Angew. Math. Mech. 74 (1993), 6, T623-624.
2. J. FREHSE, J. NAUMANN, *Existence of weak solutions to the stationary semiconductor equations with Avalanche generation*, Bonner Math. Schriften 258, (1994), 3-17, Eds. J. Frehse, H. Gajewski.
3. H. C. DE GRAAFF, F. M. KLAASEN, *Compact transistor modelling for circuit design*, Springer-Verlag (1990), 13 ff.
4. J. W. SLOTBOOM, *Simplified energy balance equations*, IEDM 91, 127 ff.
5. R. E. KUNZ, E. SCHÖLL, H. GAJEWSKI, R. NÜRNBERG, *Low-temperature impurity breakdown in semiconductors: An approach towards efficient device simulation*, Solid States Electronics **39**, 1996.

## Modellierung und 2D-Simulation von Quantum-Well-Halbleiterlasern unter Einbindung des Schrödinger-Poisson-Systems

**Bearbeiter:** H. Gajewski, H.-Chr. Kaiser, J. Rehberg, H. Stephan

**Kooperation:** H.-J. Wünsche, Institut für Physik, Humboldt-Universität zu Berlin;  
P. Kleinert, Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik Berlin;  
W. Heinrich, H. Wenzel, Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik, Berlin

**Förderung:** BMBF-Förderprogramm „Anwendungsorientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik“

Halbleiterlaser sind wegen ihrer Kompaktheit und Effizienz als Quelle kohärenter Strahlung weit verbreitet. Sie sind z. B. in jedem CD-Spieler als Abtastlaser (Emissionswellenlänge 780 nm) zu finden und spielen bei der Langstrecken-Nachrichtenübertragung über Glasfaserkabel als Sendelaser (Emissionswellenlängen 1300 und 1550 nm) eine entscheidende Rolle.

Gegenwärtig wird weltweit intensiv an der Verbesserung bestehender und der Entwicklung neuer Laserstrukturen gearbeitet. So versucht man, mit Halbleiterlasern immer kürzere Wellenlängen bis in den blauen Spektralbereich und immer höhere Ausgangsleistungen von mehr als einem Watt zu erzeugen. Vollkommen neue Strukturen stellen vertikal emittierende Laserdioden dar. Ziel des Projektes ist die Unterstützung der Praxispartner bei der Entwicklung derartiger Bauelemente.

In Quantum-Well-Halbleiterlasern ist die aktive Schicht so dünn, daß Quanteneffekte berücksichtigt werden müssen. Zur Beschreibung solcher Effekte ist das Schrödinger-Poisson-System geeignet. Dieses System ist ein nichtlinear gekoppeltes System partieller Differentialgleichungen bestehend aus der Schrödingergleichung (Bestimmung der möglichen Zustände der Ladungsträger und deren Besetzungswahrscheinlichkeiten), der Poissongleichung (Bestimmung des von den Ladungsträgern erzeugten elektrischen Feldes) und Transportgleichungen (Berechnung der Umverteilung der Ladungsträger). Die analytischen und numerischen Untersuchungen zu diesem System wurden in diesem Jahr fortgesetzt.

Über die in [1] erzielten Resultate hinaus, gelang es in diesem Jahr, für den physikalisch relevanten Fall mit Austausch-Korrelationspotential  $V_{xc}$  folgendes zu beweisen ( $n$  ist die Elektronendichte):

**Lemma 1.** Die dem Austausch-Korrelations-Term der Schrödinger-Gleichung entsprechende Abbildung  $V_{xc} : L^1 \mapsto L^2$  bilde die Menge  $\{n \mid 0 \leq n, \int n(x)dx = N\}$  in eine  $L^2$ -beschränkte Menge ab. Dann hat das Schrödinger-Poisson-System eine Lösung.

**Lemma 2.** Bildet überdies  $V_{xc}$  die Menge  $H^1 \cap \{n \mid n|_{\Gamma} = 0, 0 \leq n \leq M\}$  für ein hinreichend großes, von den Daten des Problems abhängiges  $M$  Lipschitz-stetig in  $H^1$  ab und ist die Lipschitz-Konstante dieser Abbildung hinlänglich klein, so ist die Lösung des Schrödinger-Poisson-Systems sogar eindeutig bestimmt (z. B. im Fall kleiner Kopplungskonstanten).

Des weiteren wurden verschiedene numerische Probleme untersucht. Unter anderem die Abhängigkeit der Eigenwerte und Eigenfunktionen des Schrödingeroperators von den Ansatzfunktionen und von der Wahl des Quantengebietes.

Mit dem von uns entwickelten 2D-Bauelementesimulator **ToSCA** wurden verschiedene praktisch relevante Hochleistungslaserdioden bezüglich eines minimalen Verluststromes optimiert. Die folgenden Bilder (aus [5]) zeigen die Simulation ausgewählter Strukturen (jeweils links die

Intensität des optischen Feldes der Lasergrundmode und rechts das Quasiferminiveau der Löcher an der Laserschwelle).

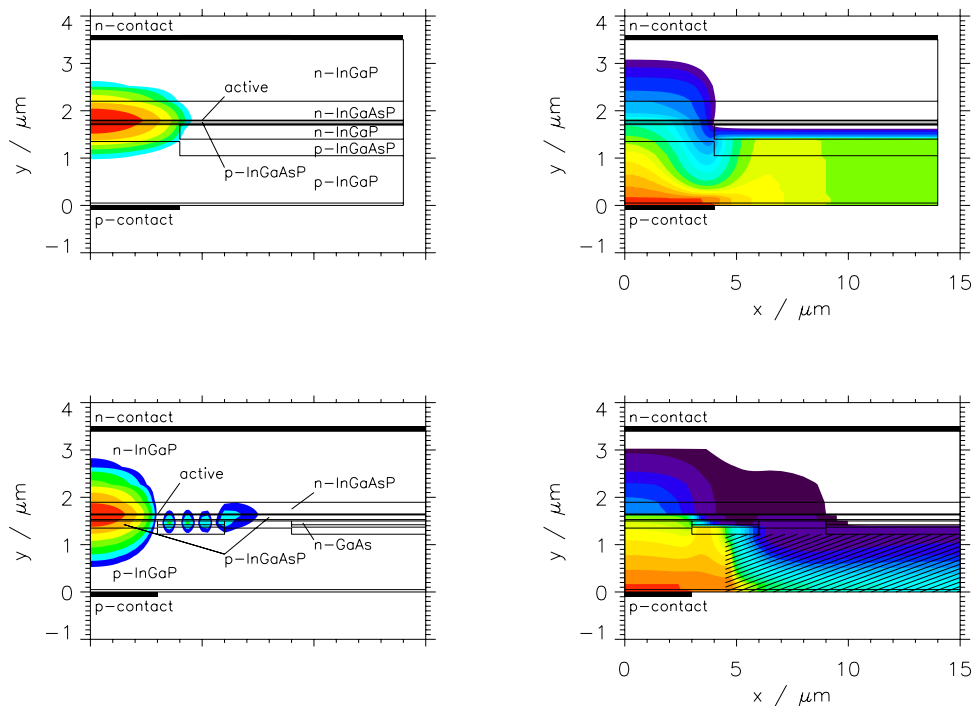


Abb. 1: Querschnitte eines RISAS-Lasers (oben) und eines ARROW-Lasers

## Literatur

1. G. ALBINUS, *On the discretization of a stationary Schrödinger-Poisson system*; H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, *On stationary Schrödinger-Poisson equations modelling an electron gas with reduced dimension*, WIAS-Preprint 66, Berlin, 1993.
2. H. GAJEWSKI, *Analysis und Numerik des Ladungsträgertransports in Halbleitern*, GAMM-Mitteilungen, Band 16, 1993.
3. H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, *On stationary Schrödinger-Poisson equations*, ZAMM, Band 75, 1995.
4. J. REHBERG, H.-CHR. KAISER, *About a Stationary Schrödinger-Poisson System Modeling Quantum Structures*, in *Proceedings of The Fourth International Seminar on Simulation of Devices and Technologies, ISSDT'95*, Berg-en-Dal, South Africa, 15 – 17 November 1995.
5. H. WENZEL, G. ERBERT, *Simulation of single-mode high-power semiconductor lasers*, STIE Physics and Simulation of optoelectronic devices IV, vol. 2693, 1996.
6. H. GAJEWSKI, H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, H. STEPHAN, H. WENZEL, *Modellierung und Simulation von Quantum-Well-Halbleiterlasern*, in Vorbereitung.

## Elektro-Reaktions-Diffusionssysteme in Heterostrukturen

**Bearbeiter:** A. Glitzky, K. Gröger, R. Hünlich

**Kooperation:** Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder) GmbH (IHP)

Wir behandeln im folgenden Gleichungen, die die Umverteilung elektrisch geladener Spezies in Heterostrukturen durch Diffusion und Reaktionen unter Berücksichtigung ihrer elektrischen Wechselwirkung beschreiben. Derartige Probleme entstehen beispielsweise bei der Modellierung von technologischen Prozessen zur Herstellung von Halbleiterbauelementen. Einen Überblick über derartige Modellgleichungen findet man in [9].

Ein vor allem in Simulationsprogrammen häufig benutzter Weg zur Modellierung elektrischer Wechselwirkungen ist die Annahme der lokalen Elektroneutralität. Unter dieser Annahme haben wir in [2] ein Modell mit nur einer Sorte geladener Fremdatome behandelt. Die eindeutige Lösbarkeit der Modellgleichungen, die globale Beschränktheit der Lösungen und deren exponentielles Streben zum Gleichgewicht sind nachgewiesen worden. Analoge Aussagen haben wir für ein implizites und ein semiimplizites Zeitdiskretisierungsschema erhalten. Die Konvergenz dieser Schemata ist begründet worden.

Ein anderer Weg zur Modellierung elektrischer Wechselwirkungen, der nun besprochen werden soll, besteht darin, das innere elektrische Feld mit Hilfe der Poisson-Gleichung zu berechnen. Ein allgemeines Modell für beliebig viele elektrisch geladene Spezies in Heterostrukturen führt auf ein Elektro-Reaktions-Diffusionssystem mit nichtglatten Daten. Wir bezeichnen mit  $u_i$ ,  $\zeta_i$ ,  $i = 1, \dots, m$ , die Konzentration und das elektrochemische Potential der  $i$ -ten Spezies. Das zu untersuchende Differentialgleichungssystem besteht aus  $m$  Kontinuitätsgleichungen gekoppelt mit der Poisson-Gleichung für das elektrostatische Potential  $v_0$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_i}{\partial t} - \nabla \cdot (D_i u_i \nabla \zeta_i) + R_i &= 0, \quad \text{in } \mathbb{R}_+ \times \Omega, \\ \mathbf{v} \cdot (D_i u_i \nabla \zeta_i) + R_i^\Gamma &= 0, \quad \text{auf } \mathbb{R}_+ \times \Gamma, \quad u_i(0) = U_i \quad \text{in } \Omega; \\ -\nabla \cdot (\varepsilon \nabla v_0) &= f + \sum_{i=1}^m q_i u_i \quad \text{in } \mathbb{R}_+ \times \Omega, \\ \mathbf{v} \cdot (\varepsilon \nabla v_0) + \tau v_0 &= f^\Gamma \quad \text{auf } \mathbb{R}_+ \times \Gamma. \end{aligned}$$

Dabei sind  $R_i$  bzw.  $R_i^\Gamma$  die Reaktionsraten im Volumen bzw. am Rand, die ausgehend vom Massenwirkungsgesetz in der Form

$$R_i = \sum_{(\alpha, \beta)} k_{\alpha\beta} \left( \prod_{k=1}^m e^{\zeta_k \alpha_k} - \prod_{k=1}^m e^{\zeta_k \beta_k} \right) (\alpha_i - \beta_i)$$

angesetzt werden. Hierbei bezeichnen  $\alpha$  und  $\beta$  die stöchiometrischen Vektoren der entsprechenden Reaktionen. Für den Zusammenhang zwischen Konzentrationen und Potentialen wird im betrachteten Modell die Boltzmann-Statistik angenommen. Die Untersuchungen erfolgen für den räumlich zweidimensionalen Fall, da Beschränktheitsaussagen für die Lösungen elliptischer Gleichungen von Gröger [8] in der Form, wie sie hier benötigt werden, nur im Zweidimensionalen verfügbar sind. Diese Beschränkung der Raumdimension ermöglicht uns aber das Anwenden und Erweitern von Einbettungsergebnissen von Trudinger [10].

Unter gewissen Forderungen an die Anfangswerte  $U_i$  und die Struktur des Reaktionssystems besitzt die Aufgabe genau einen stationären Zustand innerhalb einer Kompatibilitätsklasse, die durch den Anfangswert charakterisiert wird. Zum Beweis werden Aussagen der konvexen Analysis für Minimumprobleme strikt konvexer Funktionale herangezogen.

Ausgangspunkt für die Untersuchungen des instationären Problems sind physikalisch motivierte Abschätzungen der freien Energie

$$F(u) = \int_{\Omega} \left\{ \frac{\varepsilon}{2} |\nabla v_0|^2 + \sum_{i=1}^m \left\{ u_i \left( \ln \frac{u_i}{\bar{u}_i} - 1 \right) + \bar{u}_i \right\} \right\} dx + \int_{\Gamma} \frac{\tau}{2} v_0^2 d\Gamma.$$

Zunächst wird gezeigt, daß die freie Energie entlang von Trajektorien des Systems monoton fällt. Ein wesentliches, neues Resultat ist eine Abschätzung der freien Energie nach oben durch die Energiedissipationsrate

$$D = \sum_{i=1}^m \left\{ \int_{\Omega} \left\{ D_i u_i |\nabla \zeta_i|^2 + R_i \zeta_i \right\} dx + \int_{\Gamma} R_i^{\Gamma} \zeta_i d\Gamma \right\},$$

wie sie von uns in [4] unter gewissen Voraussetzungen an das Reaktionssystem, die für relevante Probleme aus der Halbleitertechnologie erfüllt sind, bewiesen worden ist. Derartige Abschätzungen für Reaktions-Diffusionssysteme mit ungeladenen Spezies gehen auf Gröger [7] zurück. In [3] erweitern wir die bisherigen Ergebnisse auf allgemeinere Statistiken, Stromrelationen und Reaktionsterme sowie auf eine nichtlineare Poisson-Gleichung.

Als Folgerung der Abschätzung der freien Energie durch die Energiedissipationsrate erhält man, daß die freie Energie entlang von Trajektorien des Systems exponentiell zu ihrem Gleichgewichtswert fällt, was die Stabilität des thermodynamischen Gleichgewichts bedeutet. Analoge Resultate sind auch für ein implizites Zeitdiskretisierungsschema nachgewiesen worden (siehe [4]).

Dabei sei betont, daß die bisherigen Aussagen ohne die Kenntnis von a priori-Schranken für Konzentrationen und Potentiale bewiesen werden. Im Gegenteil, wir verwenden diese Energieabschätzungen, um unter zusätzlichen Annahmen über die Positivität der Anfangswerte und über die Reaktionsordnung solche a priori-Abschätzungen zu gewinnen. Zunächst folgert man aus der globalen Beschränktheit der freien Energie mit Hilfe der Moser-Technik wie in [1] globale a priori-Abschätzungen für die Konzentrationen nach oben. Danach können wir, im Unterschied zu [1], aus dem exponentiellen Fallen der freien Energie schließen, daß die  $L^1$ -Norm von  $\ln u_i$ ,  $i = 1, \dots, m$ , global beschränkt ist. Durch Moser-Iteration kann damit die globale Beschränktheit der Konzentrationen nach unten durch eine positive, nur von den Daten des Problems abhängende Konstante gezeigt werden.

Um die Lösbarkeit der Aufgabe festzustellen, regularisieren wir das Problem durch ein „Abschneiden“ der Nichtlinearitäten in geeigneter Weise. Wir finden a priori-Abschätzungen für dieses regularisierte Problem, die nicht von dem Abschneidelevel abhängen, so daß Lösungen der regularisierten Aufgabe gleichzeitig Lösungen des Ausgangsproblems sind, wenn das Abschneidelevel hinreichend groß ist. Die Lösbarkeit der regularisierten Aufgabe wird über Zeitdiskretisierung und einen Auswahlssatz bewiesen. Wir erhalten die eindeutige Lösbarkeit unseres Problems, wobei für den Beweis der Einzigkeit  $W^{1,p}$ -Regularitätsaussagen für elliptische Gleichungen von Gröger [6] verwendet werden. Diese Aussagen zur Existenz, Eindeutigkeit und zu globalen Abschätzungen von Lösungen der Aufgabe wurden in [5] zusammengestellt.



**Literatur**

1. H. GAJEWSKI, K. GRÖGER, *Reaction-diffusion processes of electrically charged species*, WIAS-Preprint 118, Berlin, 1994.
2. A. GLITZKY, K. GRÖGER, R. HÜNLICH, *Discrete-time methods for equations modelling transport of foreign-atoms in semiconductors*, erscheint in *Nonlinear Analysis*.
3. ———, *Free energy and dissipation rate for reaction diffusion processes of electrically charged species*, eingereicht bei *Applicable Analysis*.
4. A. GLITZKY, R. HÜNLICH, *Energetic estimates and asymptotics for electro-reaction-diffusion systems*, eingereicht bei *Z. Angew. Math. Mech.*
5. ———, *Electro-reaction-diffusion systems for heterostructures*, eingereicht bei *Proc. FBP'95*.
6. K. GRÖGER, *A  $W^{1,p}$ -estimate for solutions to mixed boundary value problems for second order elliptic differential equations*, *Math. Ann.*, 283 (1989), pp. 679–687.
7. ———, *Free energy estimates and asymptotic behaviour of reaction-diffusion processes*, IAAS-Preprint 20, Berlin, 1992.
8. ———, *Boundedness and continuity of solutions to second order elliptic boundary value problems*, *Nonlinear Anal.*, 26 (1996), pp. 539–549.
9. A. HÖFLER, N. STRECKER, *On the coupled diffusion of dopants and silicon point defects*, Technical Report 94/11, ETH Integrated Systems Laboratory, Zurich, 1994.
10. N.S. TRUDINGER, *On imbeddings into Orlicz spaces and some applications*, *J. of Mathematics and Mechanics*, 17 (1967), pp. 473–483.

## Lokale Existenz und Einzigkeit von Lösungen nichtglatter parabolischer Systeme zweiter Ordnung

**Bearbeiter:** K. Gröger, J. Rehberg

**Kooperation:** M. Böhm, Humboldt-Universität zu Berlin

Es wurden Untersuchungen zur Existenz und Einzigkeit für Lösungen von quasilinearen parabolischen Systemen des Typs

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} + \sum_{k=1}^n A_{jk}(u, u_k) = G_j(u), \quad j = 1, \dots, n,$$

$u = (u_1, \dots, u_n)$  durchgeführt. Die  $A_{jk}(u, \cdot)$  sind lineare Differentialoperatoren zweiter Ordnung mit entsprechenden Randbedingungen, deren Koeffizienten wiederum von der Lösung abhängen. Die Operatoren  $G_j$ 's sind den  $A_{j,k}$  in gewissem Sinne untergeordnet und können sehr unterschiedlicher Natur sein; u.a. sind die Driftstrom-Terme sowohl der Halbleiter- wie der Chemotaxisgleichungen zugelassen. Das Bestreben besteht nun gerade darin, für eine sehr große Klasse von Gleichungen, darunter solche wie die Chemotaxis-Gleichungen, für die keine a-priori-Energieabschätzungen existieren, eine möglichst allgemeine, lokale Lösungstheorie bereitzustellen. Das Hauptproblem dabei ist, daß man – über bekannte Ergebnisse hinaus – mit Konstellationen konfrontiert ist, die sowohl starke Nichtlinearitäten aufweisen als auch sehr „unglatt“ sind. Dies betrifft einerseits die Geometrie der Gebiete und die Tatsache, daß der Typ der Randbedingung wechselt, wie auch die Eigenschaft der Koeffizienten, definitiv unstetig zu sein. Das Konzept der Behandlung dieser Gleichungen besteht darin, sie im Rahmen von  $L^q(S; W^{1,p}) \cap W^{1,q}(S; W^{-1,p})$ -Räumen anzuschauen und zwar dergestalt in  $p$  und  $q$ , daß diese Räume stetige Einbettungen in (raum-zeitliche) Hölder-Räume zulassen. Über einer Kugel in  $L^q(S; W^{1,p}) \cap W^{1,q}(S; W^{-1,p}) \cap \{u/u(0) = 0\}$  wird dann ein geeignetes, kontraktives Iterationsschema definiert, das die zeitlich lokale Existenz und Einzigkeit sichert. Anzumerken ist noch, daß das hier verfolgte Vorgehen in voller Allgemeinheit nur für die Raumdimension zwei funktioniert, im Falle höherer Raumdimension müssen bestimmte Kleinheitsforderungen gestellt werden, die nicht stets erfüllt sind.

### Literatur

1. H. AMANN, *Quasilinear evolution equations and parabolic systems*, Trans. Amer. Math. Soc. **293** (1986), 191–227.
2. ———, *Dynamic theory of quasilinear parabolic equations – II, Reaction-diffusion systems*, Diff. Int. Equ. **3** (1990), 13–75.
3. G. DORE,  *$L^p$  Regularity for Abstract Differential Equations*, LNM **1540** (1991), 25–38.
4. M. GIAQUINTA AND G. MODICA, *Local existence for quasilinear parabolic systems under nonlinear boundary conditions*, Ann. Mat. Pura Appl. **149** (1987), 41–59.
5. K. GRÖGER, *A  $W^{1,p}$ -estimate for solutions to mixed boundary value problems for second order elliptic differential equations*, Math. Ann. **283** (1989), 679–687.

6. ———,  $W^{1,p}$ -estimates of solutions to evolution equations corresponding to nonsmooth second order elliptic differential operators, *Nonlinear Analysis* **18** (1992), 569–577.
7. K. GRÖGER, J. REHBERG, *Resolvent estimates in  $W^{-1,p}$  for second order elliptic differential operators in case of mixed boundary conditions*, *Math. Ann.* **285** (1989), 105–113.
8. W. JÄGER, ST. LUCKHAUS, *On explosions of solutions to a system of partial differential equations modelling chemotaxis*, *Trans. Amer. Math. Soc.* **329** (1992), 819–824.

## Mathematische Modellierung der Wärmebehandlung von Stahl

**Bearbeiter:** D. Hömberg, J. Sprekels

**Kooperation:** IST Impuls-Schweißtechnik GmbH, Ellerbek

**Förderung:** EU, HCM-Netzwerk „Phase Transitions and Surface Tension“

Ziel des Projektes ist die Kontrolle der Mikrostruktur von Stahl. In den vergangenen Jahren wurde ein Modell für Phasenübergänge in eutektoidem Stahl entwickelt und untersucht. In [1] und [2] wurden die für Anwender wesentlichen Resultate zusammengefaßt.

Im allgemeinen können während einer Wärmebehandlung fünf verschiedene Phasen auftreten: Austenit, Ferrit, Perlit, Bainit und Martensit. Die möglichen Übergänge zwischen diesen Phasen sind in Abb.1 dargestellt. Dabei bezeichnen  $d$  und  $nd$  einen diffusiven bzw. nicht-diffusiven Phasenübergang.

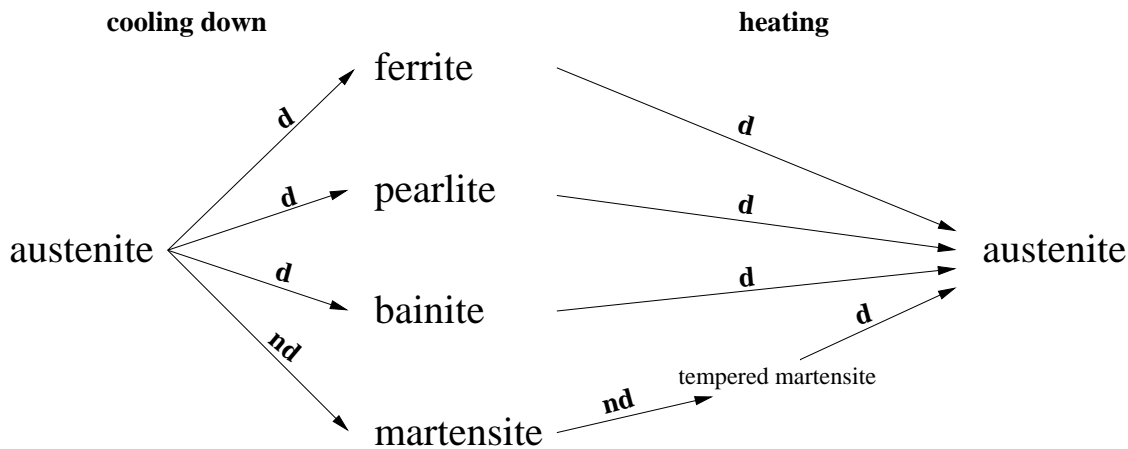


Abb. 1: Mögliche Phasenumwandlungen in Stahl

Unter der Annahme, daß Martensit beim Erhitzen direkt in Austenit umgewandelt wird, wurde in [3] ein erweitertes Modell formuliert, das alle auftretenden Phasenumwandlungen berücksichtigt. Damit sind wir in der Lage, einen kompletten Wärmebehandlungszyklus zu beschreiben.

Ein in der Praxis häufig verwendetes Verfahren ist die Induktionshärtung. Bei diesem Prozeß dient das zu härtende Werkstück als Sekundärspule eines Transformators. Aufgrund des Skineffekts werden auf dem Rand des Werkstücks Ströme induziert, die zu einer schnellen Erwärmung der Randschicht führen. Das Abschalten des Stroms bewirkt dann eine Selbstabkühlung und Oberflächenhärtung des Werkstücks.

Zur Modellierung dieses Prozesses müssen die Modellgleichungen zur Beschreibung der Phasenübergänge mit den Maxwellgleichungen gekoppelt werden. Vernachlässigt man den Verschiebungsstrom, ergibt sich im Zweidimensionalen ein System von zwei nichtlinearen parabolischen Differentialgleichungen, gekoppelt mit einem System gewöhnlicher Differentialgleichungen für die Phasenfraktionen. In [4] wird dieses Problem analytisch untersucht.

Für das nächste Jahr ist die numerische Implementierung dieses Modells in Kooperation mit der Firma IST Schweißtechnik geplant.

**Literatur**

1. D. HÖMBERG, *A numerical simulation of the Jominy end-quench test*, WIAS-Preprint No. 144, Berlin 1995, erscheint in *Acta Metallurgica et Materialia*.
2. ———, *Controlling the heat treatment of steel*, erscheint in *Proceedings SOR 95*.
3. ———, *An extended model for phase transitions in steel*, erscheint in *Proceedings FBP 95*.
4. D. HÖMBERG, J. SPREKELS, *Optimal control of induction hardening*, in Vorbereitung.

## **Zu einigen Problemen bei der Modellierung und Simulation von SiGe-Heterojunction-Bipolartransistoren**

**Bearbeiter:** R. Hünlich, A. Glitzky, J. Griepentrog, W. Röpke (IHP)

**Kooperation:** Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder) GmbH (IHP);  
Institut für Integrierte Systeme, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich (IIS)

**Förderung:** BMBF-Förderprogramm „Anwendungsorientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik“

Vielfältige Anwendungsmöglichkeiten in der Kommunikationstechnik (schnurlose Telefone, drahtlose lokale Netzwerke) und im Verkehrswesen (elektronische Maut- und Verkehrsleitsysteme, Autopiloten) stimulieren die Entwicklung von neuartigen Bauelementen der Nanoelektronik, den Silizium-Germanium-Heterojunction-Bipolartransistoren (SiGe-HBT's; siehe [2]). Schaltkreise mit derartigen Bauelementen könnten mit geringen Kosten und auf hohem Integrationsniveau auf der Grundlage der sicher beherrschten Silizium-Technologie hergestellt werden. Entwicklungsarbeiten zum SiGe-HBT bilden im Rahmen des LOTUS-Projektes einen Schwerpunkt am IHP. Hierbei ist es immer häufiger nötig, die notwendigen theoretischen und experimentellen Forschungsarbeiten, insbesondere auch einzelne Schritte des technologischen Prozesses, wegen ihrer zunehmenden Komplexität durch Simulation zu unterstützen. Am IHP werden hierzu u. a. die Technologiesimulatoren SUPREM [4] und vor allem DIOS [1] benutzt. Entsprechend der technologischen Weiterentwicklung sind die Simulatoren ständig sowohl bezüglich der Modelle als auch der Codes zur numerischen Lösung der entsprechenden Modellgleichungen zu verbessern. Dies setzt zugleich grundlegende Arbeiten zur mathematischen Behandlung der Modellgleichungen voraus.

Die im vorigen Jahr begonnenen Untersuchungen zur Modellierung der Diffusion von B in verspannten SiGe-Schichten wurden fortgesetzt. Die Identifikation der Modellparameter erforderte die Entwicklung neuer Verfahren zur Auswertung der SIMS-Messungen [3]. Vom IIS ist das Modell inzwischen in DIOS aufgenommen worden, so daß auf diesem Modellniveau Simulationen durchgeführt werden können. Es zeigte sich aber, daß mechanische Effekte eine große Rolle spielen und genauer berücksichtigt werden müssen. Deshalb sollen die Modelle durch Einbeziehung der Rückwirkung der Diffusion des Ge und möglicherweise des B sowie anderer Dotanden auf das mechanische Verhalten der Struktur erweitert werden. Die Diskussion um entsprechende Modellgleichungen und deren mathematische Eigenschaften hat begonnen. Eine umfangreiche Literaturrecherche zeigte, daß es hier Parallelen zu Aufgaben der Thermoelastizität, möglicherweise mit verallgemeinerten Randbedingungen in Form von Ungleichungen, gibt.

Weiterhin wurden Probleme behandelt, die auftreten, wenn Profile elektrisch geladener Dotanden mit sehr hohen Konzentrationen sehr eng benachbart sind. Hier taucht die Frage auf, ob durch deren elektrische Wechselwirkung zusätzliche Effekte entstehen und inwieweit diese durch die vorhandenen Simulationsprogramme beschrieben werden. Die z. B. auch in [1] benutzten SUPREM-3-Modelle sind im wesentlichen durch Versuche mit einzelnen Dotanden identifiziert worden, sagen aber für die beschriebene Situation kooperative Effekte (ambipolare Diffusion) voraus. Zur Klärung der Frage wurden am IHP gezielt Experimente durchgeführt.

Erste Auswertungen mit noch relativ geringer Meßgenauigkeit haben das Auftreten dieses Phänomens qualitativ bestätigt. Für eine quantitative Analyse wurden mit Hilfe von DIOS eine Reihe von Rechnungen durchgeführt. Eine einigermaßen zufriedenstellende Übereinstimmung mit den gemessenen und geeignet reduzierten Daten ergab sich nur dann, wenn einige der Diffusionsparameter (insbesondere für As und P) gegenüber den Standardwerten geändert wurden, siehe Abb. 1.

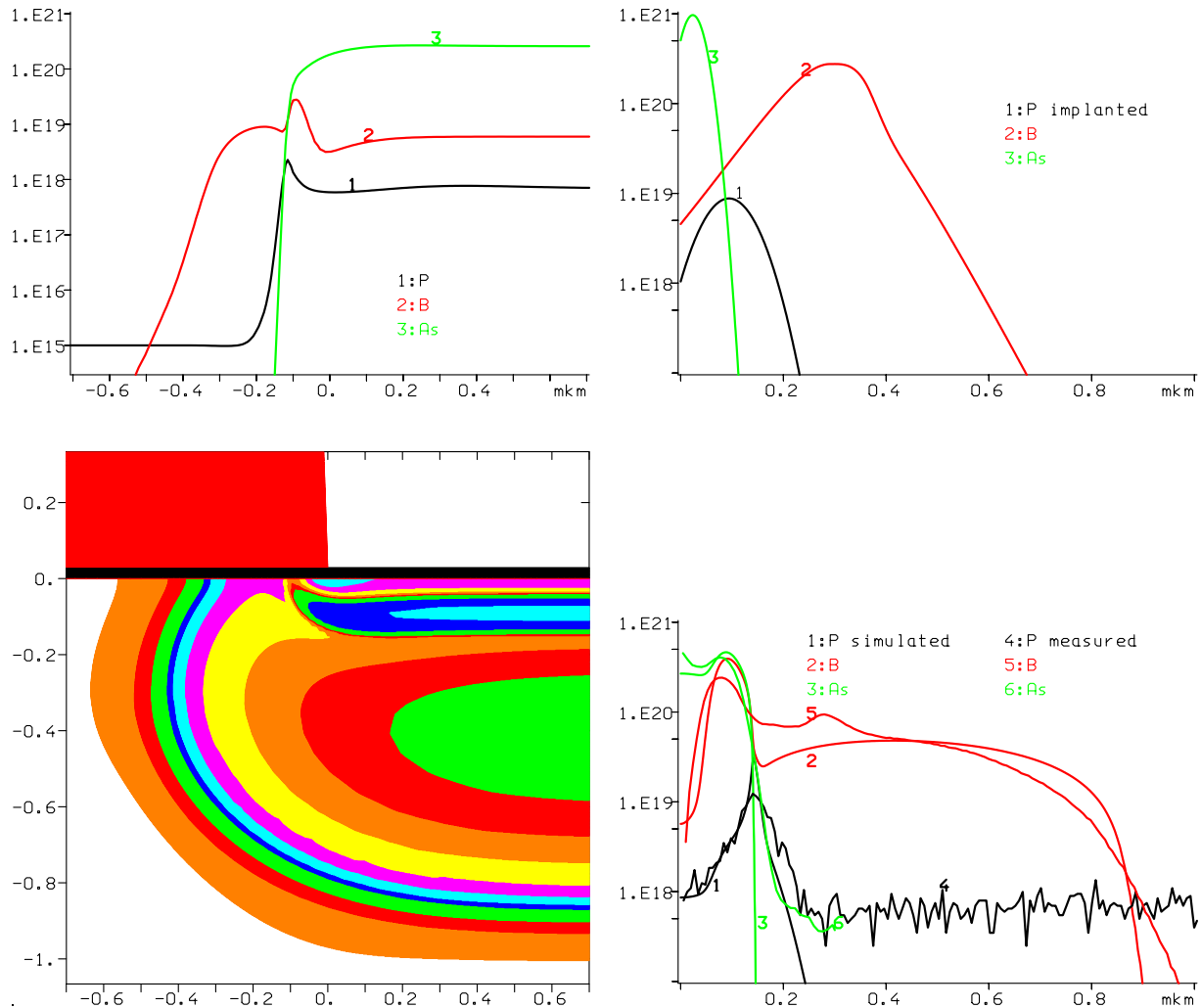


Abb. 1: 1D/2D-Simulationen mit DIOS: Simulierte vertikale Verteilung von P, B, As nach Implantation (rechts oben); simulierte und gemessene vertikale Verteilung von P, B, As nach 300 min inerter Temperung bei  $900^\circ\text{C}$  (rechts unten); simulierte Isoflächen für B (links unten) und laterale Verteilung von P, B, As 5 nm unterhalb der Substratobergrenze (links oben) nach genannter Temperung

Obwohl noch nicht alle Messungen ausgewertet und mit entsprechenden Simulationsrechnungen verglichen worden sind, wird deutlich, daß die SUPREM-3-Modelle quantitativ diesen komplizierten Wechselwirkungseffekt nicht in allen Details beschreiben. Zu berücksichtigen sind etwa eine genauere Modellierung der Randbedingungen und der Löslichkeitsgrenzen sowie die Kinetik der Punktdefekte zumindest in der Anfangsphase der Temperung. Außerdem wird

darüber diskutiert, ob für das elektrostatische Potential die Poissongleichung (anstelle der bisherigen Annahme der lokalen Elektroneutralität; vgl. hierzu auch [5]) und für die Elektronen und Löcher die Fermistatistik (anstelle der bisher benutzten Boltzmannstatistik) einbezogen werden sollten. Für derartige Modellerweiterungen sind analytische und numerische Untersuchungen von allgemeinen Elektro-Reaktions-Diffusionsgleichungen und verschiedenen Grenzfällen dieser Gleichungen durchgeführt und eine Reihe neuer Ergebnisse erzielt worden (siehe den Beitrag A. GLITZKY et al., Elektro-Reaktions-Diffusionssysteme in Heterostrukturen).

### Literatur

1. ETH INTEGRATED SYSTEMS LABORATORY, *Der 2D-Technologiesimulator DIOS. Version 3.3. Nutzerhandbuch*, Zürich, 1993.
2. C. KERMARREC, T. TEWKSBURY, G. DAWE, R. BAINES, B. MEYERSON, D. HARAME, M. GILBERT, *New application opportunities for SiGe HBTs*, Microwave Journal, (October 1994), pp. 23–35.
3. F. HERZEL, K.-E. EHWALD, B. HEINEMANN, D. KRÜGER, R. KURPS, W. RÖPKE, H.-P. ZEINDL, *Deconvolution of narrow boron SIMS depth profiles in Si and SiGe*, Surface and interface analysis, 23 (1995), pp. 764–770.
4. TECHNOLOGY MODELING ASSOCIATES, INC., *TSUPREM-4. Version 6.1*, Palo Alto, USA, 1994.
5. P. PICHLER, W. JÜNGLING, S. SELBERHERR, E. GUERRERO, H. PÖTZL, *Simulation of critical IC-fabrication steps*, IEEE Trans. CAD, 4 (1985), pp. 384–397.



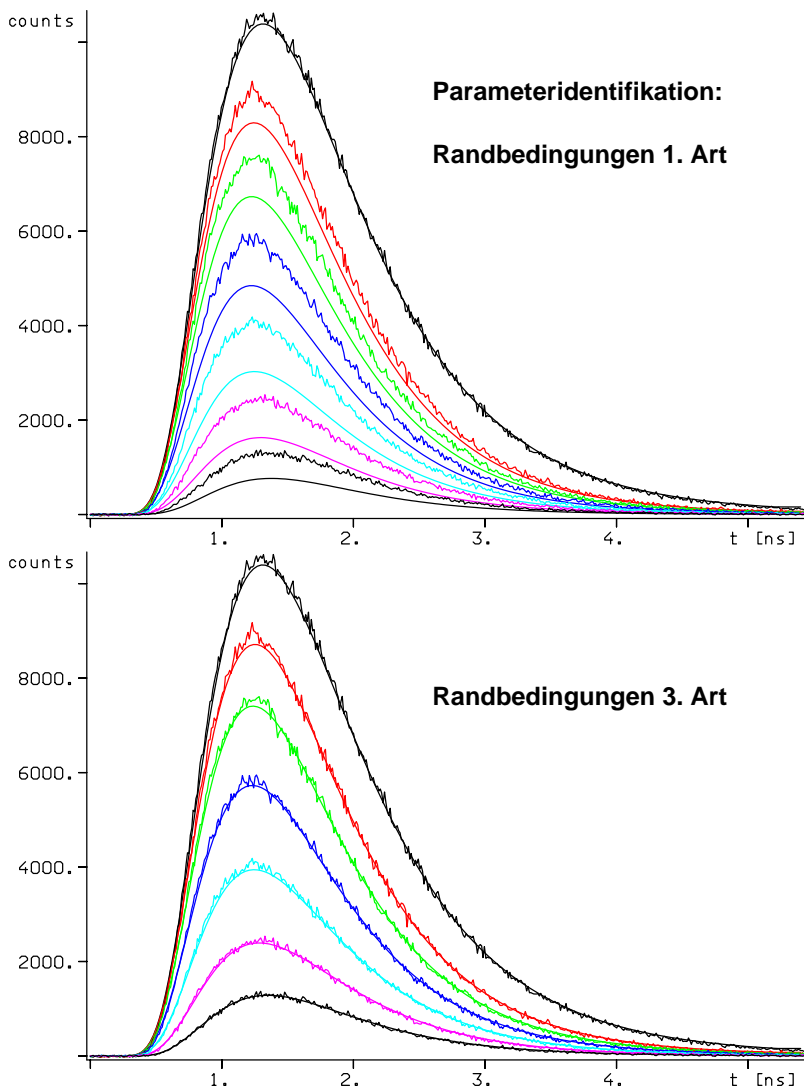
## Identifikation der Randbedingungen im Diffusionsmodell der optischen Tomographie

**Bearbeiter:** R. Hünlich, R. Model (PTB)

**Kooperation:** Physikalisch-Technische Bundesanstalt Berlin-Charlottenburg (PTB)

**Förderung:** BMBF/PTB

Die Lichtausbreitung in optisch dichten Medien kann in guter Näherung durch eine Diffusions-Absorptionsgleichung für die Photonendichte  $\Phi$  beschrieben werden, die als optische Parameter des Mediums den Transportstreckkoeffizienten  $\mu'_s$  und den Absorptionskoeffizienten  $\mu_a$  enthält. Für Anwendungen in der optischen Tomographie ist die Modellierung der Situation am Rande des Objektes von großer Bedeutung, da diese die Laufzeitkurven des transmittierten Lichtes in Detektorpositionen am Rande des Objekts, die die Eingangsinformation für die Bilderkennung liefern, stark beeinflussen.



Bezüglich des Types der Randbedingungen sind Annahmen in zwei Richtungen bekannt. Zum einen werden homogene Randbedingungen 1. Art

$$\Phi = 0$$

angenommen, die eine vollständige Absorption der Photonen am Rand beschreiben.

Zum anderen ergeben sich bei der Herleitung der Diffusionsnäherung aus der Boltzmannschen Transportgleichung Randbedingungen 3. Art

$$-D(\mu'_s, \mu_a) \frac{\partial \Phi}{\partial \nu} = h \Phi,$$

$h = 0$  entspricht einer Totalreflexion. Der Parameter  $h$  hängt von den Eigenschaften des Randes, aber auch vom Meßaufbau ab. Ziel der Untersuchungen war es, anhand von Meßdaten sowohl den Typ der Randbedingungen als auch den Parameter  $h$  zu bestimmen.

Das Testobjekt (eine Küvette, mit einem trüben Medium gefüllt und zusätzlich einen dünnen beweglichen Absorber enthaltend), die Durchführung der Messungen (zeitaufgelöste Messung der Reaktion auf eingestrahlte Laserimpulse im ps-Bereich), die Meßdaten und erste Ergebnisse zur Parameteridentifikation sind in [4] beschrieben. Dort sind sowohl auf dem Rand der Küvette als auch am Rand des Absorbers Randbedingungen 1. Art benutzt worden. Inzwischen wurde in Analogie zum Algorithmus zur Bilderkennung (siehe [1,3]) ein Algorithmus zur Parameteridentifikation entwickelt, der es gestattet, bei Randbedingungen 3. Art neben den optischen Parametern  $\mu'_s, \mu_a$  auch die Randparameter  $h_c, h_a$  (auf dem Rand der Küvette bzw. des Absorbers) zu bestimmen, wobei aus meßtechnischen Gründen noch zwei weitere unbekannte Parameter (eine Zeitverschiebung und ein Skalierungsfaktor) zu berücksichtigen sind. Der Algorithmus beruht auf einer FEM-Lösung des Vorwärtsproblems und einer Minimierungsstrategie des Fehlerfunktionals.

Die Abbildungen (entnommen aus [1,2]) zeigen gemessene und simulierte Laufzeitkurven für verschiedene Absorberpositionen, wobei alle simulierten Laufzeitkurven der oberen bzw. unteren Abbildung jeweils mit dem einheitlichen Parametersatz berechnet worden sind, der sich nach Identifikation ergeben hat. Diese Abbildungen zeigen deutlich, daß nur Randbedingungen 3. Art die Meßdaten gut beschreiben, zumal sich physikalisch plausible Werte für die Randparameter  $h_c, h_a$  ergeben haben.

Die gleichzeitige Identifizierung der optischen Parameter des Mediums und der Parameter aus den Randbedingungen führte auf ein extrem schlecht konditioniertes Problem. Für Anwendungen in der optischen Tomographie sollten die Randparameter vorab bestimmt werden, um bei der Lösung des inversen Problems zur Bilderkennung nicht noch zusätzliche Konvergenzschwierigkeiten zu erhalten.

## Literatur

1. R. HÜNLICH, R. MODEL, M. ORLT, M. WALZEL, *Inverse problems in optical tomography*, WIAS-Preprint 204, Berlin, 1995.
2. R. MODEL, R. HÜNLICH, *Parameter sensitivity in near infrared imaging*, erscheint in Proc. SPIE, 2626.
3. R. MODEL, R. HÜNLICH, M. ORLT, M. WALZEL, *Image reconstruction for random media by diffusion tomography*, Proc. SPIE, 2389 (1995), pp. 400–410.
4. R. MODEL, R. HÜNLICH, D. RICHTER, H. RINNEBERG, H. WABNITZ, M. WALZEL, *Imaging in random media: Simulating light transport by numerical integration of the diffusion equation*, Proc. SPIE, 2326 (1995), pp. 11–22.

## Approximation des Penrose-Fife Phasenfeld Modells und des Stefan-Problems

**Bearbeiter:** O. Klein

**Förderung:** EU, HCM-Netzwerk „Phase Transitions and Surface Tension“

In diesem Projekt werden verschiedene Modelle für den Phasenübergang fest–flüssig betrachtet; insbesondere wird untersucht, wie man mit Hilfe von Näherungslösungen der Penrose-Fife Phasenfeldgleichungen Approximationslösungen für das Stefan-Problem gewinnen kann. Das *Stefan-Problem* ist ein Ansatz zur Modellierung des fest–flüssig Phasenübergangs. In der *Enthalpie-Formulierung* des Stefan-Problems wird verlangt, daß

$$\partial_t(c_0\theta + L\chi) + \nabla q = g \quad (1)$$

im distributionellen Sinne gilt und daß fast überall

$$\chi \in H(\theta - \theta_C) \quad (2)$$

ist. Dabei ist  $\theta$  die absolute Temperatur,  $q$  der Wärmefluß und  $\chi$  ein Ordnungsparameter, der in der festen Phase 0 und in der flüssigen Phase 1 ist. Die gegebene Funktion  $g$  repräsentiert Wärmequellen oder -senken,  $H$  ist der Heaviside-Graph, und die Schmelztemperatur  $\theta_C$  ist, ebenso wie  $c_0$  und  $L$ , eine positive Materialkonstante.

Penrose und Fife verwenden in [6] zur Modellierung von diffusionsgesteuerten Phasenübergängen einen Landau-Ginzburg-Ansatz für die freie Energie. Die sich dabei ergebenden *Phasenfeldgleichungen* lauten für einen nicht konservierten Ordnungsparameter  $\chi$  in einem Spezialfall

$$\partial_t(c_0\theta + L\chi) + \nabla q = g, \quad (3)$$

$$\delta\chi_t - \varepsilon\Delta\chi + \beta(\chi) \ni L\left(\frac{1}{\theta_C} - \frac{1}{\theta}\right). \quad (4)$$

Dabei sind  $\delta$  und  $\varepsilon$  positive Konstanten, und  $\beta$  ist der inverse Heaviside-Graph, d. h.

$$\beta(r) = \begin{cases} (-\infty, 0] & \text{für } r = 0 \\ \{0\} & \text{für } 0 < r < 1. \\ [0, +\infty) & \text{für } r = 1 \end{cases}$$

Betrachtet man dieses System genauer, so stellt man fest, daß es für  $\delta = \varepsilon = 0$  äquivalent zur Enthalpie-Formulierung des Stefan-Problems (1)–(2) ist.

Colli und Sprekels untersuchen in [3,4] für einen Wärmefluß, der sich als Gradient der inversen Temperatur ergibt, d. h.  $q = \kappa\nabla\left(\frac{1}{\theta}\right)$  für eine positive Materialkonstante  $\kappa$ , wie sich die Lösungen der Penrose-Fife Phasenfeldgleichungen (3)–(4) verhalten, wenn  $\delta$  und  $\varepsilon$  gegen 0 gehen. Sie können zeigen, daß diese Lösungen gegen eine Lösung des Stefan-Problems (1)–(2) konvergieren, wenn man geeignete Rand- und Anfangsbedingungen betrachtet.

Weiterhin zeigten Colli und Sprekels, daß man, wenn nur einer der Parameter  $\delta$  und  $\varepsilon$  gegen 0 geht, Konvergenz gegen die sogenannten *relaxierten Stefan-Probleme* erhält, wie sie z. B. (siehe [7]) zur Modellierung des Erstarrens mit der Berücksichtigung von Unterkühlung verwendet werden.

In diesem Projekt soll nun ein numerisches Verfahren zur Lösung des Stefan-Problems entwickelt werden, welches auf diesem Grenzübergang beruht. Weil die Lösungen der Penrose-Fife Gleichungen glatter sind als die Lösung des Stefan-Problems, hofft man so bessere numerische Resultate zu erzielen, als bei einer direkten Diskretisierung des Stefan-Problems.

Im Berichtszeitraum wurde (siehe [5]) für die Penrose-Fife Phasenfeldgleichungen (3)–(4) ein Schema zur Semidiskretisierung in der Zeit formuliert, welches in drei Raumdimensionen konvergent ist. Außerdem wurde gezeigt, daß analoge Konvergenzaussagen zu denen in Colli-Sprekels [4] gelten, wenn man neben der Zeitschrittweite  $h$  auch noch  $\delta$  und/oder  $\varepsilon$  gegen 0 gehen läßt. Unter Verwendung von Techniken aus [1] wurden Fehlerabschätzungen durchgeführt, die zeigen, daß der Fehler durch die zeitliche Diskretisierung von der Ordnung  $\sqrt{h}$  ist. Die Fehlerabschätzungen für das Schema liefern Abschätzungen für die Konvergenzrate der Lösungen der nicht diskreten Penrose-Fife Phasenfeldgleichungen gegen die Lösung des Stefan-Problems.

Im nächsten Jahr soll untersucht werden, ob und unter welchen Voraussetzungen man beweisen kann, daß der zeitliche Diskretisierungsfehler von der Ordnung  $h$  ist. Dabei sollen auch Techniken aus [2] verwendet werden.

Hauptziel der Arbeit im nächsten Jahr ist es, aufbauend auf der Semidiskretisierung in Zusammenarbeit mit der Forschungsgruppe 3 ein numerisches Verfahren zu entwickeln und zu implementieren. Mit diesem sollen zunächst die Penrose-Fife Phasenfeldgleichungen und später das Stefan-Problem und die relaxierten Stefan-Probleme näherungsweise gelöst werden. Dabei soll mit Originaldaten gerechnet werden, um realistisches Materialverhalten zu simulieren.

## Literatur

1. P. COLLI, *Error estimates for nonlinear Stefan problems obtained as asymptotic limits of a Penrose-Fife model*, erscheint in ZAMP.
2. P. COLLI, G. SAVARÈ, *Time discretization of Stefan problems with singular heat flux*, erscheint 1997 in Proc. FBP '95, Serie GAKUTO Int. Ser. Math. Sci. Appl.
3. P. COLLI, J. SPREKELS, *On a Penrose-Fife Model with Zero Interfacial Energy Leading to a Phase-field System of Relaxed Stefan Type*, Annali di Matematica pura ed applicata, CLXIX (1995), pp. 269–289.
4. ———, *Stefan problems and the Penrose-Fife phase field model*, WIAS-Preprint 127, Berlin 1994, eingereicht.
5. O. KLEIN, *A semidiscrete scheme for a Penrose-Fife system and some Stefan problems in  $\mathbb{R}^3$* , WIAS-Preprint No. 199, Berlin 1995, erscheint 1997 in Adv. Math. Sci. Appl.
6. O. PENROSE, P. C. FIFE, *Thermodynamically consistent models of phase-field type for the kinetics of phase transitions*, Physica D, 43 (1990), pp. 44–62.
7. A. VISINTIN, *Stefan problem with phase relaxation*, IMA Journal of Applied Mathematics, 34 (1985), pp. 225–245.

## Halbleitergleichungen mit der Einteilchenenergie als einer unabhängigen Variablen

**Bearbeiter:** U. Krause

**Förderung:** DFG, SFB 256

**Kooperation:** J. Frehse, Sonderforschungsbereich 256 „Nichtlineare partielle Differentialgleichungen“ der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn;  
K. Gärtner, Institut für Integrierte Systeme, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich

Die fortdauernde Miniaturisierung in der Mikroelektronik [1] erhöht die Abhängigkeit der Funktion der Bauelemente von Quanteneffekten wesentlich und erfordert sowohl den Versuch der ständigen Anpassung bewährter Modelle als auch die Suche nach neuen, handhabbaren Gleichungen.

Halbleitergleichungen mit der Einteilchenenergie als einer unabhängigen Variablen [2] entstehen, wenn man in der quasiklassischen Boltzmann-Gleichung die Verteilungsfunktion und die Streuraten auf geeignete Weise über die Isoenergieflächen der elektronischen Bandstruktur mittelt. Auf diese Weise hat man die für die Funktion eines Bauelementes in einem Regime fern vom thermodynamischen Gleichgewicht der Ladungsträger wesentliche Größe der Einteilchenenergie  $E$  explizit als Variable in den Gleichungen. Im einfachsten Fall eines räumlich eindimensionalen Gebietes lauten sie

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(x, E, t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x, E, t)}{\partial x} - q_e \mathcal{E} \frac{\partial}{\partial E} j(x, E, t) = \\ = (\mathcal{D}(E) - n(x, E, t)) n(x, E, t) \left( \frac{\partial W^+(E, E')}{\partial E'} + \frac{\partial W^+(E', E)}{\partial E'} \right) \Big|_{E' \rightarrow E} \mathcal{Z}^p, \end{aligned}$$

wobei der Strom  $j$  durch

$$\begin{aligned} j(x, E, t) = -\tau(E) \pi(E) \frac{\partial n(x, E, t)}{\partial x} + \\ + \tau(E) \pi(E) F(x) n(x, E, t) \frac{\partial}{\partial E} \ln \left( \frac{\mathcal{D}(E)}{n(x, E, t)} \right) \end{aligned}$$

mit

$$F(x) = -q_e \mathcal{E}(x) = q_e \frac{d}{dx} \phi(x)$$

gegeben ist. Die Poisson-Gleichung lautet

$$\frac{d}{dx} \varepsilon \frac{d}{dx} \phi = -q_e (p(x) - n(x) - C(x)).$$

Dabei sind  $\mathcal{D}(E)$ ,  $\tau(E)$ ,  $\pi(E)$ ,  $\mathcal{Z}^p$  und  $W^+(\cdot, \cdot)$  gegebene, das Halbleitermaterial charakterisierende Größen,  $\mathcal{E}$  ist die elektrische Feldstärke,  $\phi$  das elektrostatische Potential,  $n(x, E, t)$  die Elektronendichte und  $j(x, E, t)$  die Stromdichte der Elektronen.

Die Variable  $E$  gestattet die direkte Modellierung von Zuständen des Bauelementes und wirft andererseits neue Probleme auf: Wegen der verbotenen Zone eines Halbleiters ist das Gebiet,

in dem man die Gleichungen zu betrachten hat, nicht zusammenhängend. Aus physikalischen Gründen dürfen an den Bandkanten keine Randbedingungen gefordert werden. In jeder Formulierung der Gleichungen treten Streuraten  $W$  zwischen verschiedenen Energiezuständen der Ladungsträger auf. Die gegenwärtigen Untersuchungen des Modells befassen sich mit der Dynamik der Elektronen und Löcher in diesem Modell:

- Mittelung über die mikroskopischen Bewegungsgesetze der Ladungsträger,
- Respektierung der verbotenen Zone,
- Darstellung und Geometrie der Streuraten.

### Literatur

1. F. A. BUOT, *Mesoscopic Physics and Nanoelectronics: Nanoscience and Nanotechnology*, Physics Reports **234** (1993), 73.
2. U. KRAUSE, *Halbleitergleichungen mit der Einteilchenenergie als einer unabhängigen Variablen*, 1993 (unpubl.)

**Selektive Differenzierung von Anregungszustandsprozessen in molekularen Aggregaten****Bearbeiter:** S. Oberländer**Kooperation:** D. Leupold, Max-Born-Institut für Nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie Berlin (MBI), Abteilung Photophysik von Biomolekülen

Die interdisziplinäre Kooperation mit dem MBI wurde 1995 durch Beteiligung an dem am MBI laufenden neuen DFG-Projekt „Selektive Differenzierung von Anregungszustandsprozessen in molekularen Aggregaten mit Hilfe der neuen Meßgröße“ fortgesetzt.

Seitens der Mathematik ging es darum, durch asymptotische Untersuchungen möglichst modellübergreifende Aussagen über den Informationsgehalt von Meßgrößen zu erhalten, insbesondere solcher Größen, die durch Variation der Impulslänge des anregenden Strahlungsfeldes gewonnen werden können.

Methoden und Ergebnisse dieser Art sollen zu einem Buch mit dem Arbeitstitel „Nichtlineare Spektroskopie mit variabler Impulslänge“ zusammengefaßt werden. Der mathematische Teil mit dem Arbeitstitel „Beiträge der Analysis zur nichtlinearen Spektroskopie mit variabler Impulslänge“ konnte 1995 im wesentlichen abgeschlossen werden.

## Adaptive Optimierung von Flugprofilen mit Gedächtnislegierungen

**Bearbeiter:** St. Seelecke, J. Sprekels

**Kooperation:** I. Müller, Institut für Thermodynamik und Reaktionstechnik, Technische Universität Berlin

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

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

Der Werkstoff eines solchen Profils ist ein Verbund eines elastischen Materials mit Gedächtnislegierungen. Drähte aus solchen Legierungen verändern ihre Länge reversibel um bis zu 6% bei Heizung und Kühlung, wobei die Heizung elektrisch und die Kühlung im Luftstrom erfolgen können. Der „Prototyp“ eines adaptiven Flügels ist eine biegsame Kunststoffplatte, auf deren Ober- und Unterseite je ein Netz aus Gedächtnisdrähten eingeschmolzen ist.

Jedes Segment beider Netze kann einzeln beheizt werden, wobei das entsprechende Plattenstück ein Biegemoment erfährt. So kann der Platte insgesamt innerhalb bestimmter Grenzen eine beliebige gekrümmte Form gegeben werden. Ziel ist es, diese Form den durch den jeweiligen Anströmzustand gegebenen Flugbedingungen optimal anzupassen.

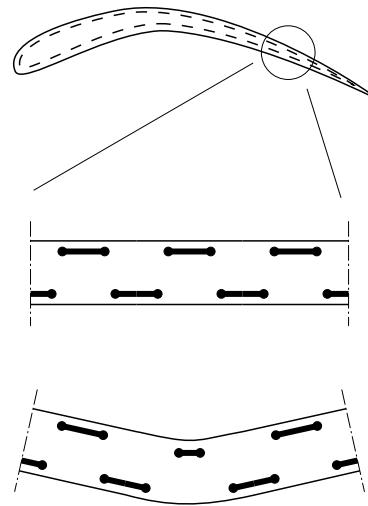


Abb. 1: Profileinstellung aufgrund der durch die Verkürzung eines beheizten Drahtsegmentes hervorgerufenen Biegung

Es handelt sich hierbei um eine zweistufige Echtzeit-Optimierung:

Neben der Echtzeit-Bestimmung des für die jeweils gemessenen Anströmdaten optimalen Flügelprofils ist ein optimales Steuerungsproblem zur Realisierung dieses Profils zu lösen.

Die zugehörigen Zustandsgleichungen bilden ein nichtlinear gekoppeltes System von singulären Integralgleichungen, partiellen Differentialgleichungen und hysteretischen Nichtlinearitäten, durch die die zugrunde liegenden Effekte der Aerodynamik, des Wärmeaustauschs, der Materialtheorie sowie der Elastizitätstheorie modelliert werden. Der folgende Ablaufplan zeigt diese Interdependenzen, wobei  $C_W$ ,  $C_A$ ,  $h$ ,  $j$ ,  $T_i$ ,  $D$  Widerstandsbeiwert, Auftrieb, Tragflügelprofil, Stromstärke, Temperatur und Deformation bedeuten;  $v_\infty$ ,  $p_\infty$ ,  $T_\infty$  charakterisieren die Anströmbedingungen.



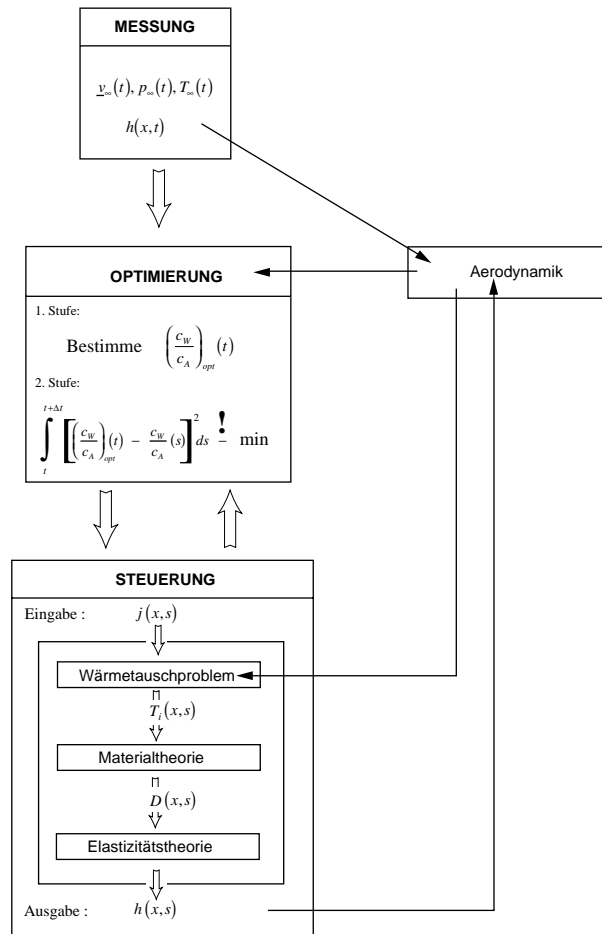


Abb. 2: Ablaufplan des Echtzeitproblems

Die Herstellung eines „Prototyps“ im Labor des Instituts für Thermodynamik und Reaktionstechnik der TU Berlin ist beabsichtigt.

## Phasenübergänge und Hysteresephänomene

**Bearbeiter:** J. Sprekels

**Kooperation:** M. Brokate, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, P. Colli, Universität Turin, Ph. Laurençot, Universität Nancy, P. Krejčí, Tschechische Akademie der Wissenschaften, Prag, S. Zheng, Fudan Universität, Shanghai

**Förderung:** PROCOPE-Programm „Freie Randwertprobleme und Asymptotik von Evolutionsgleichungen“; EU, HCM-Netzwerk „Phase Transition and Surface Tension“

In diesem Projekt werden verschiedene Modelle für Phasenübergänge und Hysteresephänomene sowie für Kombinationen davon untersucht. Im Berichtszeitraum ist es gelungen,

- für eine große Klasse von Phasenfeldgleichungen des Penrose-Fife-Typs (wodurch z. B. Phasenübergänge des Typs flüssig–fest modelliert werden) weitgehende Aussagen hinsichtlich Existenz und Asymptotik zu erzielen ([2, 3, 4, 5]),
- das asymptotische Verhalten für  $t \rightarrow \infty$  der Gleichungen der eindimensionalen nichtlinearen Thermoviskoelastizität zu klären ([8]),
- eine thermodynamisch konsistente Theorie der eindimensionalen Thermoelastoplastizität für temperaturabhängige hysteretische Last-Deformations-Relationen zu entwickeln ([6]),
- globale Existenz für ein eindimensionales Modell des Ferromagnetismus unter Berücksichtigung linearer mechanischer Effekte zu zeigen ([7]).

Schließlich wurden die Arbeiten an der Monographie [1] abgeschlossen; das Buch wird 1996 im Springer-Verlag erscheinen.

## Literatur

1. M. BROKATE, J. SPREKELS, *Hysteresis and Phase Transitions*, Springer-Verlag, erscheint 1996.
2. P. COLLI, J. SPREKELS, *On a Penrose-Fife model with zero interfacial energy leading to a phase-field system of relaxed Stefan type*, Ann. Mat. Pura Appl. **169** (1995), 269–289.
3. ———, *Stefan problems and the Penrose-Fife phase field model*, eingereicht.
4. W. HORN, PH. LAURENÇOT, J. SPREKELS, *Global solutions to a Penrose-Fife phase-field model under flux boundary conditions for the inverse temperature*, Math. Meth. Appl. Sci., erscheint 1996.
5. W. HORN, J. SPREKELS, S. ZHENG, *Global existence for the Penrose-Fife phase-field model of Ising ferromagnets*, Adv. Math. Sci. Appl. **6** (1996), 227–241.
6. P. KREJČÍ, J. SPREKELS, *On a system of nonlinear PDE's with temperature-dependent hysteresis in one-dimensional thermoplasticity*, eingereicht.

7. ———, *Global solutions to a coupled parabolic-hyperbolic system with hysteresis in 1d-magnetoelasticity*, in Vorbereitung.
8. J. SPREKELS, S. ZHENG, P. ZHU, *Asymptotic behavior of the solutions to a Landau-Ginzburg system with viscosity for martensitic phase transitions in shape memory alloys*, WIAS-Preprint No. 214 (1996), eingereicht.

## Operator-algebraische Lösungsmethoden für nichtlineare partielle Differentialgleichungen

**Bearbeiter:** H. Stephan

**Kooperation:** V. A. Marchenko, Institut für tiefe Temperaturen, Charkov, Ukraine

1967 entdeckten Gardner, Green, Kruskal und Miura [1] die inverse Streumethode als Lösungsmethode für die Korteweg-de-Vries-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t) + 6u(x,t)\frac{\partial}{\partial x}u(x,t) + \frac{\partial^3}{\partial x^3}u(x,t) = 0$$

in dem Fall, daß die Lösung für  $x \rightarrow \pm\infty$  abklingt. Inzwischen hat sich sowohl die Zahl der Gleichungen, die man mit der inversen Streumethode lösen kann, als auch die Zahl der Funktionenklassen (periodische), die Lösungen dieser Gleichungen sein können, weiter erhöht. Um die inverse Streumethode auf eine gegebene nichtlineare Gleichung anwenden zu können, muß man ein lineares Spektralproblem finden, das sich als nichtlineare Transformation für die Gleichung eignet (im Fall der Korteweg-de-Vries-Gleichung ist das das eindimensionale Streuproblem für den Sturm-Liouville-Operator mit dem Potential  $u(x,t)$ ), und die direkte und inverse Aufgabe dieses Spektralproblems für genügend große Funktionenklassen lösen können. Hierin bestehen auch die Grenzen dieser Methode. Aus diesem Grund haben sich in den letzten 20 Jahren verschiedene direkte Methoden entwickelt — Methoden, die ohne Betrachtung eines Spektralproblems explizite Lösungen für nichtlineare partielle Differentialgleichungen finden oder das Problem auf ein einfacheres transformieren.

Eine hierbei besonders erfolgreiche Methode ist die von der Charkower Schule um Prof. V. A. Marchenko [2] entwickelte operator-algebraische Methode. Es läßt sich zeigen [3], daß sich zum Beispiel Lösungen der Korteweg-de-Vries-Gleichung als

$$u(x,t) = 2\frac{\partial}{\partial x} \left( \int_{\Omega} y(\xi;x,t) d\mu(\xi) \right)$$

darstellen lassen, wobei die von den Parametern  $x$  und  $t$  abhängige Funktion  $y(\xi;x,t)$  Lösung der — im allgemeinen singulären — Integralgleichung

$$e^{2(\xi x - 4\xi^3 t)} y(\xi;x,t) + \int_{\Omega} \frac{y(\xi';x,t)}{\xi + \xi'} \text{sign} \xi' d\mu(\xi') = 1$$

ist.  $\mu(\xi)$  ist ein geeignetes Maß auf  $\Omega \subset \mathbb{R}$ . Nach wie vor sind die analytischen Eigenschaften der so dargestellten Lösung  $u(x,t)$  weitestgehend unbekannt, so daß es sinnvoll ist, durch eine numerische Lösung Indizien für das Verhalten zu bekommen.

Im Projekt wurde diese Gleichung für verschiedene  $\mu(\xi)$  numerisch gelöst. Die Schwierigkeit der numerischen Lösung für große  $x$ - und  $t$ -Bereiche liegt in der Exponentialfunktion, die dazu führt, daß die entstehenden linearen Gleichungssysteme schlecht konditioniert sind. Dieses Problem läßt sich mit der Benutzung von Programmsystemen umgehen, die das Rechnen mit beliebiger Genauigkeit zulassen.

Die folgenden Bilder zeigen die Lösung der Korteweg-de-Vries-Gleichung mit einem speziell gewählten Maß  $\mu(\xi)$  für verschiedene Zeiten.

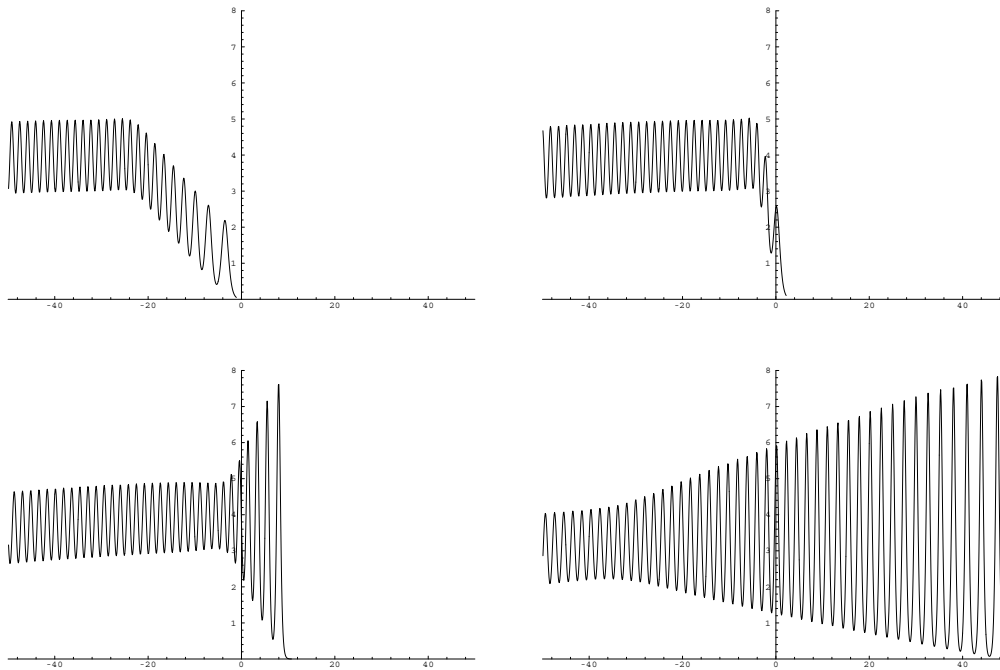


Abb. 1: Lösung für  $t = -1.5, -0.3, 0.3, 2.0$

Es ist zu vermuten, daß sich die Lösung für  $x \rightarrow -\infty$  periodisch und für  $x \rightarrow \infty$  (exponentiell) abklingend verhält. Derartige Lösungen der Korteweg-de-Vries-Gleichung wurden bislang noch nicht erhalten.

### Literatur

1. C. S. GARDNER, J. M. GREEN, M. D. KRUSKAL, R. M. MIURA, *Method for solving the Korteweg-de Vries equation*, Phys. Rev. Lett. **19**, 1967, p. 1095–1097.
2. V. A. MARCHENKO, *Nonlinear Equations and Operator Algebras*, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht 1988.
3. H. STEPHAN, *Inverse problems for non-decreasing potentials*, Teoria funkczi, funkcionalny analiz i ihk priloshenia. **45**, 1986, p. 123–132.

## Modellierung von Diffusionsprozessen mit Transportgleichungen im Phasenraum

**Bearbeiter:** H. Stephan

**Kooperation:** N. F. Morozov, Lehrstuhl für Elastizitätstheorie, Institut für Mathematik und Mechanik der Universität St. Petersburg, Rußland;

R. Stephan, Fraunhofer-Institut für Mikroelektronische Schaltungen und Systeme, Institutsteil Dresden;

N. Strecker, Institut für Integrierte Systeme, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich

Nur in den einfachsten Fällen beschreibt die klassische Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}c(x,t) = D\frac{\partial^2}{\partial x^2}c(x,t) \quad (1)$$

den Teilchentransport in einem homogenen Medium, wobei  $c(x,t)$  die Wahrscheinlichkeitsdichte der Zufallstrajektorie  $x(t)$  ist. Diese Art der Beschreibung setzt voraus, daß der Zustand des Teilchens durch seinen Ort bestimmt ist. Spielt die Geschwindigkeit eine wichtige Rolle (wie etwa beim Technologieschritt Ionenimplantation), ist diese Annahme nicht mehr gerechtfertigt, denn der Zustand eines klassischen Teilchens wird durch zwei Parameter — Geschwindigkeit und Ort — definiert. Die Zufallstrajektorie des Teilchens ist dann der Prozeß  $(v(t), x(t))$  mit der Wahrscheinlichkeitsdichte  $W(v,x,t)$  im Phasenraum. Ist das Medium räumlich und zeitlich homogen und können nichtlineare Effekte vernachlässigt werden, genügt diese Dichte der allgemeinen Gleichung (siehe [1], [2])

$$\frac{\partial}{\partial t}W(v,x,t) = \mathbf{A}^*W(v,x,t) - v\frac{\partial}{\partial x}W(v,x,t) \quad (2)$$

mit einem Operator

$$(\mathbf{A}f)(v) = -a(v)f'(v) + b(v)f''(v) + \int Q(v,v')\left(f(v') - f(v)\right)dv' .$$

Meistens ist die interessierende und beobachtbare Größe trotzdem die räumliche Verteilung

$$c(x,t) = \int W(v,x,t)dv, \quad (3)$$

und die betrachtete Phasenraumverteilung  $W(v,x,t)$  ist nur eine Hilfsgröße. In diesem Zusammenhang stehen folgende Aufgaben:

- Läßt sich die Funktion  $c(x,t)$  auf direktem Weg (ohne Umweg über (2) und (3)) berechnen (direktes Problem)?
- Läßt sich der Operator  $\mathbf{A}$  (die Wechselwirkung des Mediums mit dem Teilchen) bestimmen, wenn beobachtbare Größen (etwa Funktionale von  $c(x,t)$ ) gegeben sind (inverses Problem)?

Beide Aufgaben lassen sich in vielen interessanten Fällen explizit lösen. Unter anderem erhält man folgende Ergebnisse (siehe [2]):

$c(x, t)$  ist stets Lösung der Gleichung (Verallgemeinerung von Gleichung (1))

$$\frac{\partial}{\partial t} c(x, t) = \mathbf{R}^*(t) c(x, t)$$

mit einem von  $t$  abhängigen Operator der Form

$$\left(\mathbf{R}(t)g\right)(x) = r_1(t)g'(x) + r_2(t)g''(x) + \int R(x', t) \left(g(x+x') - g(x)\right) dx' .$$

Die Koeffizienten  $r_1(t)$ ,  $r_2(t)$  und  $R(x', t)$  (sie hängen im allgemeinen von  $\mathbf{A}$  und von der Anfangsgeschwindigkeitsverteilung ab) lassen sich zum Beispiel im Fall der allgemeinen Brownschen Bewegung, das heißt, wenn der Operator  $\mathbf{A}$  ein Pseudodifferentialoperator mit einem Symbol der Form

$$\alpha(v, \lambda) = \alpha_0(\lambda) + \alpha_1(\lambda) \cdot v$$

ist, explizit herleiten. Des weiteren lassen sich physikalische Bedingungen angeben, wann der erhaltene Operator  $\mathbf{R}(t)$  nicht explizit von der Zeit abhängt.

Besonders interessant sind Nichtgleichgewichtsprozesse, das heißt Prozesse, in denen sich bei der Bewegung des Teilchens — im Gegensatz zur Brownschen Bewegung — kein Gleichgewicht zwischen aufgenommener und abgegebener Energie einstellt. Das Teilchen gibt mit der Zeit alle Energie an das Medium ab und kommt zur Ruhe. In diesen Fällen entarten die Koeffizienten  $a(v)$ ,  $b(v)$  und  $Q(v, v')$  im Operator  $\mathbf{A}$ . Experimentell beobachtbar und daher aus physikalischer Sicht interessant ist der Grenzwert

$$c(v_0, x) = \lim_{t \rightarrow \infty} \int W(v, x, t) \Big|_{W_0(v, x) = \delta(v - v_0) c_0(x)} dv ,$$

— die Verteilung der zur Ruhe gekommenen Teilchen mit gegebener Anfangsgeschwindigkeit  $v_0$ . Er verschwindet nicht, auch wenn das Raumgebiet unbeschränkt ist. Dieses Problem läßt sich als parabolisches Streuproblem auffassen. Im allgemeinen lassen sich für derartige Streuprobleme im Gegensatz zu hyperbolischen keine inversen Aufgaben lösen. Im Falle von Nichtgleichgewichtsprozessen ist es aber für einige physikalisch sinnvolle Fälle möglich, das inverse Problem, also die Bestimmung des Operators  $\mathbf{A}$  bei gegebenem  $c(v_0, x)$ , auf konstruktive Weise exakt zu lösen.

## Literatur

1. C. W. GARDINER, *Handbook of statistical methods*, Springer Series in Synergetics. vol. 13, Second Edition, 1985.
2. H. STEPHAN, Dissertationsschrift: *Nichtgleichgewichtsprozesse. Direkte und inverse Probleme*, Freie Universität Berlin, 1995.

## Polymerabbau

**Bearbeiter:** K. Zacharias

**Kooperation:** Fraunhofer-Institut für Angewandte Polymerforschung, Arbeitsgruppe G. Rafter/M. Pickard, Teltow-Seehof

Es werden Modelle des hydrolytischen Polymerabbaus betrachtet. Solche Modelle spielen eine Rolle bei Untersuchungen zur kontrollierten Freisetzung von Pharmaka, die in biologisch abbaubare Polymermatrizen eingebracht sind. Der Abbau wird nach den klassischen Vorstellungen der chemischen Kinetik durch Reaktionsgleichungen der Form

$$\frac{dC_i}{dt} = R_i \quad (i = 1, \dots, k)$$

beschrieben. Hierbei ist  $t$  die Zeit, die  $C_i$  sind Konzentrationen, und die  $R_i$  sind Reaktionsterme, die Modellvorstellungen über die Reaktionskinetik (Stöchiometrie, Autokatalyse) enthalten. Für die diffundierenden niedrigmolekularen Anteile kommen Reaktions-Diffusionsgleichungen hinzu. Sie haben im räumlich eindimensionalen Fall die Form

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) + R_i \quad (i = k + 1, \dots, n).$$

Beide Sätze von Gleichungen sind durch Anfangs- bzw. Randbedingungen zu vervollständigen. Die Diffusionskoeffizienten  $D_i$  hängen von den Konzentrationen ab und ändern sich während des Abbauprozesses. Die Modellgleichungen lassen sich nach Standardmethoden numerisch lösen. In Zusammenarbeit mit dem Kooperationspartner wurden zahlreiche Modellvarianten untersucht.



## 3.2 Forschungsgruppe Dynamische Systeme und Steuerungstheorie

### 3.2.1 Zusammenfassung

Die Forschungsgruppe befaßt sich mit der Entwicklung analytischer und numerischer Methoden zur Analyse und Steuerung dynamischer Systeme sowie deren Anwendungen auf konkrete Probleme der Optoelektronik, Chemie und Geophysik.

Die Arbeit der Forschungsgruppe wurde im Berichtsjahr wesentlich durch zwei neue anwendungsorientierte Projekte geprägt, die von potentiell großer wirtschaftlicher Bedeutung sind und die die Kooperation mit verschiedenen Gruppen innerhalb und außerhalb des Weierstraß-Institutes erfordern. Das Projekt „Analytische und numerische Untersuchungen der nichtlinearen Dynamik von Mehrsektions-DFB-Lasern“ befaßt sich mit Bauelementen in zukünftigen optischen Kommunikationssystemen mit hohen Datenraten, die „verrauschte“ Datenfolgen in Pulsfrequenz und Pulsform regenerieren. Insbesondere sollen Selbstpulsationen und Synchronisationsverhalten nachgewiesen und theoretisch begründet werden. Das Projekt wird in enger Zusammenarbeit mit Arbeitsgruppen an der Humboldt-Universität zu Berlin und am Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin bearbeitet. Das zweite neue Projekt ist der optimalen Steuerung diskontinuierlicher Destillationsprozesse gewidmet und erfolgt in enger Zusammenarbeit mit der BASF AG Ludwigshafen und den Forschungsgruppen 1 und 3 des Weierstraß-Institutes. Im Unterschied zur kontinuierlichen Destillation ist die diskontinuierliche zur gleichzeitigen Extraktion mehrerer Produkte geeignet und für die Herstellung hochwertiger spezifischer Chemikalien unverzichtbar. Die optimale Auslegung und Fahrweise solcher Anlagen ist von grundlegender ökonomischer Bedeutung. Eine erfolgreiche Lösung dieser Aufgabenstellung erfordert effektive Algorithmen für hochdimensionale nichtlineare Optimierungsprobleme. Ein weiteres, vom BMBF gefördertes, Anwendungsprojekt befaßt sich mit der effizienten Simulation der Dynamik von Copolymerisationsprozessen.

Im Mittelpunkt der analytischen Forschungen standen Untersuchungen über

- Existenz und Stabilität von Fronten und Pulsen in Reaktions-Diffusions-Systemen und deren Anwendungen auf Erregungsleitungsprozesse
- äquivariante Verzweigungsprobleme
- das sphärische Bénard-Problem
- erzwungene Symmetriebrechung
- nichtlineare Systeme mit Unstetigkeiten
- singular gestörte Systeme mit Stabilitätswechsel
- Stabilisierung periodischer Lösungen in dynamischen Kontrollsystemen
- Strukturbildungsprozesse in Systemen mit kleiner Diffusion und Konvektion.

Die Forschungsgruppe führt in Zusammenarbeit mit der Freien Universität Berlin und dem Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin das überregionale Seminar „Nichtlineare Dynamik“ durch, wodurch es zu zahlreichen Kontakten mit in- und ausländischen Wissenschaftlern kommt. Zu erwähnen sind auch zahlreiche internationale Kooperationen der Gruppe. Vier Mitarbeiter werden über Drittmittelprojekte finanziert.

### 3.2.2 Projekte

#### Stabilisierung periodischer Lösungen dynamischer Systeme

**Bearbeiter:** A. Akutowicz, K. R. Schneider

Wir betrachten ein  $n$ -dimensionales nichtlineares Kontrollsystem der Gestalt  $\dot{x} = f(x, \lambda) + ug(x)$ , wobei  $x \in \mathbb{R}^{n+1}$  der Zustandsvektor,  $\lambda$  ein Verzweigungsparameter und  $u$  die zu bestimmende Steuerung sind. Wir nehmen an, daß das unkontrollierte System  $\dot{x} = f(x, \lambda)$  für  $\lambda_0 \leq \lambda \leq \lambda_1$  eine periodische Lösung  $\Gamma_\lambda := \{x = p(t, \lambda)\}$  besitzt, die für  $\lambda_1 \leq \lambda < \lambda^*$  stabil ist und für  $\lambda = \lambda^*$  ihre Stabilität ändert, so daß eine periodische Lösung mit doppelter Periode abzweigt.

Das Ziel der Untersuchungen besteht darin, eine Rückkopplungssteuerung zu konstruieren, so daß das Kontrollsystem für  $\lambda \in [\lambda^*, \lambda^* + \delta)$  eine stabile periodische Lösung nahe  $\Gamma_\lambda$  besitzt. Zu diesem Zweck ist es hinreichend, die periodische Lösung  $\Gamma_\lambda$  für  $\lambda = \lambda^*$  zu stabilisieren. Im Falle, daß  $\Gamma_\lambda$  für  $\lambda = \lambda^*$  linear stabilisiert werden kann, stellt  $\Gamma_\lambda$  für  $\lambda \in [\lambda^*, \lambda^* + \delta)$  eine stabile periodische Lösung für das rückgekoppelte System dar. Läßt sich  $\Gamma_\lambda$  für  $\lambda = \lambda^*$  nur durch eine nichtlineare Rückkopplung stabilisieren, dann ist  $\Gamma_\lambda$  für  $\lambda \in [\lambda^*, \lambda^* + \delta)$  instabil; es existiert aber eine benachbarte stabile periodische Lösung mit doppelter Periode.

Zur Lösung des Problems führen wir in der Umgebung von  $\Gamma_\lambda$  ein lokales Koordinatensystem ein und untersuchen die Stabilisierung des zugehörigen nichtautonomen Systems. Das Problem der Steuerung der Periodenverdoppelungs-Bifurkationen wird unter Verwendung einer Zentrumsmannigfaltigkeitsreduktion behandelt.

#### Literatur

1. A. AKUTOWICZ, K. R. SCHNEIDER, *Stabilization of periodic solutions to ordinary differential equations*, in Vorbereitung.

## Optimale Steuerung diskontinuierlicher Destillationsprozesse

**Bearbeiter:** I. Bremer, W. Müller, H. Sandmann, K. R. Schneider, M. Schwarz

**Kooperation:** B. Hegner (BASF AG Ludwigshafen), G. Wozny (TU Berlin)

Destillation ist das wichtigste thermische Verfahren der chemischen Industrie zur Trennung von Stoffgemischen. Es wird zwischen kontinuierlicher Destillation (ständige Zufuhr der zu separierenden Gemische) und diskontinuierlicher Destillation („Batch-Destillation“, Separation einer einzigen Charge) unterschieden. Seit einigen Jahren wendet man sich sowohl in der Industrie als auch in der Forschung verstärkt der Batch-Destillation zu, da diese im Vergleich zur kontinuierlichen Destillation folgende Vorteile aufweist: Sie ist zur gleichzeitigen Herstellung mehrerer Produkte geeignet, ist flexibler einsetzbar und für die Herstellung hochwertiger spezifischer Chemikalien unverzichtbar. Die optimale Auslegung und Fahrweise von diskontinuierlichen Destillationsanlagen ist somit von fundamentaler ökonomischer Bedeutung.

Ziel des längerfristig angelegten Gemeinschaftsprojektes mit der BASF AG Ludwigshafen ist die Entwicklung effektiver Algorithmen zur Optimierung der Fahrweise diskontinuierlicher Destillationsprozesse. Typisch für die Batch-Destillation ist die Zerlegung des Destillationsprozesses in einzelne Fraktionen, die dadurch charakterisiert werden, daß gewisse Schlüsselgrößen (Rücklaufverhältnis, Druck, Temperatur) konstant gehalten werden. Das Umschalten von einer Fraktion auf die andere wird durch Schwellenwertbedingungen bestimmt und kann diskontinuierlich oder kontinuierlich erfolgen. Die Ermittlung optimaler Auslegungen und Fahrweisen von Batch-Destillationsanlagen erfordert eine genaue mathematische Modellierung der einzelnen Prozeßstufen. Das führt zu großen Systemen nichtlinearer Algebra-Differentialgleichungen mit unstetigen rechten Seiten. Die Optimierung solcher Systeme unter zahlreichen Nebenbedingungen erfordert neue algorithmische Zugänge, um den starken Zuwachs an Rechenzeit zu begrenzen. Wir führen die Berechnung einer optimalen Steuerung auf ein hochdimensionales nichtlineares Optimierungsproblem zurück. Die anstehenden Probleme lassen sich wie folgt beschreiben:

1. Schrittweisensteuerung bei Systemen mit Unstetigkeiten
2. Geeignete Implementierung von Umschaltbedingungen
3. Reduktion der optimalen Steuerprobleme auf hochdimensionale nichtlineare beschränkte Optimierungsprobleme sowie deren Lösung unter Ausnutzung spezieller Strukturen
4. Implementierung von Verfahren der internen Differentiation zur korrekten und effektiven Berechnung der bei der Lösung der Optimierungsprobleme benötigten Gradienten von Zielfunktion und Restriktionen
5. Parallelisierungsmöglichkeiten bei den Optimierungsrechnungen
6. Entwicklung relaxierter Iterationsverfahren zur Lösung optimaler Steuerungsprobleme (Erweiterung der Methode der Waveformrelaxation).

Die Arbeiten im Berichtsjahr konzentrierten sich im wesentlichen auf eine Weiterentwicklung des verwendeten Simulators für die Batch-Destillation, der auf dem Modell der theoretischen

Trennstufe basiert, also ein rigoroses Modell des Destillationsprozesses darstellt. In enger Zusammenarbeit mit dem Kooperationspartner BASF gelang es, Effektivität und Zuverlässigkeit des Simulators zu erhöhen. Parallel dazu wurden erste Optimierungsrechnungen im Sinne einer black-box-Optimierung unter Verwendung eines SQP-Algorithmus (K. Schittkowski) durchgeführt. Dieser Zugang wurde sowohl an einigen in der Literatur beschriebenen Problemen erprobt, und brachte befriedigende Übereinstimmung mit den dort erhaltenen Ergebnissen, als auch auf konkrete Prozeßsteuerprobleme unseres Kooperationspartners mit zwei oder drei Steuerparametern erfolgreich angewendet.

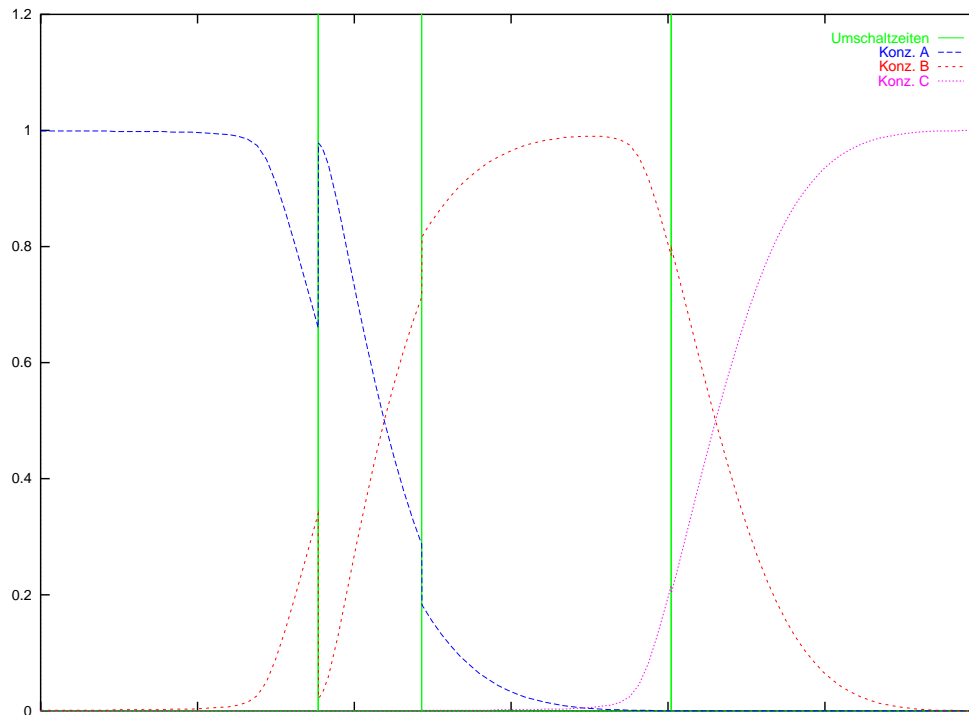


Abb. 1: Typischer zeitlicher Verlauf von Konzentrationen im Kopf (Kondensator) einer Destillationskolonne: Separation der Substanz B aus einem Drei-Komponenten-Gemisch (Daten aus: S. Farhat, M. Czernicki, N. Pibouleau, S. Domenech, *Optimization of multiple-fraction batch distillation by nonlinear programming*, AIChE J. 36, No. 9, 1349–1360 (1990), Simulation mit BASF-Programm)

## Projektionsverfahren zur Simulation von Copolymerprozessen

**Bearbeiter:** I. Bremer, R. Antonova

**Kooperation:** U. Pallaske (Bayer AG, Leverkusen)

**Förderung:** BMBF-Förderprogramm „Anwendungsorientierte Verbundvorhaben auf dem Gebiet der Mathematik“

Der Gegenstand der Untersuchungen ist eine effiziente Simulation der Dynamik von Copolymerisationsprozessen, d. h. der Polymerisation von mehreren unterschiedlichen Polymeren, im sogenannten Semibatch-Betrieb. Diese Simulationen sollen beim Projektpartner eingesetzt werden, um aus Massen- bzw. Molekulargewichtsverteilungen bzgl. eingebauter Monomere Aussagen über die Qualität des Produktes abzuleiten.

Zunächst wird das unendlichdimensionale System gewöhnlicher Differentialgleichungen, das aus der elementaren Reaktionskinetik abgeleitet wird, mit geeigneten Projektionsverfahren auf ein endlichdimensionales reduziert.

Da die Molekulargewichtsverteilung über Kettenlängenteile der eingebauten Monomere im Endprodukt je nach Zugabestrategie eine sehr komplexe Struktur aufweisen kann (Abbildung 1), ist die Anzahl der Parameter und damit die Dimension des Unterraums zur Charakterisierung dieser Verteilung u. U. noch sehr hoch.

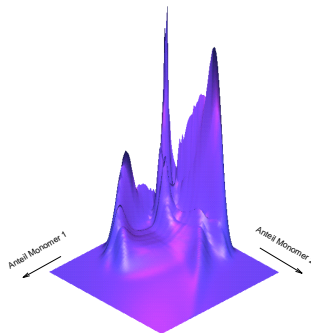


Abb. 1: Masseverteilung am Ende der Simulation mit Zugabestrategie aus Abb. 2

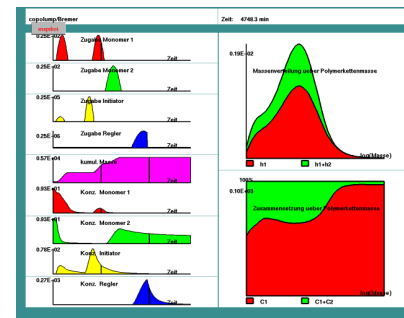


Abb. 2: Zugabestrategie und Masseverteilung über der Gesamtkettenlänge am Ende der Simulation

Numerische Experimente mit COPOLUMP und Erfahrungen beim Projektpartner zeigen, daß die Verteilung der zeitlichen Ableitungen der Molekulargewichte eine wesentlich einfachere Struktur aufweisen (Abbildung 3) als die Verteilungen der Molekulargewichte.

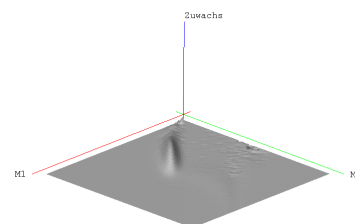


Abb. 3: Zeitliche Ableitung der Masseverteilung

Wir gehen aus von einem Galerkinansatz mit einer zeitlich veränderlichen parameterabhängigen Gewichtsfunktion [1,2]

$$x_{\bar{n}} = \phi_{\bar{n}} \sum_{\bar{s} \in \mathcal{S}} \alpha_{\bar{s}} l_{\bar{s}}(\bar{n}) \quad (1)$$

und bestimmen die Gewichtsfunktion  $\phi$  so, daß ihre zeitliche Ableitung einer bestimmten Klasse von Verteilungen angehört. Wegen der beobachteten Eigenschaften wählen wir ein Produkt aus einer Gammaverteilung bzgl. der Gesamtkettenlänge und einer Verteilung für die Anteile der einzelnen Monomere (bei zwei Monomeren z. B. eine Binomialverteilung). Die freien Parameter in der Gewichtsfunktion werden so bestimmt, daß die Momente der zeitlichen Ableitung mit den Ableitungen der Momente der Molekulargewichtsverteilungen übereinstimmen.

Neben der Untersuchung eines geeigneten mathematischen Modells besteht innerhalb des Projektes die Aufgabe, (marktfähige) Software zu entwickeln und zu implementieren, die die Simulation auf der Basis dieses Modells ermöglicht.

Das Herzstück der Implementierung ist ein mit Hilfe von LEX/YACC generierter Compiler, der die formale Beschreibung des chemischen Prozesses in ein Gleichungssystem übersetzt, das an den verwendeten Simulator angepaßt ist.

Die Bedienung des Compilers kann von einer graphischen Benutzeroberfläche (COPOSIM, Abbildung 5) aus erfolgen.

Mit Hilfe der Oberfläche kann die Erstellung und Bearbeitung des Eingabetextes, die Generierung des Gleichungssystems in Form von Subroutinen und die numerische Simulation bis hin zur graphischen Visualisierung einzelner Lösungskomponenten erfolgen.

Die Komplexität der Datenstrukturen für Gitter, Abbildungen zwischen Gittern, Modulbeschreibungen, das Netz der chemischen Reaktions-terme usw. legen eine objektorientierte Implementierung über eine C++-Klassenhierarchie (Abbildung 4) nahe.

Die Portierbarkeit von COPOSIM wird durch die Verwendung diverser Standardentwicklungswerkzeuge wie XVT-Power++, LEX, YACC, C++ ermöglicht. Die Entwicklung wird gegenwärtig auf UNIX- und OS/2-Plattformen durchgeführt.

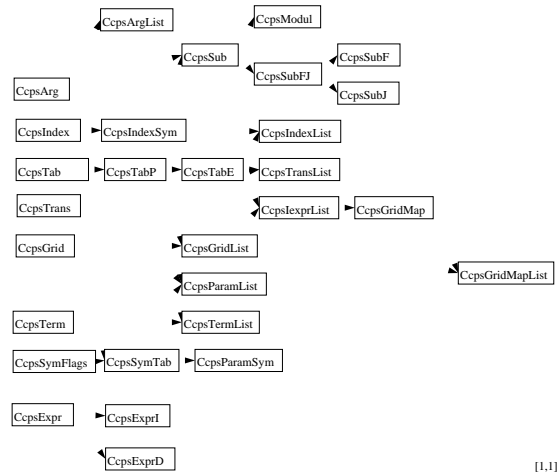


Abb. 4: Ausschnitt aus der Klassenhierarchie

Ein detaillierte Darstellung zum Projekt ist über die WWW-Seite<sup>2</sup> verfügbar.

<sup>2</sup>[http://hyperg.wias-berlin.de/wias\\_bmbf\\_tp4](http://hyperg.wias-berlin.de/wias_bmbf_tp4)

```

Document Title - Ausgabe
File Edit Run Options W
cps_r(1) = cps_k(2)*cps_x(1)
cps_y(1) = cps_y(1)-cps_r(1)
cps_y(2) = cps_y(2)+2*cps_k(1)*cps_r(1)
cps_r(1) = cps_k(4)*cps_x(2)*cps_x(4)
cps_y(2) = cps_y(2)-cps_r(1)
cps_y(4) = cps_y(4)-cps_r(1)
cps_y(6) = cps_y(6)+cps_r(1)
cps_r(1) = cps_k(5)*cps_x(2)*cps_x(5)
cps_y(2) = cps_y(2)-cps_r(1)
cps_y(5) = cps_y(5)-cps_r(1)
cps_y(10006) = cps_y(10006)+cps_r(1)
DO cps_i1 = 1, 100, 1
DO cps_i2 = 1, 100, 1
cps_i3 = (cps_i1-(1))*(100-(1-(1))) + cps
cps_i5 = (cps_i1-(1))*(100-(1-(1))) + cps
cps_r(1+cps_i5) = cps_k(8)*cps_x(6+cps_
enddo
enddo
call cps_sub12(cps_y(6),cps_r(1))
call cps_sub13(cps_y(4),cps_r(1))
call cps_sub14(cps_y(6),cps_r(1))
DO cps_i1 = 1, 100, 1
DO cps_i2 = 1, 100, 1
cps_i3 = (cps_i1-(1))*(100-(1-(1))) + cps
cps_i5 = (cps_i1-(1))*(100-(1-(1))) + cps
cps_r(1+cps_i5) = cps_k(9)*cps_x(6+cps_
enddo
enddo
call cps_sub12(cps_y(6),cps_r(1))
call cps_sub13(cps_y(5),cps_r(1))
call cps_sub15(cps_y(10006),cps_r(1))
DO cps_i1 = 1, 100, 1
DO cps_i2 = 1, 100, 1
cps_i3 = (cps_i1-(1))*(100-(1-(1))) + cps
cps_i5 = (cps_i1-(1))*(100-(1-(1))) + cps
cps_r(1+cps_i5) = cps_k(10)*cps_x(10006
enddo

Document Title - demo.crs
File Edit Run Options Windows Font Style
! Radikalbildung
I => 2*f RO (kd)
!
! Start
(j=1(1)m) RO + MCj => RCj] (ks[Cj])
!
! Wachstum
(j=1(1)m,i=1(1)m) RCj][G] + M[i] => R[i][F[i](G)] (kp[(j-1)*m+i])
!
! Abbruch durch Kombination
(j=1(1)m,i=1(1)m) RCj][G1] + R[i][G2] => PCF1(G1,G2) (ktc)
!
! Abbruch durch Disproportion
(j=1(1)m,i=1(1)m) RCj][G1] + R[i][G2] => PCG1] + PCG2] (ktd)
!
! Langkettenverzweigung
(j=1(1)m,i=1(1)m) RCj][G1] + PCG2] => PCG1] + R[i][G2] (G2,n[i]*kue[j])
! Regleruebertragung
(j=1(1)m) RCj][G] + TA => PCG] + RO (ktr)
!
! Zufuhr, Abfluss
Vlein => V1 (Vein/V)
Iein => I (Vein/V)
Vl => (Vaus/V)
I => (Vaus/V)
RO => (Vaus/V)
(j=1(1)m) RCj][G] => (Vaus/V)
PCG] => (Vaus/V)
(j=1(1)m) Mein[j] => MCj] (Vein/V)
(j=1(1)m) MCj] => (Vaus/V)
TAein => TA (Vein/V)
TA => (Vaus/V)
(j=1(1)m) Mein[j] => MtO[Cj] (Vein/V)
(j=1(1)m) MtO[Cj] => (Vaus/V)
!

```

Abb. 5: Nutzerschnittstelle

## Literatur

1. P. CANU, W. H. RAY, *Discrete weighted residual methods applied to polymerization reactions*, Computers chem. Engng., Vol. 15, 549–564, 1991.
2. P. DEUFLHARD AND M. WULKOW, *Computational treatment of polyreaction kinetics by orthogonal polynomials of a discrete variable*, Impact 1, 1989.
3. I. BREMER, R. ANTONOVA, *Sonderband zum Anwendungsorientierten Verbundprojekt auf dem Gebiet der Mathematik des BMBF*, Proceedings des Statusseminars München, Springer Verlag, erscheint 1996.

## Algorithmen zur äquivarianten Verzweigung

**Bearbeiter:** F. Guyard, R. Lauterbach

**Kooperation:** K. Gatermann (FU/ZUSE, Berlin), J. Sanders (VU Amsterdam, NL), P. Worfolk (Center of Geometry, Minneapolis, USA)

**Förderung:** RIACA Amsterdam, DFG

Für das Studium von Verzweigungsproblemen mit Symmetrie ist die Bestimmung der zugehörigen äquivarianten Abbildungen von entscheidender Bedeutung. Aus der Sicht praktischer Berechnungen sind Computeralgebra-Programme zum wichtigen Hilfsmittel geworden. Ein Ziel des Projektes ist es, ein Paket in MAPLE zu entwickeln, welches erlaubt, die äquivarianten Abbildungen zu bestimmen und damit algebraische Manipulationen vorzunehmen. In diesem Hilfsmittel sollten fest eingebaute endliche Gruppen (z. B. zyklische Gruppen, Diedergruppen, die Symmetriegruppe des Tetraeders) wie auch klassische Lie-Gruppen ( $SO(n)$ ,  $SL(n)$ ,  $O(n)$ ,  $Sp(n)$ ), wie auch vom Nutzer eingegebene Gruppen bearbeitet werden können. Dieses Tool sollte insbesondere die Verzweigungsgleichung bei absolut irreduziblen Darstellungen der Gruppen automatisch aufstellen. Weitere Ziele sind die automatische Berechnung von Orbitraumreduktionen, welche insbesondere beim Studium von äquivarianten partiellen Differentialgleichungen mit nicht diskreten Symmetriegruppen ein notwendiges Hilfsmittel sind (Lösungen sind im Orbitraum isoliert), wie auch äußerst schwer zu berechnen sind. Zusammen mit den in [1] entwickelten Methoden zeichnet sich ein Programm zur automatischen Untersuchung von äquivarianten Problemen ab, welches insbesondere für Anwender eine entscheidende Hürde vor der Verwendung der Methoden der äquivarianten Verzweigungstheorie beseitigen sollte.

## Literatur

1. K. GATERMANN, R. LAUTERBACH, *Automatic Classification of Normal Forms*, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik, Preprint SC 95-03, Berlin, 1995.



## Erzwungene Symmetriebrechung

**Bearbeiter:** F. Guyard, R. Lauterbach, D. Peterhof, L. Recke

**Kooperation:** P. Chossat (INLN, Nizza), S. Maier-Paape (Univ. Augsburg), E. Reißner (Univ. Augsburg)

**Förderung:** DFG, DAAD

Unter erzwungener Symmetriebrechung verstehen wir die mathematische Behandlung von Systemen, deren Symmetrie durch externe Störungen oder genauere Modellierung (schwach) gestört ist. Ziel ist eine Beschreibung der Dynamik solcher Systeme. Diese treten in vielen physikalischen Problemen auf, z. B. kann eine erste Modellierung eine gewisse Symmetrie des Problems ergeben, während genaueres Hinsehen weniger Symmetrie ergibt. In diesem Sinne beobachtet man oft eine Hierarchie von erzwungenen Symmetriebrechungen. In [2] wurden dynamische Phänomene für solche Probleme untersucht und gezeigt, daß man die ganze Fülle von abstrakt beschriebenen dynamischen Verhalten auch in konkreten Differentialgleichungen wiederfinden kann. In [1] wurden Techniken aus einer früheren Arbeit von Lauterbach und Roberts auf eine größere Klasse von Problemen übertragen. Insbesondere steht jetzt die Maschinerie bereit, konkrete strömungsmechanische, in der physikalischen Literatur (vgl. Arbeiten von E. Knobloch und Mitarbeitern) beschriebenen Probleme mit einer mathematisch fundierten Methode zu untersuchen. In [3] wurde ein allgemeines Verfahren zur Untersuchung von erzwungener Symmetriebrechung in abstrakten parameterabhängigen Gleichungen entwickelt. Es beschreibt Gebiete im Parameterraum, für die Lösungen des gestörten Problems nahe der Lösungsfamilie des ungestörten Problems existieren, Anzahl, Stabilität und einfache Bifurkationen (Sattel-Knoten-Bifurkationen) dieser Lösungen sowie ihre Abhängigkeit von den Parametern. Dabei wurden Resultate von E. Dancer (*G*-Invariant Implicit Function Theorem) sowie von J. K. Hale und P. Taboas benutzt und verallgemeinert. Das Verfahren ist auf Gleichungen mit räumlicher Symmetriebrechung (z. B. kleine nichtsymmetrische Störungen von nichtsymmetrischen Gleichgewichtszuständen symmetrischer elastischer Körper), mit zeitlicher Symmetriebrechung (z. B. kleine periodische Störungen periodischer Lösungen autonomer Evolutionsgleichungen) sowie mit raum-zeitlicher Symmetriebrechung (z. B. erzwungene periodische oder quasiperiodische Synchronisation in equivarianten dynamischen Systemen) anwendbar.

Innerhalb einer vom DAAD geförderten Zusammenarbeit mit P. Chossat (Nizza) werden die Methoden der erzwungenen Symmetriebrechung auf geophysikalische Probleme angewendet. Dabei wird eine Kopplung verschiedener Moden, die selbst schon äußerst komplizierte Dynamik zur Folge hat, gestört. Wir erwarten von diesen Untersuchungen, die noch nicht abgeschlossen sind, weitere Hinweise zu Mechanismen der Polumkehr des Erdmagnetfeldes.

## Literatur

1. F. GUYARD, R. LAUTERBACH, *Forced symmetry breaking for periodic solutions*, in Vorbereitung.
2. R. LAUTERBACH, S. MAIER-PAAPE, *Heteroclinic Cycles for Reaction Diffusion Systems by Forced Symmetry Breaking*, WIAS-Preprint No. 173, Berlin 1995.

3. D. PETERHOF, L. RECKE, *Abstract forced symmetry breaking and applications to forced frequency locking in  $S^1$ -equivariant dynamical systems*, in Vorbereitung.

## Sphärisches Bénard-Problem

**Bearbeiter:** F. Guyard, R. Lauterbach, D. Peterhof

**Kooperation:** Pascal Chossat (INLN, Nizza)

**Förderung:** DFG

Das sphärische Bénard-Problem im dünnen Kugelspalt ist ein vereinfachtes Modell für Vorgänge in der Atmosphäre. Bei der Bildung von Wolken treten lokal Muster auf, welche wir aus der Musterbildung in der Ebene kennen (z. B. Rollen). Diese Form der Lösung konnten wir im sphärischen Bénard-Problem konstruieren und ihre Existenz über ein genügend langes Zeitintervall zeigen.

Wir betrachten das Problem der Existenz von heteroklinen Zyklen zwischen Ruhelagen im sphärischen Bénard-Problem. Die physikalische Interpretation solcher heterokliner Zyklen ist das Auftreten von nichtperiodischen Oszillationen zwischen verschiedenen Ruhelagen. Die Existenz solcher Zyklen ist möglicherweise ein Modell für die Polumkehr des Erdmagnetfeldes. Da man weiß, daß solche Zyklen in Verzweigungsproblemen mit reinen Moden nicht auftreten können, untersuchen wir die Interaktion von Moden. Wir beschränken uns allerdings darauf, nur Interaktionen zwischen benachbarten Moden zu betrachten. Solche Interaktionen treten im sphärischen Bénard-Problem auf, und schon im einfachsten Fall der Interaktion benachbarter Moden findet man heterokline Zyklen. Wir sind ausschließlich an der Struktur von stabilen Zyklen, d. h. von solchen, die unter kleinen Störungen erhalten bleiben, interessiert. Da die zugrunde liegenden Gleichungen  $O(3)$ -äquivariant sind, nutzen wir diese Struktur zur Klassifikation aus und geben „generische“ Bedingungen für die Existenz solcher Zyklen an. Schließlich wird gezeigt, daß in Verzweigungsproblemen, welche vom sphärischen Bénard-Problem kommen, diese Bedingungen oft erfüllt sind und daher diese Zyklen wirklich existieren.

## Literatur

1. D. PETERHOF, *Das sphärische Bénard-Problem im dünnen Kugelspalt*, in Vorbereitung.
2. P. CHOSSAT, F. GUYARD, *Structurally Stable Heteroclinic Cycles in Bifurcation Problems with  $O(3)$ -Symmetry and Spherical Bénard-Problem*, Institut Non Linéaire de Nice, Preprint No. 95.03, 1995.

## Analytische und numerische Untersuchungen der nichtlinearen Dynamik von Mehrsektions-DFB-Lasern

**Bearbeiter:** R. Lauterbach, D. Peterhof, L. Recke, B. Sandstede

**Kooperation:** U. Bandelow, H.-J. Wünsche (Institut für Physik der Humboldt-Universität zu Berlin), E. Patzak, B. Satorius (Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin)

**Förderung:** DFG, Schwerpunktprogramm „Strukturbildung in dissipativen Systemen: Experiment und Theorie im qualitativen Vergleich“

Gegenstand der Arbeit sind verschiedene mathematische Modelle (Randwertprobleme für hyperbolische Systeme erster Ordnung; gewöhnliche Differentialgleichungen, deren rechte Seiten implizit durch Sturm-Liouville-Eigenwertprobleme gegeben sind), die das Verhalten von Mehrsektions-DFB-Halbleiterlasern beschreiben. Insbesondere geht es um

- Selbstpulsationen mit hohen Frequenzen (bis 80 GHz);
- Synchronisation (frequency locking) der Selbstpulsationen mit geeigneten externen optischen Signalen.

Diese zwei Phänomene prädestinieren Mehrsektions-DFB-Laser als Bauelemente in zukünftigen optischen Kommunikationssystemen mit hohen Datenraten, die „verrauschte“ Datenfolgen in Pulsfrequenz und Pulsform regenerieren. Sie wurden erst vor einigen Jahren experimentell entdeckt und werden derzeit intensiv experimentell untersucht. Dabei existiert bisher noch keine einhellige Auffassung über ihre theoretische Begründung.

In den betrachteten Modellen konnten Selbstpulsationen und Synchronisationsverhalten nachgewiesen und in gewissem Sinn theoretisch begründet werden. Die Selbstpulsationen entstehen durch Hopf-Bifurkationen aus relativen Ruhelagen  $S^1$ -equivarianter Evolutionsgleichungen. Bei der Beschreibung des Synchronisationsverhaltens wurden neue Ergebnisse [1] über erzwungene Symmetriebrechung in equivarianten Gleichungen benutzt. Diese Ergebnisse ermöglichten auch die Untersuchung von pulsierenden Laserzuständen, die aus stabilen relativen Ruhelagen entstehen, wenn diese durch geeignete nichtpulsierende externe Signale angeregt werden.

Die Selbstpulsationen, insbesondere ihre Frequenzen und die Modulationstiefen der emittierten Lichtintensitäten und der Ladungsträgerdichten, wurden in Abhängigkeit von den Laserparametern qualitativ und quantitativ beschrieben. Dabei wurde das Programmpaket AUTO mit einem Programm von U. Bandelow zur Berechnung der implizit gegebenen rechten Seiten verknüpft. Zum Synchronisationsverhalten wurden folgende qualitative Ergebnisse erzielt: Beschreibung der Bereiche im Raum der den inneren Zustand bzw. die äußere Störung des Lasers bestimmenden Parameter, in denen Synchronisation auftritt; Zuordnung der Frequenzen der Selbstpulsation bzw. des externen Signals, die aufeinander „einlocken“.

### Literatur

1. D. PETERHOF, L. RECKE, *Abstract forced symmetry breaking and applications to forced frequency locking in  $S^1$ -equivariant dynamical systems*, in Vorbereitung.

2. D. PETERHOF, L. RECKE, B. SANDSTEDT, *Forced frequency locking in laser modeling*, in Vorbereitung.

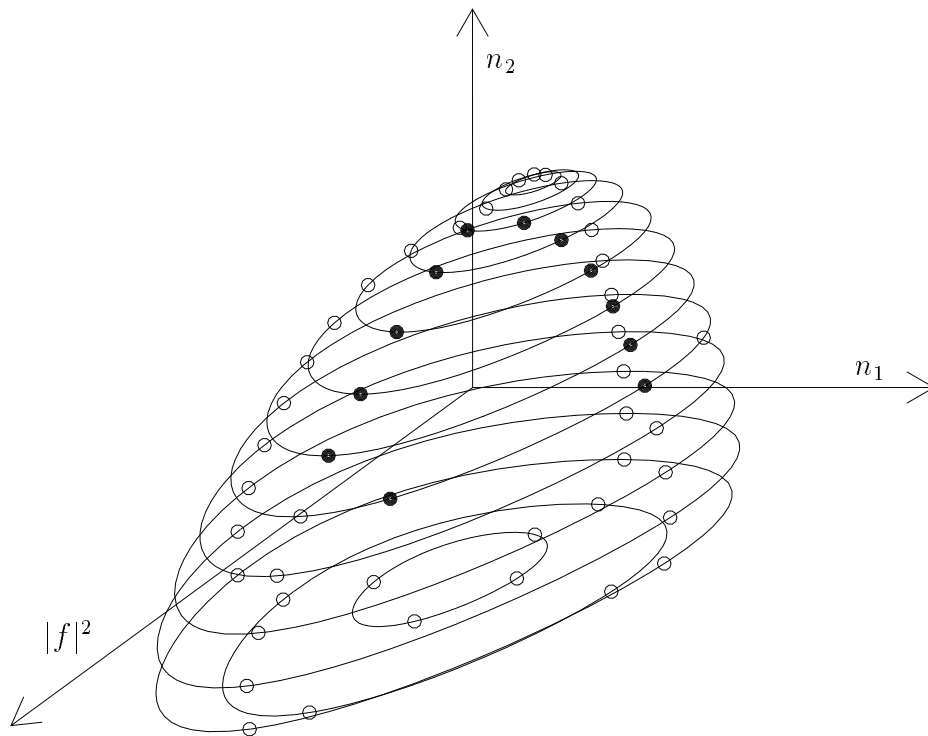


Abb. 1: Familie der periodischen Orbits der Selbstpulsationen (parametrisiert durch den an der niedriggepumpten Sektion anliegenden Strom) mit einer subkritischen und einer superkritischen Hopf-Bifurkation und einer dynamischen Sattel-Knoten-Bifurkation

## Nichtlineare Systeme mit Unstetigkeiten

**Bearbeiter:** R. J. Rumpel

Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen mit Unstetigkeitsflächen stellen bei vielen Anwendungen ein geeignetes Modell dar. Zum Beispiel tritt bei Schwingungen mit trockener Reibung oder bei Systemen mit Relaissteuerung die unstetige Signumfunktion in der beschreibenden Gleichung auf. Bei solchen Systemen kann es zu Bewegungen auf der Unstetigkeitsfläche kommen. In diesem Fall ist es nicht ausreichend, das System als Differentialinklusion zu interpretieren. Als eine Möglichkeit zur Beschreibung der Dynamik auf der Unstetigkeitsfläche dient die Methode der äquivalenten Steuerung.

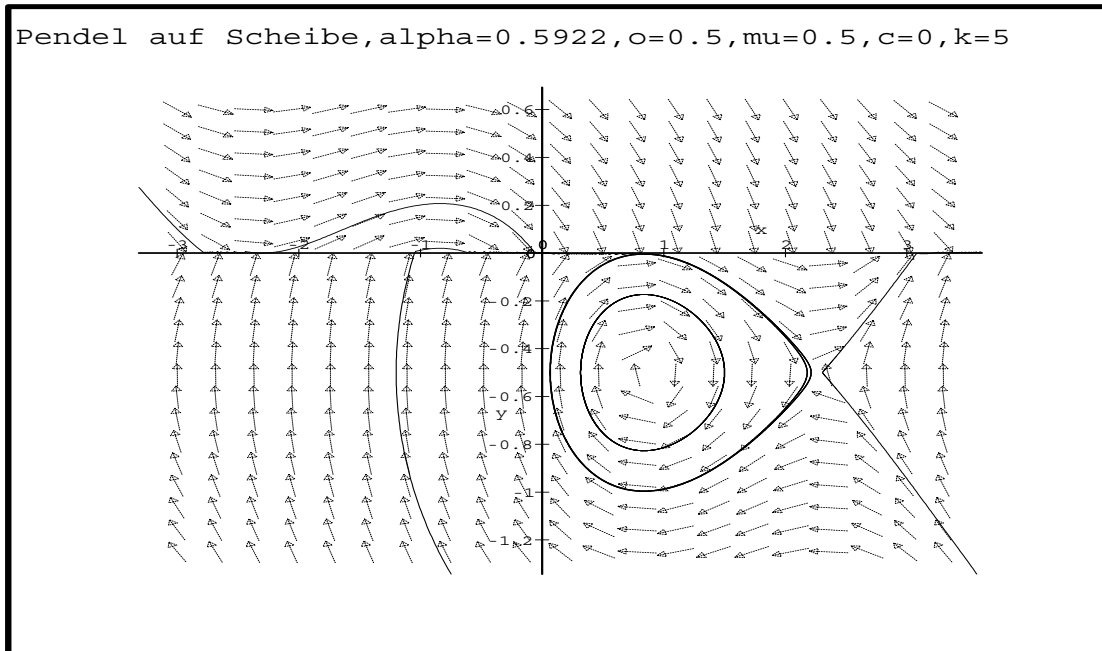


Abb. 1: Phasenportrait für das selbsterregte Pendel mit trockener Reibung

Das Ziel der Untersuchungen besteht darin, qualitative Aussagen über das Verhalten solcher Systeme herzuleiten. Bei selbsterregten nichtlinearen Schwingungen mit trockener Reibung mit einem Freiheitsgrad konnte gezeigt werden, unter welchen Bedingungen ein homokliner Orbit persistiert und wann Grenzyklen existieren. Von Interesse ist darüber hinaus das Verhalten höherdimensionaler Systeme. Hierbei wird die Theorie singular gestörter Systeme auf Differentialgleichungen mit Unstetigkeiten angewandt. Ergebnisse zur asymptotischen Darstellung entsprechender Lösungen liegen vor.

## Literatur

1. R. J. RUMPEL, *On the qualitative behaviour of nonlinear oscillators with dry friction*, Proceedings ICIAM 95, in Vorbereitung.

## Existenz und Stabilität von Fronten und Pulsen in den FitzHugh-Nagumo-Gleichungen

**Bearbeiter:** B. Sandstede

**Kooperation:** M. Krupa (Wien), P. Szmolyan (Wien)

In diesem Projekt wurden Travelling-Wave-Lösungen in den FitzHugh-Nagumo-Gleichungen untersucht. Diese Gleichungen, bestehend aus singular gestörten Reaktions-Diffusions-Gleichungen, dienen als Modell für die Ausbreitung von Signalen in Nervenreizleitungen. Deshalb interessiert man sich für die Existenz und Stabilität von Pulsen oder Fronten, d. h. asymptotisch konstanten travelling waves. Von besonderem Interesse sind N-Fronten und N-Pulse, die mehrere Bits an Informationen übertragen können.

Beispiele von Pulsen in diesen Gleichungen sind die schnellen Wellen, die stabil sind und scharfe transition layers beinhalten, sowie die langsamen Wellen, die instabil sind und sich bis in das singuläre System hinein fortsetzen lassen. In einer ersten Arbeit [3] wurde gezeigt, daß diese so verschieden aussehenden Lösungen aber tatsächlich im Parameterraum miteinander verbunden sind. Es gibt also Pfade im Parameterraum, so daß diese Lösungen ineinander übergehen. Daß damit ein nicht entarteter Austausch von Stabilität verbunden ist, wurde in [6] bewiesen. Die entscheidende Technik in beiden Arbeiten sind Shilnikov-Variablen und die Bereitstellung von asymptotischen Entwicklungen in [3], die geometrische Methoden wie das Exchange Lemma von Jones und Kopell nicht liefern. Darüber hinaus wurde in [3] die Existenz von N-Pulsen bewiesen. Diese entstehen in einer inclination-flip-Verzweigung, sind aber sämtlich instabil und deshalb irrelevant. Unter Benutzung des Codes HOMCONT, siehe [1] und [2], wurde diese Verzweigung numerisch im gesamten Parameterraum untersucht.

In einem anderen Parameterregime wurde von Deng die Existenz von N-Fronten bewiesen. In [7] wurde gezeigt, daß diese Lösungen stabil unter Störungen sind. Dabei wurden die Techniken aus [5] konkret auf ein spezielles Verzweigungsszenario angewendet. Entscheidend bei der Behandlung war die Reduktion auf zweidimensionale invariante Mannigfaltigkeiten, wie sie in [4] bewiesen wurde.

### Literatur

1. A. R. CHAMPNEYS, YU. A. KUZNETSOV, B. SANDSTEDE, *A Numerical Toolbox for Homoclinic Bifurcation Analysis*, erscheint in International Journal of Bifurcation and Chaos.
2. A. R. CHAMPNEYS, YU. A. KUZNETSOV, B. SANDSTEDE, *HOMCONT: An AUTO86 driver for homoclinic bifurcation analysis. Version 2.0*, Technischer Report AM-R9516, CWI Amsterdam, 1995.
3. M. KRUPA, B. SANDSTEDE, P. SZMOLYAN, *Fast and slow waves in the FitzHugh-Nagumo equation*, Forschungsbericht Nr. 1, Technische Universität Wien und WIAS-Preprint No. 182, Berlin 1995.
4. B. SANDSTEDE, *Center manifolds for homoclinic solutions*, WIAS-Preprint No. 186, Berlin 1995.

5. B. SANDSTEDE, *Stability of multiple-pulse solutions*, erscheint in Transactions of the American Mathematical Society.
6. B. SANDSTEDE, *Exchange of stability of the fast and slow waves in the FitzHugh-Nagumo equation*, in Vorbereitung.
7. B. SANDSTEDE, *Stability of  $N$ -fronts bifurcating from a twisted heteroclinic loop and an application to the FitzHugh-Nagumo equation*, WIAS-Preprint No. 213, Berlin 1996.



## Singulär gestörte Systeme mit Stabilitätswechsel

**Bearbeiter:** K. R. Schneider

**Kooperation:** N. N. Nefedov (Staatliche Universität Moskau)

Die Modellierung bimolekularer Reaktionen mit schnellen Reaktionsraten führt auf ausgeartete singulär gestörte Systeme. Unter gewissen Voraussetzungen kann ein solches System mittels einer nichtlinearen Koordinatentransformation auf ein reguläres singulär gestörtes Differentialgleichungssystem zurückgeführt werden. Das assoziierte System kann in Abhängigkeit von den Anfangswerten Familien von Gleichgewichtslagen besitzen, die sich schneiden. Dieser Umstand ist mit einer Änderung ihrer Stabilität verbunden. In diesem Fall kann die Standardtheorie von Tichonov und Vasil'eva für die asymptotische Entwicklung der Lösung des Anfangswertproblems für singulär gestörte Systeme nicht mehr angewendet werden. Besteht das singulär gestörte System aus einer skalaren schnellen und einer skalaren langsamen Variablen, dann kann die Methode der Ober- und Unterlösungen für Differentialgleichungen verwendet werden, um eine asymptotische Darstellung der Lösung des Anfangswertproblems unter der Bedingung des Stabilitätswechsels zu erhalten. Es zeigt sich, daß in der Umgebung des Stabilitätswechsels eine Änderung der asymptotischen Darstellung auftritt. Unter Verwendung der Eigenschaft der Quasimonotonie und nichtglatter Familien von Gleichgewichtslösungen des assoziierten Systems konnten asymptotische Entwicklungen für die Lösung des Anfangswertproblems mit mehreren schnellen Variablen erhalten werden.

## Literatur

1. K. R. SCHNEIDER, N. N. NEFEDOV, *Singularly perturbed systems: Case of exchange of stability*, WIAS-Preprint No. 158, Berlin 1995.

## Strukturbildungsprozesse in Systemen mit kleiner Diffusion und Konvektion

**Bearbeiter:** K. R. Schneider

**Kooperation:** A. B. Vasil'eva (Staatliche Universität Moskau)

Bei der Beschreibung von Strukturbildungsprozessen spielen Reaktions-Diffusions-Konvektionsgleichungen eine grundlegende Rolle. Wir untersuchen die Existenz stationärer Lösungen vom Spike-Typ für Systeme von parabolischen Differentialgleichungen mit kleiner Diffusion und Konvektion. Diese Aufgabe führt auf die Untersuchung singular gestörter Differentialgleichungssysteme. Ohne Berücksichtigung der Konvektion liegen für skalare Gleichungen mit kleiner Diffusion und für Systeme von zwei gekoppelten Gleichungen mit kleiner Diffusion eine Reihe von Existenzaussagen vor. Um die Existenz von Spike-Lösungen auch in Gegenwart einer kleinen Konvektion zeigen zu können, kombinieren wir in der vorliegenden Arbeit zwei Methoden der Theorie singularer Störungen: die Theorie der invarianten Mannigfaltigkeiten und die Methode der Randschichtfunktionen. Unter den getroffenen Voraussetzungen kann das Problem der Existenz von Spike-Lösungen für gewisse Klassen von Systemen parabolischer Gleichungen mit kleiner Diffusion und Konvektion unter Verwendung invarianter Mannigfaltigkeiten auf das Problem der Existenz von Spike-Lösungen für eine skalare parabolische Differentialgleichung zweiter Ordnung mit kleiner Diffusion und Konvektion zurückgeführt werden. Unter einigen zusätzlichen Annahmen über die Abhängigkeit der Nichtlinearität von der Konvektion erweitern wir die Methode der Randschichtfunktionen, um die Existenz von Spike-Lösungen beweisen zu können. Als Anwendungsbeispiel betrachten wir die Belousov-Zhabotinskii-Reaktion.

### Literatur

1. K. R. SCHNEIDER, A. B. VASIL'EVA, *On the existence of transition layers of spike type in reaction-diffusion-convection equations*, WIAS-Preprint No. 170, Berlin 1995.

### 3.3 Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen

#### 3.3.1 Zusammenfassung

Die Forschungsgruppe präsentiert sich in diesem Jahr erstmals in einer reinen Projektstruktur, die sich an den drei Schwerpunkten Numerik differentiell-algebraischer Systeme auf Höchstleistungsrechnern, Numerik partieller Differentialgleichungen und Grafik orientiert. In diesem Rahmen werden kommerziell relevante Entwicklungen neben mathematischer Grundlagenforschung und Serviceleistungen für andere Forschungsgruppen betrieben.

Der Schwerpunkt *differentiell-algebraischer Systeme* konzentriert sich vornehmlich auf die Lösung hochkomplexer Probleme aus der chemischen Verfahrenstechnik. Während für Entwicklungsarbeiten der neu installierte Parallelrechner T3D am Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (ZIB) genutzt wurde, erfolgte die Anwendung auf praxisrelevante Probleme vor Ort beim Kooperationspartner Bayer AG in Leverkusen. Dabei zeigte sich insbesondere der lineare Löser dem etablierten Verfahren deutlich überlegen. Das führte zu einer Intensivierung der Zusammenarbeit mit der Aspen Technology Inc., unter anderem zu einer Lizenz für die langfristige unentgeltliche Nutzung des kommerziellen Simulators SPEEDUP zum Zwecke wissenschaftlicher Forschung. Zur Stärkung der Grundlagenforschung wurde eine Kooperation mit dem ZIB aufgebaut.

Bei den *partiellen Differentialgleichungen* geht es in erster Linie um die Entwicklung und Analyse von Diskretisierungen durch Finite-Elemente- oder Finite-Volumen-Verfahren und von Multilevel-Methoden zur Lösung der resultierenden diskreten Probleme. Dabei erfolgte im Berichtsjahr auf breiter Ebene der Einstieg in die Verwendung unstrukturierter Gitter mit Blick auf adaptive Verfahren. Auf der Anwendungsseite entstand eine fruchtbare Zusammenarbeit mit der Gesellschaft für wasserwirtschaftliche Planung und Systemforschung mbH (WASY GmbH) auf dem Gebiet der Simulation von Grundwasserströmungen und Schadstoffausbreitung. Die Kooperation mit dem Ferdinand-Braun-Institut zur Simulation von Mikrowellenbauelementen aus dem vorigen Berichtsjahr hat sich weiter positiv entwickelt. Auch hier stehen unstrukturierte Gitter auf dem Programm. Mit der Erweiterung und Anwendung von monotonen Mehrgittermethoden auf Reibungs- und Kontaktprobleme wurden Probleme aus dem Bereich Mechanik neu in das Spektrum der Forschungsgruppe aufgenommen. Zur algorithmischen Realisierung adaptiver Multilevel-Verfahren wurde eine Zusammenarbeit mit dem ZIB auf den Weg gebracht, welche die gemeinsame Weiterentwicklung des dort entstandenen Programmsystems KASKA-DE zum Inhalt hat. Hier bestehen in Zukunft auch wichtige Aufgaben über den Rahmen der Forschungsgruppe hinaus.

Im Berichtsjahr begann die personelle und sachliche Ausgestaltung des *Grafik*-Schwerpunktes. Die Forschungsgruppe übernimmt damit Serviceleistungen für das gesamte Institut.

Schließlich wurden von der Forschungsgruppe zusammen mit anderen Veranstaltern das „DAE-Koordinationstreffen“ im Rahmen des BMBF-Projekts und der „German-Polish Workshop on Multilevel Methods in Science and Industry“ am WIAS organisiert und damit die Entwicklung nationaler und internationaler Kontakte weiter vorangetrieben.

### 3.3.2 Projekte

#### Numerische Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen

**Bearbeiter:** J. Borchardt, F. Grund, D. Horn, T. Michael, H. Sandmann

**Kooperation:** L. Brüll, F. Hubbuch (Bayer AG Leverkusen), R. Zeller (Cray Research GmbH München), T. Garratt (AspenTech UK Ltd., Cambridge), U. Nowak (ZIB), O. Abel (Lehrstuhl für Prozeßtechnik, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen), St. Zitney (Cray Research, Inc., Eagan, USA), G. Wozny (Institut für Prozeß- und Anlagentechnik, TU Berlin)

**Förderung:** BMBF, im Rahmen eines Programms auf ausgewählten Gebieten anwendungsorientierter Mathematik

Die mathematische Modellierung verfahrenstechnischer Prozesse in der chemischen Industrie führt zu Anfangswertaufgaben für Systeme von nichtlinearen Algebro-Differentialgleichungen (DAE). Entsprechend der Modellierung chemischer Anlagen (siehe z. B. Abb. 1) ergeben sich strukturierte Systeme von DAE's. Diese Struktur wird in den von uns entwickelten numerischen Verfahren ausgenutzt. Die Algorithmen werden sowohl auf Vektorrechnern als auch auf Parallelrechnern mit distributed und shared Memory implementiert. Parallelisierungen werden auf den folgenden Niveaus des Lösungsprozesses betrachtet:

- Differentialgleichungen,
- nichtlineare Gleichungen,
- lineare Gleichungen.

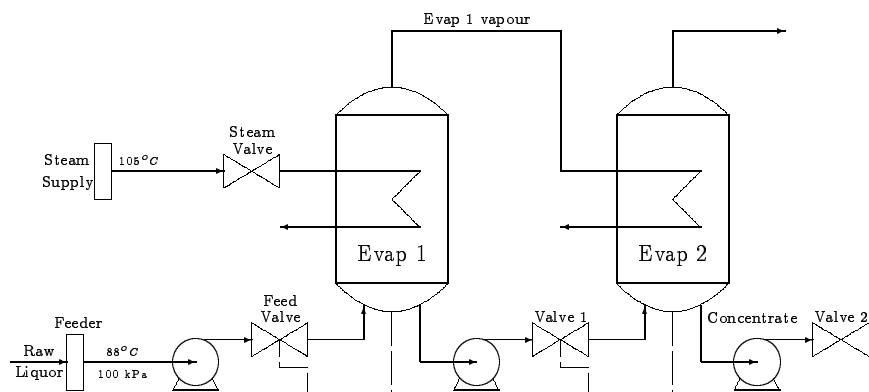


Abb. 1: Flußbild der Doppeleffektverdampferanlage DYNEVAP

Auf dem Niveau der Differentialgleichungen werden stark gekoppelte Teilgleichungssysteme zu Blöcken zusammengefaßt und mit einem Block-Waveform-Relaxationsverfahren [1] gelöst. Dabei hat sich die Bestimmung einer Blockpartitionierung mittels Graphenalgorithmien als ein anspruchsvolles Problem herausgestellt. Es hat sich gezeigt, daß nur für eingeschränkte Aufgabenklassen eine für Waveform-Verfahren geeignete Blockpartitionierung (siehe Abb. 2) bestimmt werden kann. Für den in der Praxis wesentlichen Fall der Destillationskolonnen können wir Modellierungsrestriktionen angeben, unter denen eine solche Partitionierung existiert.

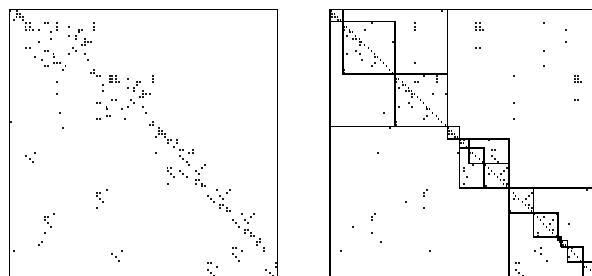


Abb. 2: DYNEVAP: Jacobi-Matrixstruktur vor und nach der Blockpartitionierung

Um allgemeinere Aufgabenklassen behandeln zu können, wurde verstärkt an einem Parallelisierungsansatz auf dem Niveau der nichtlinearen Gleichungen gearbeitet. Dabei wird das nach Zeitdiskretisierung entstehende nichtlineare Gleichungssystem zu einem System erweitert, das aus Teilsystemen mit disjunkten Argumenten und einem Hauptsystem besteht. Dieses erweiterte System wird mit einem strukturierten Newton-Verfahren [2] gelöst, wobei die linearen Teilsysteme parallel behandelt werden (siehe Projekt „Numerische Lösung strukturierter DAE-Systeme“, S. 77). Hierzu wurde auf dem moderat parallelen Rechner CRAY J90 ein einstufig strukturiertes Newton-Verfahren implementiert, bei dem Teilsysteme nach rein topologischen Kriterien (Minimierung der Anzahl der äußeren Variablen und Erzeugung möglichst gleich großer Gleichungsblöcke) zu Blöcken zusammengefaßt werden. Den Flaschenhals der Parallelisierung bildet das Hauptsystem (sequentieller Anteil des Verfahrens). Aus diesem Grund wurden von uns verschiedene Möglichkeiten untersucht, den Rechenzeitaufwand für die Lösung des Hauptsystems zu reduzieren [2]. Für eine Destillationsanlage mit 52 Teilsystemen wurde auf der CRAY J90 ein bezüglich der Rechenzeit maximaler Beschleunigungsfaktor von 3,9 für acht Blöcke bei Verwendung von acht Prozessoren erzielt [2].

Zur Lösung der Anfangswertaufgaben sind konsistente Anfangswerte zu berechnen. Sie sind auch bei einer Reinitialisierung während der dynamischen Simulation und für die Bestimmung stationärer Lösungen erforderlich. Hierzu sind große schwach besetzte nichtlineare Gleichungssysteme mit irregulärer Struktur zu behandeln. Für diese Aufgabenklasse wurde ein zweistufiges Verfahren entwickelt (siehe Projekt „Numerische Lösung schwach besetzter Systeme nichtlinearer Gleichungen“, S. 80) und auf einer CRAY T3D implementiert.

Zuerst werden mit einem Suchverfahren Startwerte für ein modifiziertes Newton-Verfahren ermittelt. Das Suchverfahren basiert auf Block-Gauß-Seidel- und Block-Gauß-Seidel-Newton-Iterationsverfahren unter Verwendung von Moore-Penrose-Pseudo-Inversen, um die unterbestimmten linearen Gleichungssysteme zu lösen, die bei der iterativen Lösung der Teilsysteme auftreten. Mit dieser Näherung wird dann ein modifiziertes gedämpftes Newton-Verfahren gestartet. Da numerisch singuläre Jacobi-Matrizen nicht auszuschließen sind, wurde das Newton-Verfahren mit einer Matrix-Analyse ausgestattet, um durch Ändern weniger Lösungskomponenten eine reguläre Jacobi-Matrix zu erhalten. — Die schwache Besetztheit und die Strukturierung des Gleichungssystems sowie der Jacobi-Matrix werden in beiden Schritten ausgenutzt.

Die linearen Systeme mit schwach besetzten Matrizen werden mit Sparse-Matrix-Techniken behandelt. Es werden die im Projekt „Numerische Lösung schwach besetzter Gleichungssysteme“ (siehe S. 79) beschriebenen Verfahren eingesetzt. Die Methoden wurden an großen Simulationsbeispielen der Bayer AG Leverkusen im Simulator SPEEDUP erprobt, wozu uns

von Cray Research die entsprechende Schnittstelle offengelegt worden ist. Die Resultate für die Gesamtsimulation einer Destillationskolonne TDA mit 13 436 Gleichungen und eines Reaktormodells NIT mit 3 268 Gleichungen sind in Tabelle 1 dargelegt. Dabei ist FRONTAL ein linearer Solver in SPEEDUP, der die Frontal-Methode benutzt, und GSPAR der von uns entwickelte Solver.

Anlage	Zeitintervall in h	SPEEDUP mit		
		FRONTAL	GSPAR	in %
TDA	(0,2)	380.89	254.75	67
NIT	(0,10)	451.71	283.73	63

Tabelle 1: Gesamtsimulation, Rechenzeit in CPU-Sek., CRAY C90

Die beträchtliche Verringerung der gesamten Simulationszeit ist dadurch zu erklären, daß GSPAR bei der Faktorisierung mit gegebener Pivotreihenfolge schneller als FRONTAL ist. Es kommt hinzu, daß GSPAR numerisch stabiler ist, weshalb weniger Faktorisierungen und Vor- und Rückwärtsrechnungen und damit weniger Newton-Schritte erforderlich sind.

Das Programm zur automatischen Erzeugung einer Schnittstelle für den DAE-Solver aus SPEEDUP-Dateien wurde weiterentwickelt. Es wird eine erweiterte Schnittstelle erzeugt, die auch datentypbezogene Initialisierungs- und Intervallgrößen enthält. Diese Größen geben einen Startwert für die Anfangswertberechnung und erlauben eine Verifikation der Lösung während der Simulation. Eine zusätzlich erzeugte Routine erlaubt die Ausgabe von Größen während der Rechnung, die durch ihre SPEEDUP-Namen identifiziert werden. Die Anpassung des Programms an die neue SPEEDUP-Version 5.5 wurde durchgeführt. Die Schnittstelle wurde für Beispiele bis zu einer Größe von 13 436 Gleichungen erzeugt und getestet.

Begonnen wurden Arbeiten zur Generierung eines Interpretercodes zur teilsystemorientierten Berechnung der Funktionswerte und Jacobi-Matrixelemente. Dieser Interpretercode wird durch Rückerkennung der Gleichungen aus den SPEEDUP-Routinen RES und DERIV erzeugt. Zur Überprüfung der Ergebnisse wurde die Ausgabe der erzeugten Gleichungen in  $\text{\LaTeX}$ -Form implementiert.

Die Projektgruppe erhielt durch Unterstützung von Prof. Dr. J. Sprekels und von Cray Research, Inc., Eagan, die Autorisierung von Aspen Technology, Inc., Cambridge, USA, den Simulator SPEEDUP für fünf Jahre auf einem Cray-Rechner im ZIB für die Entwicklung numerischer Verfahren für DAE's kostenlos zu nutzen. Diese Autorisierung haben nur einige wenige Universitäten in den USA.

Für die Erprobung der linearen Solver mit SPEEDUP wurde uns ein Account auf Cray-Rechnern in Eagan, USA, mit monatlich 5 kostenlosen CPU-Stunden zur Verfügung gestellt.

## Literatur

1. F. GRUND, J. BORCHARDT, D. HORN, T. MICHAEL, H. SANDMANN, *Differential-algebraic systems in the chemical process simulation*, Proceedings Workshop Scientific Computing in der Verfahrenstechnik, zur Veröffentlichung 1995 eingereicht.
2. J. BORCHARDT, L. BRÜLL, F. GRUND, D. HORN, F. HUBBUCH, T. MICHAEL, H. SANDMANN, R. ZELLER, *Numerische Lösung großer strukturierter DAE-Systeme in der chemischen Prozeßsimulation*, zur Veröffentlichung 1995 eingereicht.

## Numerische Lösung strukturierter DAE-Systeme

**Bearbeiter:** J. Borchardt, T. Michael, M. Uhle

Forschungsgegenstand sind parallelisierbare numerische Verfahren zur Lösung von Anfangswertproblemen großer Systeme von Algebra-Differentialgleichungen (DAE)

$$\mathcal{F}(t, y(t), \dot{y}(t), u(t)) = 0, \quad y(t_0) = y_0,$$

$\mathcal{F}: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^Q \rightarrow \mathbb{R}^N$ ,  $t \in [t_0, t_{END}]$ ,  $u(t)$  gegeben,  $y(t)$  gesucht, wie sie etwa bei der Prozeßsimulation chemischer Anlagen oder in der Schaltkreissimulation auftreten.

Solche Systeme sind oftmals schon durch die Modellierung entsprechend ihrer funktionellen Bestandteile in Teilsysteme strukturiert. Die von uns betrachteten Block-Waveform-Iterationsverfahren [1] weisen günstige Voraussetzungen für eine Parallelisierung auf der Ebene der DAE-Systeme auf. Sie sind jedoch nur für solche Aufgabenklassen anwendbar, für die eine für diese Verfahren geeignete Blockzerlegung bestimmt werden kann. Für DAE-Systeme, bei denen aufgrund starker Kopplungen zwischen den Teilsystemen keine solche Blockzerlegungen existieren, betrachten wir parallelisierbare strukturierte Newton-Verfahren. Hierbei werden die DAE-Systeme nach ihrer Zeitdiskretisierung in geeignet erweiterte nichtlineare Gleichungssysteme mit spezieller Blockstruktur überführt [2] und nach Linearisierung über die parallele Behandlung linearer Teilgleichungssysteme gelöst.

Bei einstufig strukturierten Verfahren werden die inneren Variablen  $x = (x_1, \dots, x_M)^T$  und die äußeren Variablen  $z = (z_1, \dots, z_M)^T$  der Teilsysteme  $F = (F_1, \dots, F_M)^T$  bestimmt und das um Identifikationsgleichungen für äußere Variablen erweiterte System

$$\begin{aligned} F_i(x_i, z_i) &= 0, & i = 1(1)M \\ G(z) &= 0, \end{aligned}$$

erzeugt. Wir partitionieren dann  $F_i = (F_{i1}, F_{i2})^T$  so, daß  $\partial_{x_i} F_{i1}$  regulär ist. Dabei erfolgt die Auswahl der Gleichungen  $F_{i1}$  mit Hilfe eines Algorithmus zur Pivotwahl in den überbestimmten Teilmatrizen  $\partial_{x_i} F_i$ . Die Bestimmung der Inkremente für einen Schritt des Newtonverfahrens erfolgt in 3 Teilschritten:

(i) Für  $i = 1(1)M$ : Bestimme die Vektoren  $\Delta \hat{x}_i$  und  $\hat{F}_{i2}$  sowie die Matrizen  $B_i$  und  $C_i$  aus:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \partial_{x_i} F_{i1} & \emptyset \\ \partial_{x_i} F_{i2} & I \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \hat{x}_i \\ \hat{F}_{i2} \end{pmatrix} &= - \begin{pmatrix} F_{i1} \\ F_{i2} \end{pmatrix} \\ \begin{bmatrix} \partial_{x_i} F_{i1} & \emptyset \\ \partial_{x_i} F_{i2} & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_i \\ C_i \end{bmatrix} &= - \begin{bmatrix} \partial_{z_i} F_{i1} \\ \partial_{z_i} F_{i2} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

(ii) Bestimme mit  $C = \text{diag}(C_i)$  und  $\hat{F}_2 = (\hat{F}_{12}, \dots, \hat{F}_{M2})^T$  die äußeren Variablen  $\Delta z$  aus:

$$\begin{bmatrix} C \\ \partial_z G \end{bmatrix} \Delta z = - \begin{pmatrix} \hat{F}_2 \\ G \end{pmatrix}$$

(iii) Für  $i = 1(1)M$ : Berechne die inneren Variablen  $\Delta x_i = \Delta \hat{x}_i + B_i \Delta z_i$ .

Bei der Lösung der linearen Gleichungssysteme in Schritt **(i)** nutzen wir deren spezielle Struktur aus. Da das Gleichungssystem so erweitert wurde, daß die Argumente verschiedener  $F_i$  disjunkt sind, können die Schritte **(i)** und **(iii)** für alle Blöcke  $i = 1(1)M$  unabhängig voneinander und damit parallel ausgeführt werden. Mehrstufig strukturierte Newton-Verfahren erhält man, wenn man dieses Vorgehen rekursiv anwendet.

Einstufig strukturierte Newtonverfahren wurden von uns implementiert und an praxisrelevanten Beispielen getestet. Sie haben sich dabei als moderat parallele Verfahren erwiesen.

### Literatur

1. F. GRUND, J. BORCHARDT, D. HORN, T. MICHAEL, H. SANDMANN, *Differential-algebraic systems in the chemical process simulation*, Proceedings Workshop Scientific Computing in der Verfahrenstechnik, zur Veröffentlichung 1995 eingereicht.
2. J. BORCHARDT, L. BRÜLL, F. GRUND, D. HORN, F. HUBBUCH, T. MICHAEL, H. SANDMANN, R. ZELLER, *Numerische Lösung großer strukturierter DAE-Systeme in der chemischen Prozeßsimulation*, zur Veröffentlichung 1995 eingereicht.
3. J. BORCHARDT, F. GRUND, D. HORN, M. UHLE, *MAGNUS-Mehrstufige Analyse großer Netzwerke und Systeme*, Report No. 9, WIAS, 1994.



## Numerische Lösung schwach besetzter Gleichungssysteme

**Bearbeiter:** F. Grund

**Kooperation:** St. Zitney (Cray Research, Inc., Eagan, USA)

Bei der numerischen Lösung von Systemen von nichtlinearen Algebro-Differentialgleichungen (DAE) sind lineare Gleichungssysteme mit schwach besetzten Matrizen zu lösen. Systeme von DAE's kommen in der chemischen Prozeßsimulation, der Netzwerkanalyse und bei der Simulation von Robotern vor. Die Anzahl der Gleichungen kann sehr groß (mehrere 10 000 Gleichungen) sein. Außerdem besitzen die Systeme vielfach eine Struktur. — Die Gleichungssysteme sind entsprechend den genannten Aufgabenstellungen nicht symmetrisch und sehr schwach besetzt. Sie werden mit dem Gaußschen Eliminationsverfahren behandelt bzw. bei strukturierten Problemen mit Blockverfahren, die wiederum die Eliminationsverfahren verwenden. Da bei den Systemen von DAE's die Verteilung der Nichtnullelemente in der Jacobi-Matrix sich nicht ändert, bei den Faktorisierungen fast immer mit derselben Pivotreihenfolge gearbeitet wird und viele Systeme mit gleicher Jacobi-Matrix aber verschiedenen rechten Seiten zu lösen sind, wird mit einem Pseudo-Code gearbeitet. Er beschreibt die für die Faktorisierung bzw. Vor- und Rückwärtsrechnung erforderlichen Operationen und ist auch für Vektor- und Parallelrechner geeignet [1]. Nachdem im vergangenen Jahr die Faktorisierung für Vektorrechner betrachtet worden war, wurden nun die Methoden für die Faktorisierung und Vor- und Rückwärtsrechnung für Vektorrechner und für Parallelrechner mit shared bzw. distributed Memory entwickelt. Die Verfahren wurden an verschiedenen, aus der Industrie stammenden und teilweise sehr großen Systemen erprobt. Es zeigte sich, daß die Anzahl der Vektorbefehle groß bzw. bei Parallelrechnern das Speedup bei Vervielfachung der Prozessoren bemerkenswert ist. Beim Vergleich mit dem Solver Frontal, der die Frontal-Methode verwendet, ergab sich, daß unsere Methoden für die Faktorisierung mit gegebener Pivotreihenfolge in etwa die Hälfte der Rechenzeit erfordern und numerisch stabiler sind. — Die Methoden wurden mit dem Simulator SPEEDUP erprobt (vgl. Projekt „Numerische Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen“, S. 74). Verschiedene Institutionen zeigen großes Interesse an den entwickelten Methoden.

### Literatur

1. F. GRUND, *Numerische Lösung von hierarchisch strukturierten Systemen von Algebro-Differentialgleichungen*, in Intern.Ser. of Num. Math., Vol. 117, Birkhäuser Verlag Basel, 1994, pp. 17–31.

## Numerische Lösung schwach besetzter Systeme nichtlinearer Gleichungen

**Bearbeiter:** H. Sandmann

**Kooperation:** U. Nowak (ZIB)

Bei der numerischen Lösung von Anfangswertaufgaben für Systeme nichtlinearer Algebra-Differentialgleichungen, z. B. aus der chemischen Prozeßsimulation und Verfahrenstechnik, sind große schwach besetzte nichtlineare Gleichungssysteme  $F(x) = 0$  mit irregulär strukturierter Jacobi-Matrix zu lösen, um konsistente Anfangswerte zu gewinnen. Auch während der dynamischen Simulation bei Reinitialisierung des Prozesses an einer Unstetigkeitsstelle und schließlich bei der Bestimmung stationärer Werte sind Lösungen nichtlinearer Gleichungssysteme zu berechnen. Die Modellierung der verkoppelten Teile realer Anlagen und/oder Prozeßabläufe prägt  $F$  und der zugehörigen Jacobi-Matrix eine schwache Besetztheit und Teilsystem-Struktur ein. Außer diesen Struktureigenschaften sind für die Unbekannten restriktive Wertebereiche gegeben, wie positive Konzentrationen, Dichten u. a. m. Die durch die Strukturierung gegebene grob- und fein-granulare Parallelität der Aufgabe wurde bei einer Implementierung eines skalierbaren synchronen Algorithmus auf CRAY T3D berücksichtigt.

Das Lösungsverfahren kann zwar von einem zulässigen  $x_{init}$  ausgehen, aber auch ein affin invariantes Newton-Verfahren muß von  $x_{init}$  aus nicht notwendig konvergieren. In diesem Fall müssen in einem ersten Schritt mit einem Suchverfahren Startwerte für ein modifiziertes Newton-Verfahren ermittelt werden. Hierbei werden sukzessiv die aufgrund der Modellierung stets unterbestimmten nichtlinearen Teilsysteme  $F_i$  linearisiert. Die unterbestimmten linearen Gleichungssysteme werden unter Verwendung von Moore-Penrose-Pseudo-Inversen gelöst. Aus diesem Prozeß erhält man zulässige Werte für die in  $F$  linear gekoppelten Unbekannten und grobe Näherungen für die übrigen. Mit dieser Näherung wird mittels Block-Gauß-Seidel-Newton-Iterationsverfahren (jeder Block entspricht einem Teilsystem  $F_i$ ) eine neue Näherungslösung für  $F = 0$  bestimmt. Die Newton-Iteration für  $F_i$  wird mit der aus  $F_{i-1}$  gewonnenen Näherung gestartet und die Newton-Korrektur unter Verwendung von Pseudo-Inversen berechnet. Die Näherungslösung aus dem Block-Gauß-Seidel-Newton-Iterationsverfahren dient nun als Startwert für ein modifiziertes gedämpftes Newton-Verfahren für  $F = 0$ .

Der Lösungsprozeß wird durch den Umstand kompliziert, daß numerisch singuläre Jacobi-Matrizen nicht auszuschließen sind. Deshalb wurde das Newton-Verfahren mit einer Matrix-Analyse ausgestattet, die vor allem die schwache Besetztheit und teilsystemorientierte Strukturierung von  $F$  und der Jacobi-Matrix ausnutzt. Durch Ändern weniger Näherungslösungskomponenten, die die Singularität bewirken, läßt sich eine reguläre Jacobi-Matrix erhalten, wobei die schwache Besetztheit eine wesentliche Voraussetzung ist, da sonst die durch Änderung gewisser Lösungskomponenten erzeugte neue Aufgabe der alten nicht mehr benachbart ist.

### Adaptive monotone Mehrgittermethoden für freie Randwertprobleme

**Bearbeiter:** R. Kornhuber

**Kooperation:** R. H. W. Hoppe (Universität Augsburg), H. Yserentant (Universität Tübingen), R. Beck, B. Erdmann, R. Roitzsch (ZIB)

Das Projekt ist die Fortsetzung eines entsprechenden Vorhabens im Berichtsjahr 1994.

Monotone Mehrgittermethoden stellen eine Erweiterung klassischer Verfahren für selbstadjungierte elliptische Probleme auf gewisse stückweise lineare Energiefunktionale dar. Die Grundidee besteht in einer Beschränkung der Grobgitterkorrektur auf die Umgebung der aktuellen geglätteten Iterierten, in der eine Linearisierung des Energiefunktionals möglich ist. Auf diese Weise erhält man ein global konvergentes Verfahren, mit dem sich Hindernisprobleme oder zeitdiskrete Probleme vom Stefan-Typ mit vergleichbarer Effizienz lösen lassen wie im entsprechenden linearen Fall.

Natürlich sollte die zugrundeliegende Folge von Gittern an die Lösung des jeweiligen Problems angepaßt sein. Ein a posteriori Fehlerschätzer, der aus einer Zerlegung des Defektproblems in lokale Teilprobleme besteht, liefert lokale Fehlerindikatoren, welche ihrerseits die adaptive Verfeinerung der Gitter steuern.

Das gesamte Verfahren wurde in [1] ausführlich dargestellt. Eine entsprechende Monographie ist in Arbeit. Einige Bemerkungen zu den Effektivitätsraten des Fehlerschätzers finden sich in [2], während [3] eine algorithmisch motivierte Darstellung enthält.

Der Zugang ist unabhängig von der Raumdimension. Im Rahmen des Projekts „KASKADE — eine Toolbox für adaptive Multilevelmethoden“ (siehe S. 95) erfolgte die Implementierung des 3D-Falls. Numerische Experimente zeigen sogar eine quantitative Übereinstimmung mit entsprechenden Resultaten in zwei Raumdimensionen. Die Ergebnisse für ein Modellproblem mit dem in Abbildung 1 dargestellten freien Rand befinden sich in Tabelle 1.

Level	Tiefe	Knoten	Iterationen	Fehlerschätzung
0	0	1	2	117 %
1	1	15	1	93.0 %
2	1	161	2	61.6 %
3	3	1379	2	44.0 %
4	4	11111	3	29.6 %
5	4	14737	3	22.7 %
6	5	121755	3	12.1 %

Tabelle 1: Approximationsgeschichte

Die Anwendung und Erweiterung monotoner Mehrgittermethoden auf Kontaktprobleme ist Gegenstand eines eigenen Projekts (siehe S. 83). Weitere Entwicklungen im Rahmen einer Zusammenarbeit mit O. Klein (siehe S. 41) und D. Hömberg (siehe S. 34) aus der Forschungsgruppe 1 sind geplant.

**Literatur**

1. R. KORNUBER, *Adaptive Monotone Multigrid Methods for Nonlinear Variational Problems*, Habilitationsschrift, FU Berlin, 1995.
2. R. KORNUBER, *A posteriori error estimates for elliptic variational inequalities*, WIAS-Preprint No. 141, Berlin 1995.
3. R. KORNUBER, *Adaptive monotone multigrid methods for some non-smooth optimization problems*, WIAS-Preprint No. 156, Berlin 1995.

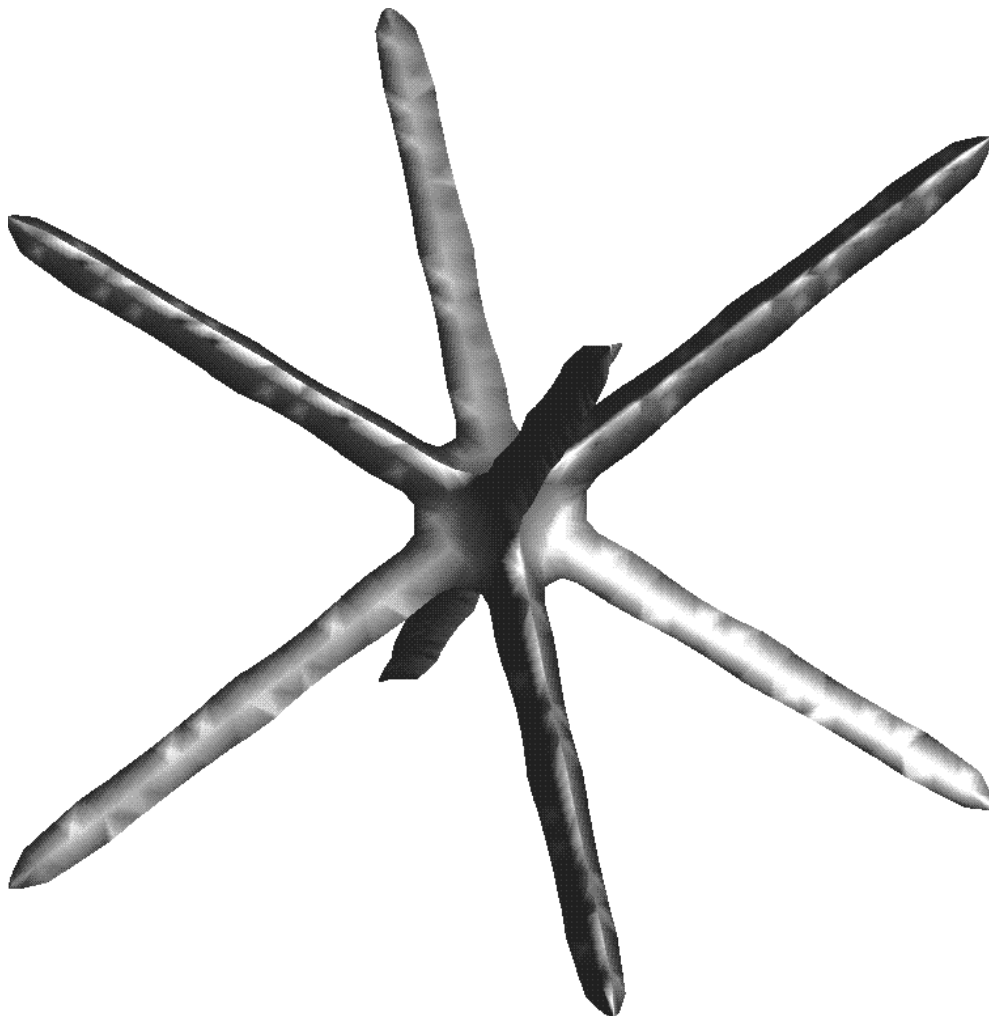


Abb. 1: Freier Rand eines Hindernis-Problems im  $\mathbb{R}^3$

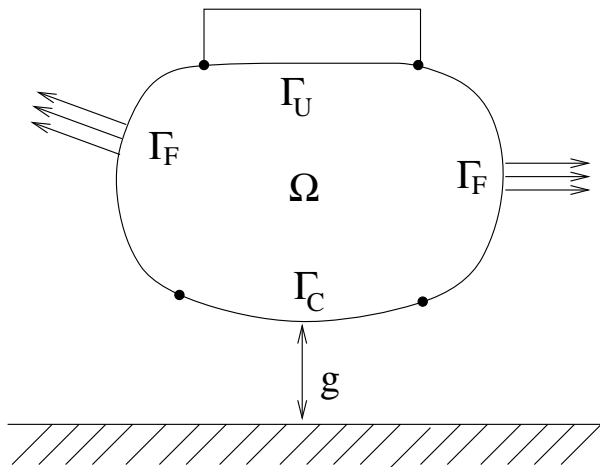
## Kontakt mit Reibung

**Bearbeiter:** A. Fischer, R. Kornhuber

**Kooperation:** M. Hillmann (INPRO GmbH Berlin), G. Zumbusch (ZIB)

Das Projekt wurde im April 1995 ins Leben gerufen mit dem Ziel der Weiterentwicklung von adaptiven monotonen Mehrgittermethoden für freie Randwertaufgaben (siehe Jahresbericht 1994 und S. 81) auf Probleme der nichtlinearen Mechanik.

Wir betrachten das quasistatische, elastomechanische Problem des Auftreffens eines Körpers  $\Omega$  auf ein absolut starres und festes Hindernis unter Berücksichtigung dabei auftretender trockener Reibung am Kontaktrand  $\Gamma_C$ . Ausgehend von den Laméschen Gleichungen für die Verschiebung  $u$  der Massepunkte von  $\Omega$  erhalten wir durch die zusätzlichen Bedingungen an die Verschiebung und die Spannung  $\sigma = \sigma(u)$  am zunächst unbekanntem Kontaktrand eine nichtlineare Randwertaufgabe. Als Kontaktbedingungen dienen uns die sogenannten *Signorini-Bedingungen*, welche besagen, daß der Körper  $\Omega$  zu keiner Zeit in das Hindernis eindringen kann und daß am Kontaktrand erst dann eine Spannung in Normalenrichtung auftreten kann, wenn es zum Kontakt gekommen ist. Diese ist dann in das Innere des Körpers gerichtet. Hinzu kommen die als *Coulombsches Gesetz* bekannten Reibungsbedingungen. Man geht hierbei solange von Haftreibung aus, bis am Kontaktrand der Wert der Tangentialspannung betragsmäßig das Produkt aus Reibungskoeffizienten und Normalspannung erreicht hat. Nun gleitet der Körper entlang der Oberfläche des Hindernisses. Die Geschwindigkeit seiner Massepunkte am Kontaktrand in Tangentialrichtung ist negativ proportional zur Tangentialspannung (siehe Abbildung 1).



- Kontaktbedingungen (*Signorini*)

$$\begin{aligned} \sigma_n &\leq 0 \\ u_n - g &\leq 0 \quad \text{auf } \Gamma_C \times ]0, T[ \\ \sigma_n(u_n - g) &= 0 \end{aligned}$$

- Reibungsbedingungen (*Coulombsches Gesetz*)

$$u_n = g \Rightarrow \begin{cases} |\sigma_T| < \mu |\sigma_n| \Rightarrow \dot{u}_T = 0 \\ |\sigma_T| = \mu |\sigma_n| \Rightarrow \\ \Rightarrow \exists \lambda > 0 : \dot{u}_T = -\lambda \sigma_T \end{cases} \text{ auf } \Gamma_C \times ]0, T[$$

Abb. 1: Beim elastomechanischem Auftreffen des Körpers  $\Omega$  auf ein starres Hindernis betrachten wir zusätzliche Kontakt- und Reibungsbedingungen.

Beim Übergang zur Variationsformulierung wird aus der klassischen Formulierung eine Quasi-Variationsungleichung. Existenz- und Eindeutigkeitsnachweise sind Gegenstand aktueller Forschung. Für eine numerische Lösung des Minimierungsproblems sind Newtonverfahren wegen nichtdifferenzierbarer Anteile im Energiefunktional nicht möglich, statt dessen verwendet man

üblicherweise *penalty-Verfahren*. Diese haben jedoch den Nachteil, daß die Kondition des zugehörigen diskreten Problems vom zusätzlich eingeführten Strafterm abhängt. Ziel ist es daher, das Minimierungsproblem direkt mit Hilfe adaptiver monotoner Mehrgittermethoden zu lösen.

Als Grundlage für unsere numerischen Experimente wird uns das Programmpaket KASKADE dienen, welches auf diese Problemklasse hin erweitert werden soll. Eine Zusammenarbeit mit dem ZIB und den Mitarbeitern des Projektes „KASKADE — eine Toolbox für adaptive Multilevelmethoden“ (siehe S. 95) besteht. Erste Ergebnisse für Probleme in zunächst zwei Raumdimensionen werden für das erste Halbjahr 1996 erwartet.

## Entwicklung algebraischer Multilevelverfahren

**Bearbeiter:** J. Fuhrmann

**Kooperation:** A. Reusken (TU Eindhoven), K. Gärtner (ETH Zürich), N. Neuss (Universität Heidelberg), G. Wittum (Universität Stuttgart)

**Förderung:** DFG (SFB 359)

Die Konstruktion robuster Multigrid- und Multilevelverfahren bereitet Schwierigkeiten z. B. für Konvektions-Diffusionsprobleme, wie sie bei der Lösung der Halbleitergleichungen oder der Simulation von Transportprozessen in porösen Medien (S. 87) auftreten, und für diskrete Probleme auf unstrukturierten Netzen, denen keine Finite-Elemente-Hierarchie zugrundeliegt. Algebraische Mehrgitterverfahren, deren Grundidee darin besteht, die notwendigen Grobgitterprobleme und Transferoperatoren allein aus der auf dem feinen Gitter vorhandenen Information zu erzeugen, lassen auf eine Lösung dieser Fragestellung hoffen.

Ein Schritt eines Zweigitterverfahrens zur Lösung des Problems  $Au = f$  besteht aus folgenden Komponenten:

$$\begin{array}{ll}
 u & = u - R(Au - f) & \text{Vorglättung} \\
 d & = Au - f & \text{Residuumsberechnung} \\
 f_C & = Qd & \text{Restriktion} \\
 u_C & = S^{-1}f_C & \text{Groggitterlösung} \\
 u & = u - Pu_C & \text{Prolongation \& Korrektur} \\
 u & = u - R(Au - f) & \text{Nachglättung.}
 \end{array}$$

Die rekursive Anwendung dieses Verfahrens führt zum Mehrgitterverfahren. Die Idee des in diesem Projekt bearbeiteten modularen algebraischen Mehrgitterverfahrens besteht in der Herleitung der Komponenten aus der Matrixpartitionierung

$$A = \begin{pmatrix} A_{FF} & A_{FC} \\ A_{CF} & A_{CC} \end{pmatrix},$$

welche durch die – unter Umständen a priori gegebene – Einteilung der Variablen in Grobgitter- und Feingittervariablen erzeugt wird.

Seien  $L$  und  $U$  invertierbar und  $A_{FF} = L - D + U$ . Wir definieren dann:

$$\begin{array}{ll}
 P & = \begin{pmatrix} -U^{-1}A_{FC} \\ I \end{pmatrix} \\
 Q & = \begin{pmatrix} -A_{CF}L^{-1} & I \end{pmatrix} \\
 S & = QAP = A_{CC} - A_{CF}L^{-1}DU^{-1}A_{FC} \\
 A_C & \approx S \\
 R & \text{klassisches Iterationsverfahren.}
 \end{array}$$

Für  $L = D = U = A_{FF}$  und  $R = \begin{pmatrix} A_{FF}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$  erhalten wir einen exakten Löser. Die Invertierung von  $A_{FF}$  ist aber nur in Spezialfällen möglich. Sind  $L$ ,  $U$  untere bzw. obere Dreiecksmatrizen, erhalten wir eine Art Gauß-Seidel-Schritt zur Invertierung von  $A_{FF}$  und damit einen Vorkonditionierer für ein iteratives Lösungsverfahren.

Die Definition der Grobgitterknoten kann Informationen aus verschiedenen Quellen benutzen. Auf logisch orthogonalen Netzen wird die übliche Vergrößerung verwendet. Auf hierarchisch strukturierten Netzen kann die dort gegebene Strukturinformation ausgewertet werden. Zum Beispiel ist es bereits möglich, die hierarchische Struktur der durch KASKADE (S. 95) erzeugten Netze auszunutzen und einen effektiven Vorkonditionierer für Diffusionsprobleme mit Koeffizientensprüngen, die durch die Gitterverfeinerung nicht erfaßt sind, zu definieren.

Um auf allgemeinen unstrukturierten Netzen arbeiten zu können, muß die Wahl der Grobgitterknoten untersucht werden. Insbesondere für Konvektions-Diffusionsprobleme ist der Vergleich mit den Verfahren von A. Reusken geplant, deren Struktur sehr ähnlich ist.

## Literatur

1. J. FUHRMANN, *A modular algebraic multilevel method*, WIAS-Preprint No. 203, Berlin 1995.

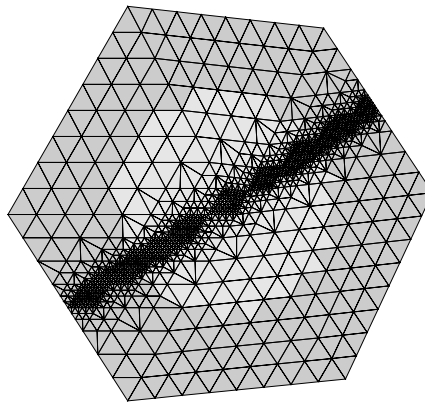


Abb. 1: Materialverteilung und Triangulierung

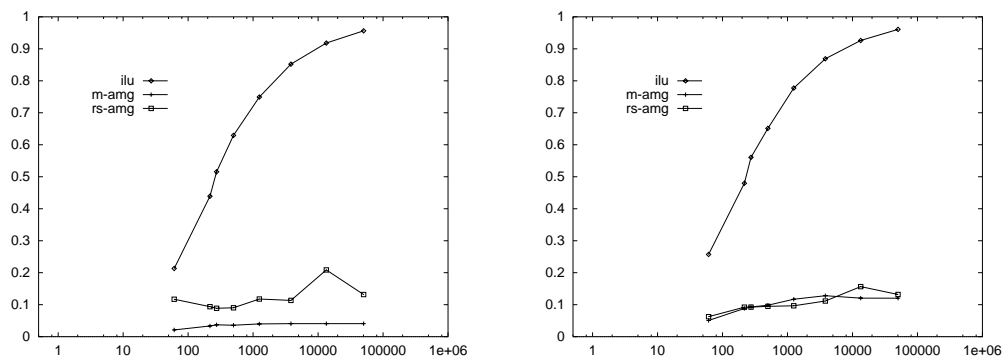


Abb. 2: Kontraktionsrate des AMG-vorkonditionierten CG-Verfahrens in Abhängigkeit von der Knotenzahl für konstante bzw. springende Koeffizienten (m-amg: modulares AMG; rs-amg: Ruge/Stüben-Verfahren; ilu: unvollständige LU-Zerlegung)



## Fluidtransport in porösen Medien

**Bearbeiter:** J. Fuhrmann

**Kooperation:** P. Knabner (Universität Erlangen-Nürnberg), A. Erber (Erdöl-Erdgas Gommern GmbH)

**Förderung:** DFG (SFB 359)

In Fortsetzung des gleichgelagerten Projektes aus dem Jahre 1994 wurde der auf der Verwendung einer impliziten Zeitdiskretisierung und eines Newton-Verfahrens zur Auflösung der Nichtlinearität in Verbindung mit einem mehrgittervorkonditionierten BICGstab-Verfahren (S. 85) für die linearen Probleme basierende zeitlich adaptive numerische Algorithmus zur Lösung nichtlinearer Diffusionsprobleme vervollkommen.

Im Rahmen des KASKADE-Projektes (S. 95) wurden die technischen Voraussetzungen für die Entwicklung räumlich adaptiver Verfahren geschaffen.

Der Algorithmus wurde auf degenerierte parabolische Probleme, wie z. B. die Poröse-Medien-Gleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u^m = 0$$

erweitert. Es wurden numerische Experimente durchgeführt, die zeigen, daß die auf diese Weise erhältlichen numerischen Lösungen qualitativ und quantitativ das degenerierte Verhalten solcher Gleichungen – wie z. B. die endliche Ausbreitungsgeschwindigkeit des Trägers der Lösung – widerspiegeln.

Ein weiteres Problem in dieser Klasse ist das Fließen eines kompressiblen Bingham-Fluids in einem porösen Medium. Praktischer Hintergrund ist ein Problem in der Erdölförderung:

Eine von undurchlässigen Schichten umschlossene ölführende Schicht steht unter Druck. Sie wird angebohrt, und das Öl wird herausgedrückt. Zu berechnen ist die Rate, mit der dies geschieht. Klassische Bohrtechnologien erlauben das Anbohren einer ölführenden Schicht nur unter Winkeln nahe  $90^\circ$ . In den letzten Jahren wurden Technologien entwickelt, welche es erlauben, solche Schichten horizontal aufzuschließen. Es ist zu klären, um wieviel effektiver ein solcher Horizontalaufschluß im Vergleich zu einem Vertikalaufschluß sein kann.

Dieser Prozeß läßt sich durch die Gleichung

$$\frac{\partial(m\rho)}{\partial t} - \nabla \cdot \left( \frac{k\rho}{\mu} \nabla(p - \rho\gamma) \right) = 0$$

in Verbindung mit den üblichen Randbedingungen erfassen, welche die Massenbilanz des Fluids beschreibt. Die Bedeutung der Variablen ist folgende:

$m[1]$  : Anteil des Porenraums am Gesamtvolumen.

$\rho \left[ \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \right]$  : Dichte des Fluids. Falls  $\rho = \rho(p)$  druckabhängig ist, sprechen wir von einem *kompressiblen Fluid*, anderenfalls liegt InkompRESSIBILITÄT vor. Für Öl müssen wir den ersteren Fall annehmen, so daß die Gleichung instationär ist.

$k [cm^2]$  : Permeabilität des porösen Mediums. Sie kann extrem ortsabhängig sein.

$\mu \left[ \frac{g}{cm \cdot s} \right]$  : Viskosität des Fluids. Liegt eine Abhängigkeit von  $p$  oder  $\nabla p$  vor, so sprechen wir von einem *nicht-Newtonschen Fluid*. In unserem Falle gilt:

$$\frac{1}{\mu} = \begin{cases} 0, & |\nabla p - \rho\gamma| < \delta_0 \\ \mu_0(|\nabla p - \rho\gamma| - \delta_0), & |\nabla p - \rho\gamma| \geq \delta_0. \end{cases}$$

Fluide mit einer solchen Eigenschaft heißen *Bingham-Fluide*.

$p [Pa]$  : Druck des Fluids.

$\gamma \left[ \frac{m}{s^2} \right]$  : Gravitation.

Im zu betrachtenden Falle liegt eine Entartung des Problems vor, die darin besteht, daß das Fluid bei kleinen Druckgradienten immobil wird.

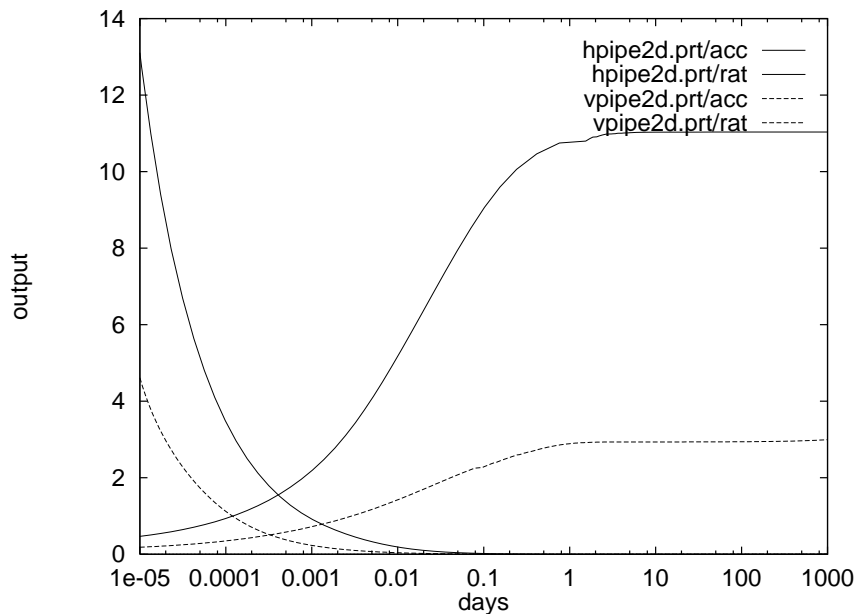


Abb. 1: Förderrate und Ausbeute für eine Horizontal- und eine Vertikalbohrung (Testdaten)  
– ein Beispiel für die Erreichung einer stationären Lösung nach endlicher Zeit.

## Finite-Volumen-Diskretisierung von Zweiphasenströmungen

**Bearbeiter:** S. Hengst, J. Fuhrmann

**Kooperation:** M. Wierse (Albert-Ludwigs-Universität Freiburg)

Gegenstand der Untersuchung ist das Ausbreitungsverhalten von (Schad-)Stoffen in porösen Medien. Aus physikalischer Sicht handelt es sich oft um Fluide, die mit Wasser nicht mischbar oder nur gering löslich sind. Sie liegen im Boden somit als getrennte Phasen vor, so daß der Durchströmungsvorgang als Mehrphasenströmungsprozeß beschrieben werden muß.

Die mathematische Formulierung einer speziellen Zweiphasenströmung (Öl, Wasser) führt auf ein gekoppeltes System elliptisch-parabolischer Differentialgleichungen. Für ein gesättigtes poröses Medium konnte die Existenz und Eindeutigkeit klassischer Lösungen des Systems ohne Einschränkung an die Raumdimension gezeigt werden und Aussagen zum asymptotischen Verhalten gegen eine stationäre Lösung aufgestellt werden. Andererseits ist dieses System nur in wenigen, stark vereinfachten Sonderfällen für analytische Lösungen zugänglich. Für eine praxisrelevante Simulation der Transportvorgänge bedarf es somit geeigneter numerischer Verfahren. Ausgehend von der Druck-Sättigungsformulierung der Strömung wurden folgende numerische Experimente durchgeführt:

- Zeitdiskretisierung: Druck implizit, Sättigung explizit
- Ortsdiskretisierung: Druck – lineare finite Elemente  
Sättigung – Finite-Volumen-Methode 1. Ordnung mit exponentiell angepaßtem Upwinding.

Bereits für das vereinfachte System unter Vernachlässigung von Gravitation und Kapillardruck zeigten sich Effekte künstlicher Diffusion, die zu einem Verschmieren der Lösung am Phasenübergang führen (siehe Abb. 1). Um derartigen Effekten zu begegnen, wurden in der Literatur Finite-Volumen-Verfahren höherer Ordnung untersucht. Erste Tests im eindimensionalen Fall mit dem Engquist-Osher-Schema bzw. einem Verfahren von M. Wierse sind ermutigend. Diese Ansätze sollen im kommenden Jahr auf den 2D- und 3D-Fall übertragen werden.

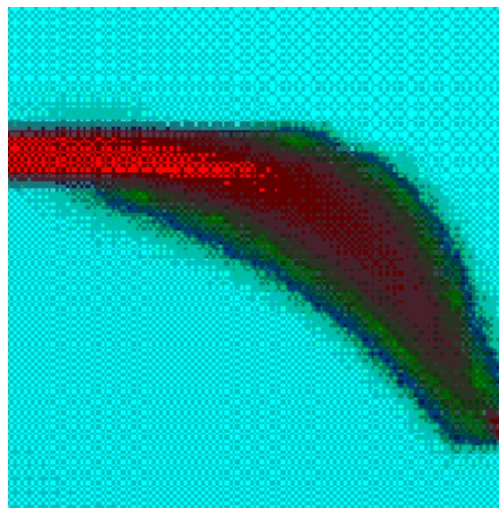


Abb. 1: Sättigungsprofil einer Zweiphasenströmung

## **Feldtheoretische Simulation von monolithisch integrierten Höchstfrequenzschaltungen**

**Bearbeiter:** G. Hebermehl, H. Langmach, G. Reinhardt, R. Schlundt, I. Schmelzer, M. Uhle

**Kooperation:** W. Heinrich, J. Gerdes, H. Zscheile (Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik – FBH)

Der Entwurf monolithisch integrierter Schaltungen im Mikrowellen- und Millimeterwellenbereich erfordert eine dreidimensionale elektromagnetische Simulation, da mit zunehmender Packungsdichte die Kopplungsphänomene zwischen benachbarten Teilen der Schaltung berücksichtigt werden müssen und mit steigender Frequenz Gehäuseeffekte eine große Rolle spielen. Die Gehäuseabmessungen liegen in der Größenordnung der Wellenlänge. Die Schaltungen werden im GHz-Bereich (1 – 100 GHz) im Mobilfunk, in der Radartechnik und in der Satellitenkommunikation eingesetzt.

Die dreidimensionale elektromagnetische Simulation stellt hohe Anforderungen an die räumliche Auflösung, weil einerseits Metallisierungsdicken im Mikrometerbereich und andererseits Chipdimensionen im Millimeterbereich erfaßt werden müssen.

Das Transmissions- und Reflexionsverhalten der Schaltungen wird durch ihre Streumatrix beschrieben, die das Verhältnis der Amplituden der auslaufenden Moden zu den erregenden Moden darstellt. Die Streumatrix kann aus dem elektrischen Feld berechnet werden, wenn eine orthogonale Zerlegung des Feldes für ein Paar benachbarter Schnittebenen für jeden Wellenleiter für eine hinreichende Anzahl linear unabhängiger Erregungen bekannt ist (Abb. 1). Das elektromagnetische Feld wird durch die Lösung eines dreidimensionalen Randwertproblems für die Maxwell'schen Gleichungen gewonnen. Es wird von der Integralform der Maxwell'schen Gleichungen bei harmonischer Erregung ausgegangen, d. h., es wird im Frequenzbereich gearbeitet.

Die Diskretisierung der Gleichungen erfolgt mit Hilfe einer Finite-Volumen-Methode unter Verwendung eines kartesischen Gitters mit variabler Schrittweite (Abb. 2) und führt auf Eigenwertprobleme für schwach besetzte nichtsymmetrische Matrizen und hochdimensionale lineare Gleichungssysteme mit schwach besetzten indefiniten symmetrischen Koeffizientenmatrizen.

Das zugehörige Verfahren wird in der Elektrotechnik als FDFD-Methode (Finite-Difference Method in the Frequency Domain) bezeichnet und ist in dem Programmpaket F3D ([1], [2]) implementiert. Der Bedarf an Speicherplatz und Rechenzeit für die Simulation ist sehr hoch (bis zu 3 Wochen Rechenzeit auf modernen Workstations) und wird im wesentlichen durch die Lösung der Eigenwertprobleme und der hochdimensionalen Gleichungssysteme verursacht. Es besteht der Wunsch, kompliziertere Schaltungen zu berechnen und zur Erreichung höherer Genauigkeiten mit feinerer Diskretisierung zu arbeiten.

Folgende Arbeiten zur Verbesserung und Erneuerung der Methoden wurden durchgeführt:

### 1. Maßnahmen zur Verbesserung der rechenintensiven Teile des Algorithmus

#### Eigenwertproblem

Im Berichtsjahr 1994 wurde ein Weg gefunden, der die rechen- und speicherplatzintensive Bestimmung aller Eigenwerte zur Ermittlung einer kleinen Menge von Ausbreitungskonstanten vermeidet. Dieses Vorgehen wurde weiter vervollkommnet, so daß jetzt insgesamt Rechenzeiteinsparungen um den Faktor 45 und Speicherplatzverringerungen um den Faktor 80 erreicht werden.

### Lineare Gleichungssysteme

Durch den Einsatz von Reordering-Verfahren konnten die linearen Gleichungssysteme aufgespalten werden in ein Gleichungssystem mit einer Diagonalmatrix als Koeffizientenmatrix und ein Gleichungssystem mit einer symmetrischen indefiniten Matrix, wobei die Dimension dieses Gleichungssystems wesentlich geringer ist als die des Ausgangssystems. Die dritte Maxwell'sche Gleichung wird als Vorkonditionierer verwendet. So wurde die Effizienz der Verfahren gegenüber 1994 weiter gesteigert. Insgesamt konnten bis jetzt Rechenzeiteinsparungen um den Faktor 5 erzielt werden.

Eine Publikation, in der das gesamte Verfahren der feldtheoretischen Simulation von Höchstfrequenzschaltungen dargestellt ist, befindet sich in Arbeit.

### 2. Nichtorthogonale Diskretisierung

Die Verwendung des kartesischen Gitters mit variabler Schrittweite führt bei einer Verfeinerung in einer Region zu einer Häufung von Elementarzellen in allen Koordinatenrichtungen, die dort im allgemeinen gar nicht benötigt werden. Außerdem sind Elementarquader weniger geeignet, wenn krummlinige Ränder anzupassen sind.

Aus diesem Grunde wurden Arbeiten begonnen, die die Verwendung von Tetraedergittern und zugehöriger Voronoizellen als duales Gitter anstatt von Quadrigittern beinhalten (Abb. 3), um eine bessere Anpassung des Netzes an die Problemstellung und eine Reduktion der Dimension der Aufgaben der linearen Algebra zu erreichen. Es wurden erste Schritte zur Formulierung der zugehörigen Gitter-Maxwellgleichungen, zur Anpassung des Gittergenerators IGB des WIAS (siehe S. 93) und zur Gitterverwaltung (siehe S. 95) an die Anforderungen der elektromagnetischen Simulation gemacht.

### **Literatur**

1. A. CHRIST, H. L. HARTNAGEL, *Three-Dimensional Finite-Difference Method for the Analysis of Microwave-Device Embedding*, IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, Vol. MTT-35, No 8, 1987, pp. 688–696.
2. K. BEILENHOF, W. HEINRICH, H. L. HARTNAGEL, *Improved Finite-Difference Formulation in Frequency Domain for Three-Dimensional Scattering Problems*, IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, Vol. 40, No. 3, 1992, pp. 540–546.

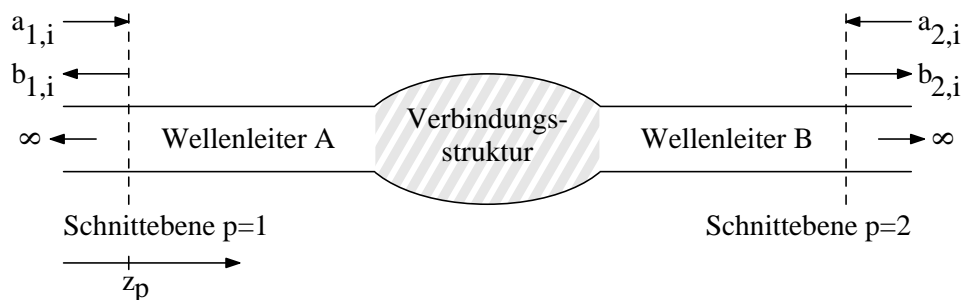


Abb. 1: Verbindungsstruktur

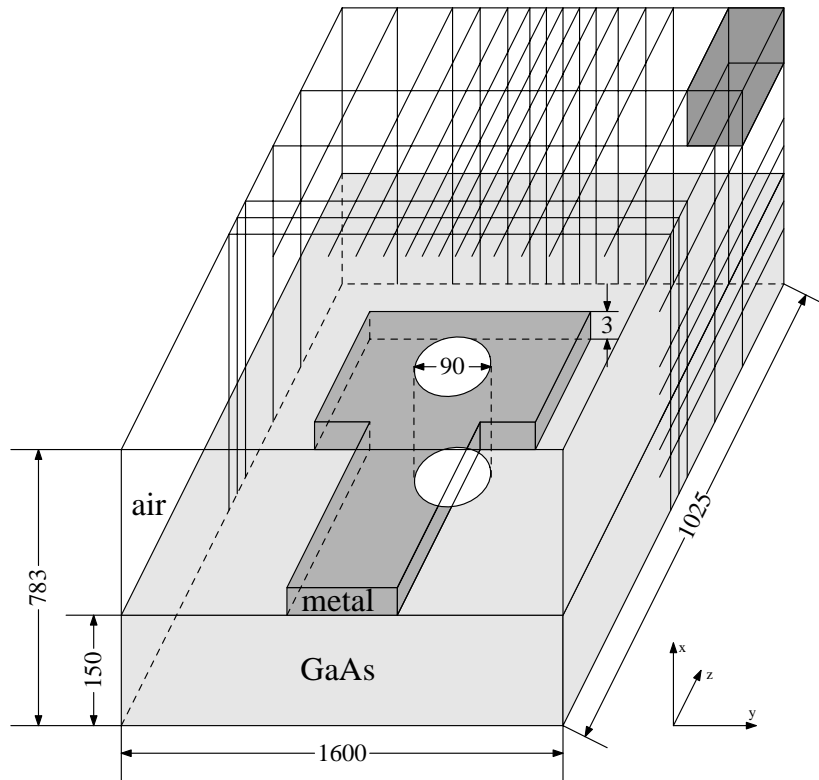
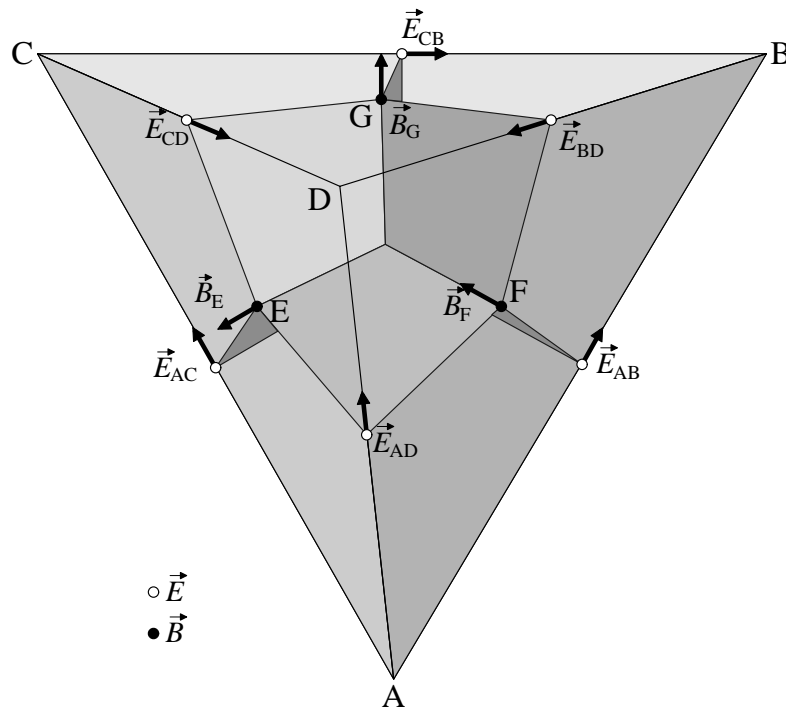


Abb. 2: Durchkontaktierung mit nichtäquidistantem Gitter

Abb. 3: Tetraeder mit Voronoi-Teilzellen und die Definition der Felder  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$

### 3D-Gittergenerierung und Geometriebeschreibung

**Bearbeiter:** I. Schmelzer

**Kooperation:** H.-J. Diersch (WASY GmbH)

Die numerische Simulation verschiedenster physikalischer Probleme erfordert eine Diskretisierung des Rechengebiets mit Hilfe von Gittern. Die Qualität des Gitters ist dabei von entscheidender Bedeutung für den Erfolg der Simulation. Insbesondere muß das Gitter die Geometrie der Aufgabenstellung korrekt darstellen.

Von Ilja Schmelzer wurde dazu in den letzten Jahren das Softwarepaket IBG implementiert. Es beinhaltet einen 3D-Gittergenerator und ein Paket zur Erzeugung von Geometriebeschreibungen. Das zur Erzeugung der Geometriebeschreibungen verwendete Konzept unterscheidet sich prinzipiell von den Standard-Konzepten, die in den verbreiteten CAD-Systemen verwendet werden. Dieses Konzept besitzt Vorteile bei veränderlichen Geometrien, wie sie z. B. bei zeitabhängigen Problemen auftreten. Insbesondere ist das Konzept auch auf den n-dimensionalen Fall verallgemeinerbar.

Im Berichtszeitraum wurde der Algorithmus theoretisch aufgearbeitet. Als Ergebnis entstand eine Arbeit, die an der Universität Erlangen-Nürnberg als Dissertation eingereicht wurde. Es wurde ein Preprint veröffentlicht und in der Zeitschrift „Computer Aided Geometric Design“ eingereicht.

Gleichzeitig wurde das Programmpaket in verschiedenen Anwendungen getestet und dabei weiter verbessert. Insbesondere wurde das Programmpaket IBG in das Programm FEFLOW der WASY GmbH eingebaut. Dazu wurden u. a. zusätzliche Möglichkeiten implementiert, die Verfeinerung des Gitters lokal und anisotrop zu steuern. Neue Impulse zur Weiterentwicklung von IBG ergaben sich auch aus Anwendungen im Rahmen des Projekts „Feldtheoretische Simulation von monolithisch integrierten Höchstfrequenzschaltungen“ (siehe S.90).

Die Neuimplementierung des Programmpakets IBG in C++ wurde begonnen. Das Ziel dieser Neuimplementierung ist dabei vor allem größere Nutzerfreundlichkeit, bessere Modularität, die funktionelle Erweiterung und ein leicht steuerbares Angebot verschiedener Alternativen für die Gittergenerierung.

#### Literatur

1. I. SCHMELZER, *Covariant Geometry Description*, WIAS-Preprint No. 152, Berlin 1995.

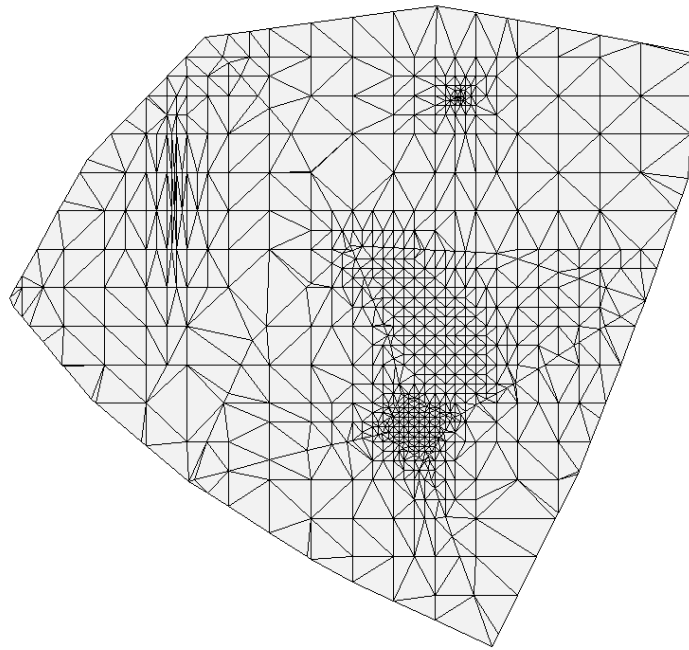


Abb. 1: Anwendergesteuerte lokale Verfeinerung in IBG



**KASKADE — eine Toolbox für adaptive Multilevelmethoden****Bearbeiter:** J. Fuhrmann, R. Kornhuber, H. Langmach**Kooperation:** B. Erdmann, R. Roitzsch (ZIB), H.-J. Diersch (WASY GmbH)

Ausgehend von dem am ZIB entwickelten Programm KASKADE und den am WIAS entwickelten Programmkomponenten zur Lösung partieller Differentialgleichungen wird an der Schaffung einer objektorientierten Toolbox zur Lösung von elliptischen und parabolischen partiellen Differentialgleichungen mittels adaptiver Multilevelmethoden gearbeitet.

Zentrale Aufgaben dieser Zusammenarbeit mit dem ZIB sind die Verbesserung der Modularität von KASKADE, d. h. die Zerlegung des Programms in leicht herauslösbare und erweiterbare Moduln (z. B. Gitterverwaltung, Gitterverfeinerung, Tools zur Matrixassemblierung, Iterationsverfahren und Vorkonditionierer, Sparse-Matrix Routinen, Grafikausgabe, usw.), sowie eine Erweiterung der Einsatzmöglichkeiten des Programms (z. B. im Hinblick auf die Lösung gekoppelter Systeme partieller Differentialgleichungen und auf die Verwendung von Finite-Volumen-Diskretisierungen).

Wichtig für den Einsatz der Programme bei Anwendern ist ebenfalls die Gewährleistung der Portabilität auf verschiedene Rechnerarchitekturen und die Festlegung allgemeiner Schnittstellen für die Einbindung in fremde Programme und für Pre- und Postprocessing (Eingaben, Ergebnisausgaben und Grafik).

Als erster Schritt zur verbesserten Modularität wurden die Teilprogramme zur Gitterverwaltung und Gitterverfeinerung aus KASKADE herausgelöst und mit einer allgemeinen Schnittstelle versehen, die eine einfache Einbindung in bestehende Simulationsprogramme erlaubt.

Die Toolbox wird im WIAS bei Problemstellungen der Simulation des Wasser- und Stofftransports in porösen Medien einschließlich inverser Aufgaben eingesetzt. Hierzu konnte bereits eine Zusammenarbeit mit der WASY GmbH vertraglich vereinbart werden.

Weiter ist die Verwendung von Komponenten der Toolbox bei der Lösung von Maxwell'schen Gleichungen auf unstrukturierten Gittern im Rahmen des Projekts „Feldtheoretische Simulation von monolithisch integrierten Höchstfrequenzschaltungen“ (siehe S. 90) und bei der Behandlung von Phasenfeldmodellen (siehe S. 41) vorgesehen.

**Literatur**

1. R. BECK, B. ERDMANN, *An Object-oriented Adaptive Finite Element Code*, Technical Report TR 95-4, ZIB, 1995.

## Entwicklung und Einsatz von grafischen Werkzeugen

**Bearbeiter:** G. Reinhardt, F.-K. Hübner, G. Hebermehl

**Kooperation:** H.-Ch. Hege (ZIB), K. Polthier (TU Berlin), E. Suschke (HU Berlin)

Im Institut werden hauptsächlich 2D- und 3D-Probleme bearbeitet, die in den meisten Fällen auch zeitabhängig sind. Für die Auswertung der komplexen Ergebnisse und die rechnergestützte Simulation ist eine leistungsstarke grafische Umgebung für eine detailtreue und informationsverlustfreie Visualisierung erforderlich. Die grafische Umgebung umfaßt dabei sowohl Hardware- als auch Software-Komponenten.

Nach Konsultationen der Gruppe „Visualisierung und Animation“ des Rechenzentrums der Humboldt-Universität zu Berlin (Leiter E. Suschke) und der Gruppe „Visualisierung und Paralleles Rechnen“ (Leiter H.-Ch. Hege) des ZIB sowie verschiedener Hardware- und Software-Produzenten wurden Vorschläge für die Ausrüstung der grafischen Umgebung erarbeitet und zum Teil umgesetzt.

### Hardware für grafische Anwendungen

Bei der Ausstattung liegt ein wichtiges Augenmerk auf einer harmonischen Abstimmung der Qualitätsmerkmale der einzelnen Bestandteile (Bildauflösung, Bildgröße, Farbtiefen u. ä).

Das Herzstück der Ausstattung ist dabei die Workstation zum Erzeugen und Manipulieren von Grafiken. Im Berichtszeitraum wurde dafür ein „Reality Engine“ der Firma Silicon Graphics angeschafft.

Diese Workstation ist speziell für grafische Darstellungen prädestiniert (hardwaremäßige Unterstützung verschiedener Algorithmen des Renderings) und für den Anschluß eines Videobords vorgesehen.

Durch die mögliche Echtzeitverarbeitung über dieses Videobord (Sirius-Board) wird die Erzeugung von Videosequenzen technologisch stark vereinfacht. Damit läßt sich die grafische Hardware-Ausrüstung bezüglich der Beschreibung herkömmlicher VHS-Kassetten für Präsentationen auf Tagungen und Vorträgen elegant abschließen.

Als Drucker steht ein Laserfarbdrucker für Halbtondruck zur Verfügung. Zum Druck von Grafiken mit stetigen Farbübergängen sowie zum Scannen von Bildern werden Kapazitäten des Rechenzentrums der HU bzw. des ZIB genutzt.

### Grafische Basis-Software

Für die Visualisierung der wissenschaftlichen Ergebnisse des Instituts steht auf allen Workstation-Architekturen seit Anfang des Jahres das Application Visualization System (AVS) [1] mit insgesamt 3 Lizenzen zur Verfügung.

Die Visualisierungstechniken des AVS werden z. Z. im Postprocessing genutzt, die Datenstruktur der Applikation wird hierbei „offline“ in die Datenstruktur des AVS konvertiert.

Neben dieser Offline-Technik werden im Institut die von den Mitarbeitern J. Fuhrmann und H. Langmach entwickelten Pakete „gltools“ und „Graphics Minimal System“ (GMS) als Online-Visualisierungstechnik in verschiedenen Applikationen (u. a. testweise im KASKADE-Projekt — siehe S. 95) genutzt. Die „gltools“ basieren auf Moduln von OpenGL, das GMS nutzt Moduln der X11-Bibliothek und Postscript-Macros.

Neben dem AVS ist für die SGI-Architektur das Visualisierungspaket GRAPE (GRAphics Programming Environment) [2] installiert und für einige Applikationen in der Offline-Technik getestet worden.

Als weiteres wissenschaftliches Visualisierungspaket wird z. Z. das Oorange-Paket des SFB 288 der TU Berlin installiert [3].

#### Software-Erweiterungen

Die Arbeit mit verschiedenen Visualisierungspaketen auf verschiedenen Rechnerarchitekturen erfordert den Umgang mit verschiedenen Dateiformaten für digitalisierte Bilder (Imageformat, Rasterformat). Die Transformation eines Formates in ein anderes ist damit eine natürliche Forderung. Für Archivierungszwecke und aus Datenübertragungsgründen spielen dabei vor allem architekturunabhängige Formate und Formate, die eine Datenkomprimierung beinhalten, eine herausragende Rolle.

Aus diesen Gründen ist das AVS um Public Domain Software erweitert worden, welche u. a. die Ein- und Ausgabe verschiedener Imageformate für das AVS zulässt. Die Installation dieser Software bedingte die Installation von Komponenten, mit denen explizit verschiedene Konvertierungen (als auch Manipulierungen) von Imageformaten (ca. 40) durchgeführt werden können.

#### MPEG-Videos

Architekturunabhängige Formate und Datenkomprimierung sind zentrale Merkmale der Arbeit der „Moving Picture Experts Group“ (MPEG) zur Standardisierung der Codierung von Videos mit zugehörigem Ton (Audio). Mit der auf dieser Arbeit aufbauenden Software des Berkeley Multimedia Research Center (BMRC), University of California, zum Codieren und Decodieren ist die Produktion und Vorführung von Videosequenzen auf Workstations möglich. Am Institut ist die Installation vollständig auf der SGI-Architektur durchgeführt. Das Abspielen von MPEG-Videosequenzen ist auf Sun- und DEC-Architekturen möglich.

#### Anwendungen

Neben der Erzeugung verschiedener Bilder mit AVS für Präsentationszwecke sind mehrere MPEG-Videos für verschiedene Arbeitsgruppen des Instituts erstellt worden:

- „Selbtpulsation in DFB-Lasern“ zeigt drei eindimensionale zeitabhängige Sequenzen als Lösungen einer gewöhnlichen Differentialgleichung (gemeinsam mit R. Lauterbach und B. Sandstede, FG 2).
- „Simulation des Stirnabschreckversuchs nach DIN 50191“ beinhaltet zeitlich veränderliche 2D-Skalarfelder für Temperaturverteilung und Phasenfraktionen (gemeinsam mit D. Hömberg, FG 1).
- „ $H_{101}$ -Welle im Rechteck-Hohlraumresonator“ demonstriert das zeitliche Verhalten zweier Vektorfelder (elektrisches und magnetisches Feld) im dreidimensionalen Raum (gemeinsam mit M. Uhle, FG 3).

#### **Literatur**

1. AVS *User's Guide*, Advanced Visual System Inc., Waltham (USA), 1992.

2. GRAPE *User's Guide*, SFB 256, Institut für angewandte Mathematik der Universität Bonn, 1994.

Web page: <http://www.mathematik.uni-freiburg.de/GRAPE/grape.html>

3. Web page of the Oorange Project :

[http://www\\_sfb288.math.tu-berlin.de/oorange.html](http://www_sfb288.math.tu-berlin.de/oorange.html)

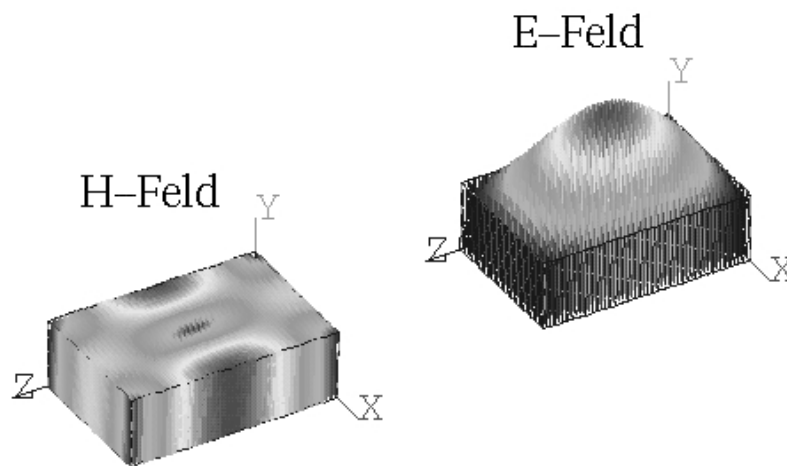


Abb. 1: Frame Nr. 76 des MPEG-Video „ $H_{101}$ -Welle im Rechteck-Hohlraumresonator“  
(Einzelbilderzeugung mit AVS)

## Portabilität von Software der linearen Algebra für Distributed Memory Systeme

**Bearbeiter:** G. Hebermehl, F.-K. Hübner, G. Reinhardt

**Kooperation:** V. Friedrich (PARSYTEC Eastern Europe Parallele Computer GmbH)

Der hohe Zeitaufwand, der für die Implementation effizienter numerischer Algorithmen auf Distributed Memory Computern benötigt wird, erfordert portable Lösungen. Durch die Verwendung anerkannter Grundbausteine für elementare Operationen der Kommunikation wird auf einem höheren Level der Modulhierarchie Portabilität erreicht. Die BLACS (Basic Linear Algebra Communication Subprograms) stellen eine allgemein anerkannte Schnittstelle für das Message Passing in Algorithmen der Linearen Algebra dar, die die Programmierung der Kommunikation für den Anwender wesentlich vereinfacht.

Insbesondere ist die Bereitstellung adaptierter BLACS Voraussetzung für die Nutzung der Public Domain Software ScaLAPACK (Distributed-Memory-System-Version von LAPACK). Bereits 1994 wurde eine Adaption der BLACS für Distributed Memory Systeme der Firma PARSYTEC bereitgestellt.

Im Februar 1995 sind neue Versionen der Kommunikationsbibliothek BLACS und von ScaLAPACK herausgekommen, die mit den alten Ausgaben nicht mehr kompatibel sind.

Durch die Adaption der neuen BLACS (in C) auf der Basis asynchroner Kommunikationskommandos des Betriebssystems PARIX kann ScaLAPACK (die Verwendung synchroner Kommunikation führt hier zu Deadlocks) auf allen PARSYTEC-Rechnern genutzt werden. Das erweitert insbesondere die Möglichkeiten des PowerXplorers unseres Hauses. Die BLACS-Bibliothek besteht aus 127 Modulen und unterstützt den Austausch von Daten der Typen Integer, Single precision, Double precision, Single precision complex und Double precision complex in verschiedenen Topologien.

### Literatur

1. J. J. DONGARRA, R. C. WHALEY, *A User's Guide to the BLACS v1.0*, LAPACK Working Note 94, 1995, pp. 1–55.
2. G. HEBERMEHL, F.-K. HÜBNER, *Basic Linear Algebra Communication Subprograms (BLACS) for the PowerXplorer*, in PowerXplorer User Report, J. Knop, P. Schreiber, eds., Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, 1995, pp. 258–262.
3. G. HEBERMEHL, *Portabilität und Adaption von Software der linearen Algebra für Distributed Memory Computer*, in Software Engineering im Scientific Computing, W. Mackens, S. M. Rump, eds., Universität Hamburg, 1995, pp. 31–33.
4. G. REINHARDT, F.-K. HÜBNER, *Zur Nutzung standardisierter numerischer Basis-Software auf Workstations*, in Software Engineering im Scientific Computing, W. Mackens, S. M. Rump, eds., Universität Hamburg, 1995, pp. 75–77.

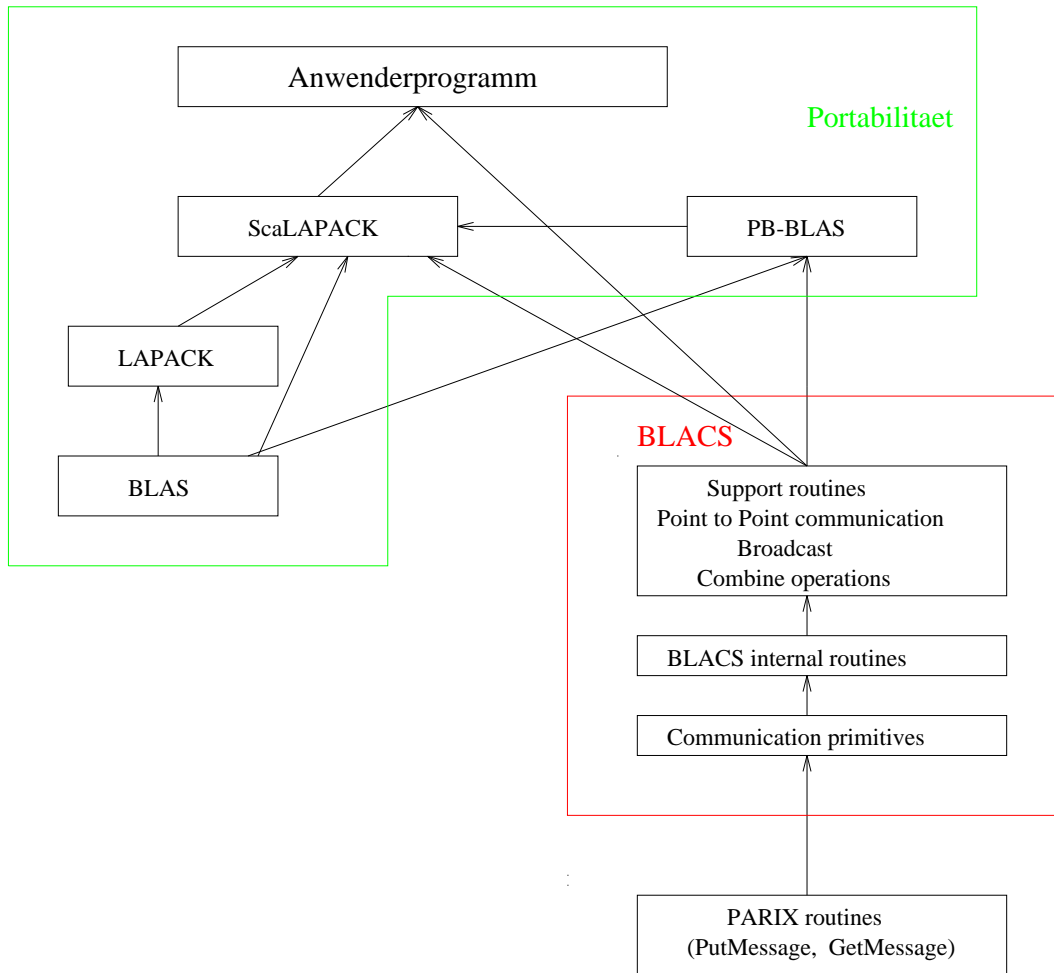


Abb. 1: Modulhierarchie

## **3.4 Forschungsgruppe Integralgleichungen und Pseudodifferentialgleichungen**

### **3.4.1 Zusammenfassung**

Die Forschungsgruppe befaßt sich mit der analytischen und numerischen Behandlung von Randwertaufgaben und entsprechenden Randreduktionen (Randintegralgleichungen), die naturwissenschaftliche und technologische Prozesse modellieren. Im zurückliegenden Jahr wurden Arbeiten im Rahmen von Anwendungs- und interdisziplinären Projekten neu aufgenommen und intensiviert, insbesondere zu konkreten Problemen aus der Hydrologie, der Geodäsie, der Aerodynamik und der Optik. In den theoretischen Untersuchungen wurden grundlegende Resultate in folgenden Richtungen erzielt: Randelementmethoden mit nichtglatten Splines, Randelementmethoden für Kurven mit Ecken (trigonometrische Approximation und Quadraturmethoden), Multiskalen-Methoden und schnelle Löser für Randwertaufgaben, Operatorgleichungen und Kontrollprobleme, approximative Approximation (u. a. Kubatur von mehrdimensionalen Potentialen und Integraloperatoren), Regularisierung spezieller inverser Probleme.

Ein Höhepunkt der Arbeit war die Durchführung des internationalen WIAS Workshop „Multi-scale Methods in Numerical Analysis“. Die internationalen Kooperationen der Gruppe wurden weiter verstärkt. Ein Promotionsverfahren wurde an der FU Berlin erfolgreich abgeschlossen. Drei Mitarbeiter werden durch Drittmittelprojekte finanziert.

### 3.4.2 Projekte

#### **Parameteridentifikation in einem wind- und gezeitengetriebenen Modell für Nordsee und Elbe**

**Bearbeiter:** G. Bruckner

**Kooperation:** E. Kleine (Bundesamt für Seeschifffahrt und Hydrographie, Hamburg)

Ziel ist die Erstellung eines optimal angepaßten diskreten Modells, das eine genauere Vorhersage von Wasserständen an Nordsee und Elbe ermöglicht. Das zweidimensionale mathematische Modell besteht gemäß Massen- und Impulserhaltung aus einem dynamischen System von drei gekoppelten hyperbolischen partiellen Differentialgleichungen für den Wasserstand und die Geschwindigkeiten in  $x$ - und  $y$ -Richtung. Zu identifizieren sind Windeintrag und Bodenreibung sowie die Bedingungen am offenen Rand aus Geschwindigkeits- und Wasserstandsmessungen. Das Modell soll optimal durch die „Datenwolke“ gesteuert werden, es wird daher eine Optimierungsmethode vorgeschlagen. Zur Anwendung kommen soll die Methode der kleinsten Quadrate, wo die Minimierung mittels eines Gradientenverfahrens erfolgt, und der Gradient mit Hilfe des adjungierten Problems ermittelt wird.

Zu diesem Projekt wurden Literaturstudien durchgeführt und konzeptionelle Vorarbeiten geleistet.



### **Bestimmung der Bodendurchlässigkeit aus Grundwasserständen**

**Bearbeiter:** G. Bruckner, S. Handrock-Meyer, H. Langmach (FG 3), J. Sprekels (FG 1)

**Kooperation:** H.-J. Diersch, S. Kaden, J. Luo (WASY GmbH Berlin)

Aufgabe ist die Identifikation der Bodendurchlässigkeit aus Messungen des Grundwasserstandes in einem zweidimensionalen polygonal berandeten Gebiet unter Vorgabe von Ein- und Ausflüssen oder Wasserständen am Rand sowie Quellen im Gebiet. Die Messungen sind mit Fehlern behaftet und im allgemeinen unregelmäßig im Gebiet verteilt (Bohrungen). Als mathematisches Modell wird die zweidimensionale stationäre Diffusionsgleichung mit räumlich verteiltem skalaren Durchlässigkeitskoeffizienten zugrunde gelegt, wobei auf den einzelnen Teilrändern Dirichlet- bzw. Neumann-Randbedingungen gegeben sind.

Zur Identifikation des positiven und im allgemeinen Unstetigkeiten erster Art (Sprünge) aufweisenden Durchlässigkeitskoeffizienten wird eine Methode von G. Vainikko verwendet, die auf einer Finite-Elemente-Diskretisierung der dem Ausgangsproblem entsprechenden Variationsformulierung beruht. Dabei wird maßgeblich die einfache Gestalt des adjungierten Operators der sich ergebenden Operatorgleichung ausgenutzt. Das resultierende Projektionsverfahren ist bekannt als duale Fehlerquadratmethode oder auch als Methode des kleinsten Fehlers. Das Verfahren ist kombiniert mit der Methode der Tikhonov-Regularisierung.

Das Verfahren wurde programmiert und befindet sich in der Testphase. Bei einigen Testbeispielen trat ein Selbstregularisierungseffekt auf, so daß in diesen Fällen auf die Tikhonov-Regularisierung verzichtet werden konnte. Für ausreichend viele und gering gestörte Daten (1 %) wurden bei geringen Sprunghöhen in den Unstetigkeitsstellen des Koeffizienten gute Ergebnisse erzielt.

Im Rahmen des Projektes wurde dieses von Vainikko für Rechteckgebiete und -gitter getestete Verfahren auf polygonal berandete Gebiete und krummlinige Gitter erweitert. Weiter wird es mit einer Methode der „Datenglättung“ kombiniert. Ziel dieser Methode ist eine optimale Verwertung der a priori Schätzung für den Koeffizienten sowie der gegebenen (fehlerbehafteten) Daten. Gesucht sind „geglättete Daten“, die die diskrete Gleichung für die a priori Schätzung mit einer (gegebenen) Toleranz erfüllen und möglichst gut zu den Meßdaten passen. Es ergibt sich ein bedingtes Minimumproblem, das mit der Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren und dem Newtonverfahren gelöst wird.

Das Projekt wird im Rahmen eines Forschungs- und Entwicklungsvertrages, der mit der WASY GmbH abgeschlossen wurde, weitergeführt.

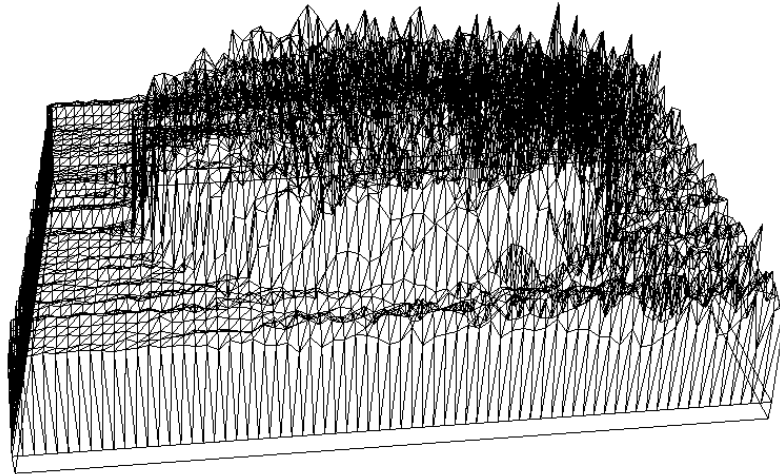


Abb. 1: Rekonstruktion der Bodendurchlässigkeit bei gestörten Daten

### Literatur

1. J. SPREKELS, *Identification of parameters in distributed systems: An overview*, in: *Methods of Operation Research*, Vol. 54, 163-176, Verlag Anton Hain (1986).
2. G. VAINIKKO, *On the discretization and regularization of ill-posed problems with noncompact operators*, *Numer. Funct. Anal. and Optimiz.* 13, 381-396 (1992).
3. G. BRUCKNER, S. HANDROCK-MEYER, H. LANGMACH, *Determination of the transmissivity coefficient from ground water levels*, in Vorbereitung.

### **Regularisierung spezieller inverser Probleme**

**Bearbeiter:** G. Bruckner, S. Handrock-Meyer, S. Pröbldorf

**Förderung:** DFG

**Kooperation:** R. Gorenflo (FU Berlin), M. Yamamoto (University of Tokyo), G. Vainikko (Helsinki University of Technology)

Schwerpunkt der Untersuchungen sind unter anderem Randintegralgleichungen auf Gebieten mit nicht notwendig glatten Rändern. Sie stellen in geeigneten Räumen (bzw. Raumpaaren) gutgestellte Probleme dar, für die bei exakt gegebenen Kernen und rechten Seiten zahlreiche numerische Verfahren in der Literatur entwickelt wurden. Bei gestörten Daten sind diese Probleme schlechtgestellt.

Im Falle gestörter rechter Seiten wurde eine Methode entwickelt, durch Vorbehandlung der Daten das schlechtgestellte Problem auf ein gutgestelltes zurückzuführen. Eine solche Datenglättung ist vom Integraloperator weitgehend unabhängig. Sie kann mit Hilfe der abgeschnittenen Singulärwertzerlegung eines Einbettungsoperators oder durch Lösen eines Approximationsproblems ausgeführt werden. Letzteres wurde in [1] für das Kollokationsverfahren untersucht. In [2] wurde gezeigt, daß die gleiche Methode auch auf ein Problem der Identifikation von Punktquellen in der eindimensionalen Wellengleichung anwendbar ist.

In [3] wurden am Beispiel der Symmschen Integralgleichung (Einfachschichtpotentialgleichung) Störungen im Kern und der rechten Seite für Kollokations- und Quadraturformelmethode in Sobolev- und Hölder-Zygmund-Räumen untersucht.

Für die Symmsche Integralgleichung mit gestörter rechter Seite sind numerische Tests unter Verwendung des Kollokationsverfahrens durchgeführt worden [5], wobei das Programm aus der Arbeit [6] für den vorliegenden Fall modifiziert wurde. Als Ansatzräume, in denen die Näherungslösung gesucht wird, wurden Räume, die von biorthogonalen Wavelets erzeugt werden, gewählt, als Testfunktionale die Funktionale von Brandt und Lubrecht. Die Diskretisierungsmatrix wird direkt in der Waveletbasis erzeugt und anschließend vorkonditioniert. Es tritt der Selbstregularisierungseffekt auf, d. h. die Diskretisierung verfügt über einen hinreichend guten Regularisierungseffekt. In diesem Falle kann man auf eine zusätzliche Regularisierung verzichten.

Außerdem wurde eine Integralgleichung erster Art, deren Kern die Greensche Funktion einer Randwertaufgabe ist, mit Hilfe des Ritz-Verfahrens untersucht. Dieses ist bei Verwendung von orthogonalen Wavelets als Ansatzfunktionen quasioptimal und robust [4]. Die Konditionierungszahl der Diskretisierungsmatrix läßt sich wiederum durch einen Vorkonditionierer reduzieren. Auch in diesem Fall ist ein Selbstregularisierungseffekt zu beobachten.

**Literatur**

1. G. BRUCKNER, *On the stabilization of approximation procedures for a class of integral equations of the first kind with noisy right-hand sides*, erscheint in: Inverse and Ill-posed Problems.
2. G. BRUCKNER, *A decomposition method for the numerical solution of ill-posed linear first kind integral equations*, Proceedings ICIAM'95, eingereicht.
3. G. BRUCKNER, S. PRÖSSDORF, G. VAINIKKO, *Error bounds of discretization methods for boundary integral equations with noisy data*, WIAS-Preprint No. 194, Berlin 1995, erscheint in: Applicable Analysis.
4. S. HANDROCK-MEYER, *Some remarks about utilization of wavelets for solving ill-posed problems*, Proceedings ICIAM'95, eingereicht.
5. S. HANDROCK-MEYER, *The self-regularization effect of the collocation method applied to the Symm's integral equation*, in Vorbereitung.
6. W. DAHMEN, B. KLEEMANN, S. PRÖSSDORF, R. SCHNEIDER, *Multiscale methods for the solution of the Helmholtz and Laplace equations*, erscheint in: Boundary Element Methods 1989–1995, Reports of the DFG, Ed.: W. Wendland, Springer 1996.

## Ein Quadraturverfahren für die hypersinguläre Integralgleichung auf dem Intervall

**Bearbeiter:** K. Bühring

Ziel des Projektes war die Entwicklung, Analyse und numerische Testung eines Quadraturverfahrens zur effektiven numerischen Lösung der Integralgleichung 1. Art mit einem hypersingulären Kern auf dem Intervall  $I = [0, 1]$ , in der das Integral als Hadamard'sches partie-finie-Integral zu verstehen ist. Diese Gleichung ist von grundlegender Bedeutung für die Beugungstheorie zeitharmonischer akustischer und elektromagnetischer Wellen. Der Integraloperator wird als Operator von  $\tilde{H}_{\frac{1}{2}}(I)$  nach  $H_{-\frac{1}{2}}(I)$  betrachtet, wobei  $\tilde{H}_{\frac{1}{2}}(I)$  der Sobolevraum mit der üblichen Randanpassung und  $H_{-\frac{1}{2}}(I)$  der duale Raum dazu ist. Unter Benutzung des asymptotischen Verhaltens der Lösung in den Randpunkten wurde eine algebraische Variablentransformation angewendet, die einer Gitterverfeinerung an den Randpunkten entspricht. Für die transformierte Gleichung wurde unter Benutzung der Subtraktionsmethode als spezieller Form der Regularisierung eine einfache Quadraturregel angewendet. Die Schwierigkeit beim Beweis der Stabilität und der Herleitung von Konvergenzabschätzungen resultiert aus der Tatsache, daß im Unterschied zu den Variablentransformationen in  $L_2$  hier die transformierten Funktionen nicht mehr dem gleichen Raum angehören. Fehlerabschätzungen werden in der  $\|\cdot\|_{\frac{1}{2}}$ -Norm bewiesen. Umfangreiche Testrechnungen wurden durchgeführt, die die theoretischen Konvergenzresultate und die Effizienz der Methode bestätigen. Das Projekt war Teil der Dissertation [1]. Die Ergebnisse wurden in [2] publiziert.

### Literatur

1. K. BÜHRING, *Quadrature methods for the Cauchy singular integral equation on curves with corner points and for the hypersingular integral equation on the interval*, Dissertation, Freie Universität Berlin 1995.
2. K. BÜHRING, *A quadrature method for the hypersingular integral equation on the interval*, J. Integral Equations Appl., 7, No. 3 (1995), 263–301.

## Stabilitäts- und Fehleranalysis von Randelementmethoden für Gebiete mit nicht glattem Rand (Trigonometrische Approximation)

**Bearbeiter:** J. Elschner

**Kooperation:** Y. Jeon (A Jou University, Korea), I. H. Sloan (The University of New South Wales, Sydney), E. Stephan (Universität Hannover)

Viele Randwertaufgaben der mathematischen Physik und Mechanik, insbesondere der Elastizitätstheorie, der Aero- und Hydrodynamik, des Elektromagnetismus und der Optik, lassen sich auf Integralgleichungen über dem Rand des betrachteten Gebietes zurückführen. Von großem praktischen Interesse in der diffraktiven Optik ist zum Beispiel das Beugungsproblem an optischen Gittern, das mittels Randintegralgleichungen für die Helmholtz-Gleichung modelliert werden kann; vgl. Projekt „Beugungseffektivitäten und optimales Design von periodischen optischen Gittern“. Bei der theoretischen Begründung und numerischen Realisierung von Näherungsverfahren (Randelementmethoden) für derartige Integralgleichungen gibt es besonders im Fall von Gebieten mit nicht glatten Rändern noch zahlreiche offene Fragen.

Bei der numerischen Lösung von Randintegralgleichungen auf glatten Kurven haben sich trigonometrische Approximationsverfahren als sehr effektiv erwiesen. Im Rahmen des Projekts wurden erstmalig optimal konvergente Kollokations- und Quadraturverfahren mit trigonometrischen Ansatzfunktionen für die klassischen Integralgleichungen der ebenen Potentialtheorie (Symmsche Integralgleichung, Integralgleichungssystem für das gemischte Problem) in Gebieten mit Ecken entwickelt [1], [2], [3]. Numerische Tests bestätigen die optimale Konvergenzordnung auch ohne zusätzliche Modifikation dieser Verfahren in der Nähe der Ecken, wie sie für den Stabilitätsbeweis in den genannten Arbeiten erforderlich war. Um einen ähnlich befriedigenden Stand der Konvergenzanalyse wie im Fall glatter Randkurven zu erhalten, wurde in letzter Zeit ein neuer Zugang zur Stabilität von Galerkin- und Kollokationsverfahren mit trigonometrischen Polynomen gefunden [4].

### Literatur

1. J. ELSCHNER, Y. JEON, I. H. SLOAN, E. P. STEPHAN, *The collocation method for mixed boundary value problems on domains with curved polygonal boundaries*, WIAS-Preprint No. 142, Berlin 1995.
2. J. ELSCHNER, E. P. STEPHAN, *A discrete collocation method for Symm's integral equation on curves with corners*, WIAS-Preprint No. 143, Berlin 1995.
3. Y. JEON, I. H. SLOAN, E. P. STEPHAN, J. ELSCHNER, *Discrete qualocation methods for logarithmic-kernel integral equations on a piecewise smooth boundary*, WIAS-Preprint No. 184, Berlin 1995.
4. J. ELSCHNER, *Trigonometric approximation of Mellin convolution equations*, in Vorbereitung.

## Beugungseffektivitäten und optimales Design von periodischen optischen Gittern

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

**Kooperation:** F. Wyrowski, B. Kleemann (Berliner Institut für Optik)

Neue Hochpräzisionstechniken ermöglichen die Herstellung komplexer Profile für effiziente optische Gitter und anderer diffraktiver Strukturen. Deshalb gibt es einen wachsenden Bedarf für mathematische Modelle und numerische Verfahren zur Lösung der elektromagnetischen Feldgleichung für komplizierte Gitterprofile und von inversen Aufgabenstellungen ([2]).

Ziel des Projektes ist zunächst die effektive Berechnung von Reflexions- und Transmissionskoeffizienten von periodischen optischen Gittern mit nicht glatter Profilkurve und darauf aufbauend die Lösung von optimalen Design-Problemen, die am Berliner Institut für Optik bei der Herstellung von optischen Gittern mit gewünschten Eigenschaften entstehen.

Im Berichtszeitraum wurden folgende Probleme bearbeitet:

- Erarbeitung eines FEM/BEM-Programms zur schnellen Berechnung von Beugungseffektivitäten bei binären Gittern, das auf Variationszugang an [1] aufbaut.
- Anpassung des am früheren Karl-Weierstraß-Institut entwickelten Programmsystems GRATING, das auf Integralgleichungsmethoden beruht ([3]), an den Fall von Profilkurven mit Ecken.

### Literatur

1. G. BAO, D. C. DOBSON, J. A. COX, *Mathematical studies in rigorous grating theory*, J. Opt. Amer. A, Vol. 12, No. 5 (1995), 1029-1042.
2. A. FRIEDMAN, *Mathematical modeling in diffractive optics*. in: Mathematics in Industrial Problems, Part 7, IMA Volumes in Math. and its Appl., Vol. 67, 1995.
3. A. POMP, *The integral method for coated gratings*, Journal of Modern Optics, Vol. 38, No. 1 (1991), 109-120.

## Identifizierbarkeit von Koeffizienten in quasilinearen Differentialgleichungen

**Bearbeiter:** S. Handrock-Meyer

**Förderung:** DFG

**Kooperation:** M. Yamamoto (Tokio)

Ausserordentlich wichtig bei der Untersuchung von Koeffizientenidentifikationsproblemen ist die Beantwortung der Frage, ob die verfügbaren Meßwerte eine ausreichende Information für die Identifikation der unbekannt Parameter liefern, d. h., ob der zu bestimmende Koeffizient identifizierbar ist. Für die untersuchten Aufgaben ist die Identifizierbarkeit äquivalent zur Eindeutigkeit der Lösung des inversen Problems. Betrachtet wurden Aufgaben, die den folgenden quasilinearen Term enthalten:

$$(a(x, u)u_x)_x + b(x, u)u,$$

und zwar quasilineare Randwertprobleme ( $u = u(x)$ ), quasilineare parabolische Anfangs-Randwertprobleme ( $u = u(x, t)$ ) und quasilineare hyperbolische Anfangs-Randwertprobleme ( $u = u(x, t)$ ).

Es werden Bedingungen angegeben, unter denen jeweils einer der Koeffizienten  $a = a(x, u)$  oder  $b = b(x, u)$  identifizierbar ist. Die erhaltenen Resultate stellen eine Verallgemeinerung der Ergebnisse, die bekannt sind in den Spezialfällen, in denen  $a$  bzw.  $b$  nur von der Ortsvariablen  $x$  oder nur vom Potential  $u$  abhängen, dar. Außerdem wurde die Identifizierbarkeitsproblematik für die drei oben formulierten Aufgaben mit einem einheitlichen Zugang abgehandelt.

Solche Untersuchungen sind aus praktischer Sicht sinnvoll. Beispielsweise führen eindimensionale diffusionsähnliche Systeme in einem isotropen Medium auf eine parabolische Differentialgleichung, in welcher der Koeffizient  $a$  gerade eine Funktion der Ortsvariablen  $x$  und des Potentials  $u(x, t)$  ist.

### Literatur

1. S. HANDROCK-MEYER, *Identifiability of distributed parameters for a class of quasilinear differential equations*, WIAS-Preprint No. 188, Berlin 1995, eingereicht in: *Inverse and Ill-Posed Problems*.
2. S. HANDROCK-MEYER, *Identifiability of distributed physical parameters*, erscheint in: *Parameter Identification and Inverse Problems in Geology, Hydrology and Ecology*, Eds. J. Gottlieb and P. DuChateau, Kluwer Academic Publishers, 1996.



### Wavelet-Approximationsmethoden für das äußere Dirichletproblem für die Helmholtzgleichung

**Bearbeiter:** B. Kleemann, S. Prößdorf

**Förderung:** DFG

**Kooperation:** W. Dahmen (RWTH Aachen), R. Schneider (TH Darmstadt), Ch. Schwab (ETH Zürich)

Das äußere Dirichlet Problem für die Helmholtzgleichung führt nach einem Einfachschichtpotentialansatz auf die folgende logarithmisch singuläre Integralgleichung erster Art ([1]):

$$Au = f \iff \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} K(t, \tau) u(\tau) d\tau = f(t), \quad 0 \leq t \leq 2\pi, \quad K(t, \tau) := \frac{\pi}{i} H_0^{(1)}(\bar{k}r(t, \tau)), \quad (1)$$

wobei  $r(t, \tau) := \{[x_1(t) - x_1(\tau)]^2 + [x_2(t) - x_2(\tau)]^2\}^{1/2}$  und  $x(t) = (x_1(t), x_2(t))$ ,  $0 \leq t \leq 2\pi$  die Parametrisierung des glatten Randes  $\Gamma$  ist.  $H_0^{(1)}$  bezeichnet die Hankelfunktion 0. Ordnung und 1. Art und  $\bar{k}$  die Wellenzahl.

Zur Lösung von (1) werden Wavelets zusammen mit einem volldiskreten Kollokationsverfahren [7, 5, 6] verwendet. Dazu werden als Ansatzfunktionen stetige, stückweise lineare biorthogonale Wavelets  $\psi_{j,k}$  mit zwei verschwindenden Momenten mit folgender Maske verwendet:  $g_k = \{1/2, -1, 1/2\}$ . Auch diese bilden eine Rieszbasis ([8]), so daß die theoretischen Ergebnisse von [2, 3, 4] Anwendung finden können.

Wegen der Kollokationsmethode werden auf der Testfunktionalseite Punktauswertungen benötigt. Deshalb stellen die verwendeten Funktionale von Brandt/Lubrecht adäquate „Wavelets“ im Raum der  $\delta$ -Distributionen dar. In den Rechnungen haben beide Funktionen, sowohl die Wavelets  $\{\psi_{l,k}\}$  als auch die Testfunktionale  $\{\eta_{l,k}\}$ , zwei verschwindende Momente, d. h., sie sind orthogonal zu konstanten und linearen Funktionen.

Mit dem folgenden a-priori Kompressionskriterium, das in [3] aufgestellt wurde, brauchen nur die Matrixelemente  $a_{(l',k')(l,k)} = \langle \eta_{l',k'}, A\psi_{l,k} \rangle$  berechnet und abgespeichert zu werden, die die folgende Bedingung erfüllen:

$$\text{dist}(\Omega_{l,k}, \tilde{\Omega}_{l',k'}) \leq \max \left\{ a2^{-l}, a2^{-l'}, aj^{5/6} \cdot 2^{(2/3)j - (4/3)l - (2/3)l'} \right\}. \quad (2)$$

Hier bezeichnen wir mit  $\Omega_{l,k}$  den Träger der  $\psi_{l,k}$ , mit  $\tilde{\Omega}_{l',k'}$  den Träger der  $\eta_{l',k'}$ , und  $a$  ist eine Konstante, die noch geeignet gewählt werden muß. Auch für diese Wahl kann man eine einfache und praktisch handhabbare Bedingung angeben ([6]). Wegen des volldiskreten Verfahrens wird die Integration mittels numerischer Quadratur realisiert.

Der Schwerpunkt des Projektes lag in der Implementierung des Verfahrens und im Vergleich mit anderen bekannten Methoden anhand wichtiger Testbeispiele. So wurden Beispiele mit einem Kreis, einer Ellipse und einem tragflügelähnlichen Streuprofil für unterschiedliche Wellenzahlen  $\bar{k}$  gerechnet. Wie in der Ingenieurliteratur üblich, wurde auch die Streuamplitude im Fernfeld und die RCS berechnet. Dort, wo Vergleichswerte vorlagen, konnten diese verifiziert werden. Wellenzahlen bis 10 bereiteten keine ernststen Schwierigkeiten. Bei Wellenzahlen weit darüber hinaus (so wurde auch mit  $\bar{k} = 100$  gerechnet) mußte die Kompressionsrate drastisch gesenkt

und die Anzahl der Diskretisierungspunkte deutlich erhöht werden, um noch die gewünschte Konvergenzgeschwindigkeit zu erhalten und ein brauchbares Resultat zu erzielen.

In allen Fällen erhalten wir trotz nahezu optimaler Kompressionsrate die theoretisch zu erwartende Konvergenzordnung 2 (wegen der linearen Ansatzfunktionen und der Trapezregel bei der Quadratur) sowohl für die Lösung als auch für Funktionale der Lösung. So kann dieses Verfahren aufgrund seiner Kompressionsraten ( $\approx 15$  für  $N = 4000$ ) schon für Probleme eingesetzt werden, die mit einem üblichen Kollokationsverfahren nicht mehr behandelbar wären.

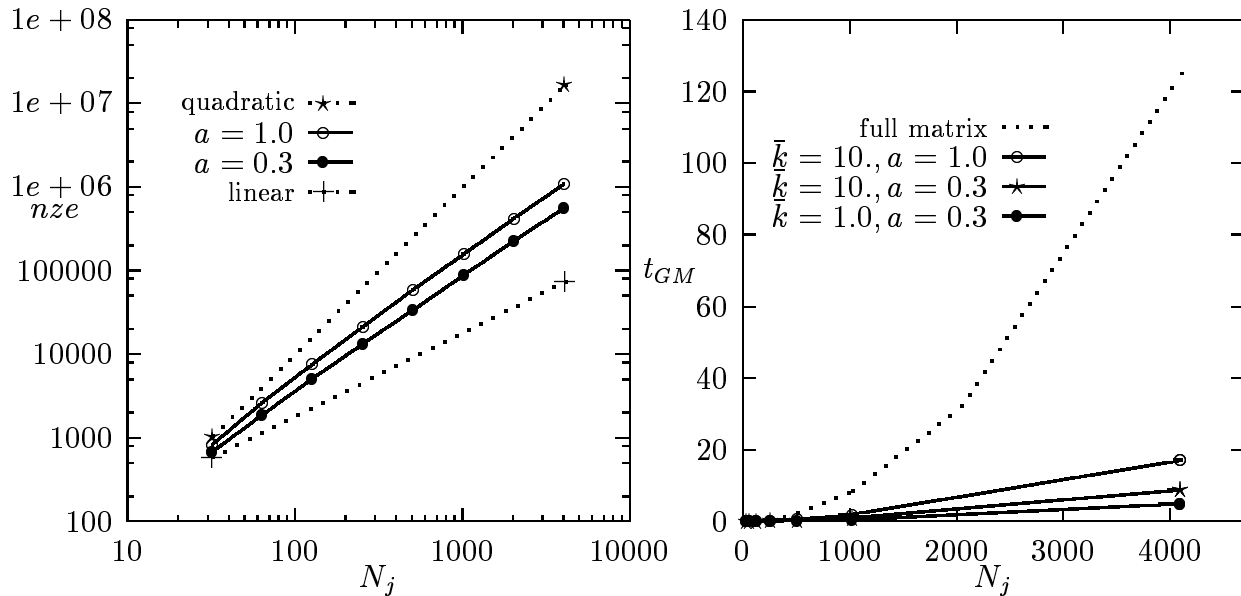


Abb. 1: Anzahl  $nze$  von Nichtnullelementen der komprimierten Matrix für zwei Konstanten  $a$  und die CPU-Zeit  $t_{GM}$  für die iterative Lösung des entstehenden linearen Gleichungssystems mittels GMRES für verschiedene Wellenzahlen  $\bar{k}$  und Konstanten  $a$ .

Wie die Quadratur zu gestalten ist, um letztendlich schneller als ein übliches Diskretisierungsverfahren zu werden, wurde in [9] angegeben. Dazu wurden schon einige numerische Tests vorgenommen, die die Überlegenheit der neuen Strategie deutlich ausweisen. Dazu muß der Abstand des Trägers des Testfunktionals von dem Träger des aktuellen Wavelets, über das gerade integriert wird, bei der Quadratur mit berücksichtigt werden. Auch der Beitrag, den dieses Integral zum jeweiligen Element der Steifigkeitsmatrix leistet, hat in die Genauigkeit der durchzuführenden Quadratur einzugehen.

## Literatur

1. D. COLTON, R. KRESS, *Integral equation methods in scattering theory*, Springer 1992.
2. W. DAHMEN, S. PRÖSSDORF, R. SCHNEIDER, *Wavelet approximation methods for pseudodifferential equations I: Stability and convergence*, Math. Z. 215, 583-620 (1994).
3. W. DAHMEN, S. PRÖSSDORF, R. SCHNEIDER, *Wavelet approximation methods for pseudodifferential equations II: Matrix compression and fast solution*, Advances in Computational Mathematics, 1 (1993), 259-335.
4. W. DAHMEN, S. PRÖSSDORF, R. SCHNEIDER, *Multiscale methods for pseudodifferential equations*, in: Recent Advances in Wavelet Analysis, L.L. Schumaker, G. Webb (eds.),

Academic Press, Boston 1993, 191-235.

5. W. DAHMEN, B. KLEEMANN, S. PRÖSSDORF, R. SCHNEIDER, *Multiscale methods for pseudodifferential equations*, Proceedings ICIAM'95 Hamburg, erscheint in: ZAMM.
6. W. DAHMEN, B. KLEEMANN, S. PRÖSSDORF, R. SCHNEIDER, *Multiscale methods for the solution of the Helmholtz and Laplace equations*, erscheint in: Boundary Element Methods 1989–1995, Reports of the DFG, Ed.: W. Wendland, Springer 1996.
7. B. KLEEMANN, *Wavelet algorithm for the exterior Dirichlet problem of the HELMHOLTZ equation*, Tagungsbericht 42/1994: „Boundary Element Methods: Application and Error Analysis“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, Oktober 1994.
8. A. RATHSFELD, *A wavelet algorithm for the solution of the double layer potential equation over polygonal boundaries*, J. Integral Equations Appl., Vol. 7, No. 1 (1995), 47-98.
9. R. SCHNEIDER, *Multiskalen- und Wavelet-Matrixkompression: Analysisbasierte Methoden zur effizienten Lösung großer vollbesetzter Gleichungssysteme*, Habilitationsschrift, TH Darmstadt, 1995.

**Multiskalen-Methoden für Sattelpunktsprobleme in der optimalen Steuerungstheorie****Bearbeiter:** A. Kunoth**Förderung:** Texas Higher Education Coordination Board, Advanced Research Program**Kooperation:** W. Dahmen (RWTH Aachen), A. J. Kurdila (Texas A&M University)

In [1] wurde gezeigt, wie sich unter Verwendung von Multiskalen-Methoden Sattelpunktsprobleme optimal unabhängig von der Diskretisierungstiefe vorkonditionieren lassen, die durch Anhängen essentieller Randbedingungen an die schwache Formulierung elliptischer Differentialgleichungen entstehen. Diese mittels Methoden aus der Approximationstheorie erhaltenen Ergebnisse sind dimensionsunabhängig und lassen eine besonders geeignete Realisierung in drei und mehr Dimensionen basierend auf wavelet-artigen Funktionen zu. Die schwierige Konstruktion solcher Multiskalen-Basen, wenn sie an essentielle Randbedingungen angepaßt werden müssen, wird hier durch das Anhängen der Randbedingungen mittels Lagrangescher Multiplikatoren umgangen. Dieser Ansatz eignet sich daher besonders auch für Probleme der optimalen Steuerung, etwa aus der Elastizitätstheorie, bei denen die Kontrolle über die Randbedingungen ausgeübt wird. Die Vorkonditionierungsstrategie für eine solche beliebig multivariate nichtsymmetrische elliptische partielle Differentialgleichung wird in [3] beschrieben. An einer objekt-orientierten Implementierung in 3D auf einem polyhedralen Gebiet wird unter Benutzung von Software-Tools aus [2], [4] gegenwärtig gearbeitet.

**Literatur**

1. A. KUNOTH, *Multilevel preconditioning – Appending boundary conditions by Lagrange multipliers*, Advances in Computational Mathematics, Vol. 4, No. I-II, Special Issue on Multiscale Methods, 1995, p. 145-170.
2. A. KUNOTH, *Computing integrals of refinable functions – Documentation of the program*, Version 1.1, Technical Report ISC-95-02-MATH, Institute for Scientific Computation, Texas A&M University, Mai 1995.
3. A. KUNOTH, A. KURDILA, *Multilevel preconditioning of saddle point problems in optimal control*, in Vorbereitung.
4. K. URBAN, *Multiskalenverfahren für das Stokes-Problem und angepaßte Wavelet-Basen*, Dissertation, RWTH Aachen, 1995, erscheint in: Aachener Beiträge zur Mathematik, Augustinus-Verlag, Aachen.

**Elliptische Probleme vierter Ordnung zur Approximation von Scattered Data****Bearbeiter:** A. Kunoth**Förderung:** Europäische Gemeinschaft, Programm „Human Capital and Mobility“**Kooperation:** E. Arge (SINTEF, Oslo)

Im Bereich des Computer Aided Geometric Design befassen sich viele Anwendungen mit der Aufgabe, eine gegebene Menge von verteilten Daten durch eine Fläche mit minimaler Krümmung zu approximieren. Nach geeigneter Mittelung der Daten kann sich das Problem in der Form stellen, die numerische Lösung einer bivariaten elliptischen partiellen Differentialgleichung vierter Ordnung mit vereinzelt vorgegebenen Lösungswerten als Approximations- oder Interpolationsproblem zu bestimmen. Aufgrund vorliegender umfangreicher Software und Anwendervorgaben ließ sich ein Multigrid- oder Multilevel-Ansatz nicht ohne weiteres realisieren. Da zunächst keine gemischten partiellen Ableitungen im Differentialoperator vorlagen, wurde eine instationäre ADI-Methode innerhalb eines direkten Verfahrens implementiert. Die überraschend guten Ergebnisse lassen sich in [1] finden.

**Literatur**

1. E. ARGE, A. KUNOTH, *An efficient ADI-solver for scattered data problems with global smoothing*, Technical Report SINTEF STF33 A95015, Oslo, Norwegen, Juni 1995, erscheint in: Numerical Methods and Software Tools in Industrial Mathematics, M. Dæhlen, A. Tveito (eds.), Academic Press.

## Multiskalen-Methoden zur numerischen Behandlung von Operatorgleichungen

**Bearbeiter:** A. Kunothe, S. Prößdorf

**Förderung:** DFG

**Kooperation:** W. Dahmen (RWTH Aachen), R. Schneider (TH Darmstadt), K. Urban (RWTH Aachen)

Im Rahmen des Projekts wurde schwerpunktmäßig an Multiskalenmethoden zur numerischen Behandlung von partiellen Differentialgleichungen gearbeitet. Unter Benutzung von Methoden aus der Theorie der Funktionenräume und der Approximationstheorie wurde gezeigt, wie sich optimale Vorkonditionierer für instationäre Stokes-Probleme herleiten lassen [1]. Dies zieht die iterative Lösung der entsprechenden Gleichungssysteme in optimal linearer Komplexität nach sich, was besonders höherdimensionale Probleme erst rechenbar machen läßt. Des weiteren wurde die Flexibilität von biorthogonalen Wavelets dahingehend ausgenutzt, stabile Basen im Sinne der Ladyženskaja-Babuška-Brezzi-Bedingung für Stokes-Probleme in beliebiger Dimension zu konstruieren, was bei klassischen Finite Elementen sehr schwierig sein kann. Die in [1] zu findenden entsprechenden Ergebnisse in 3D basieren zum Teil auf der Implementierung [4] und wurden in [5] detailliert beschrieben. Abb. 1 zeigt die Lösung eines Driven-Cavity Problems auf einem dreidimensionalen Einheitswürfel.

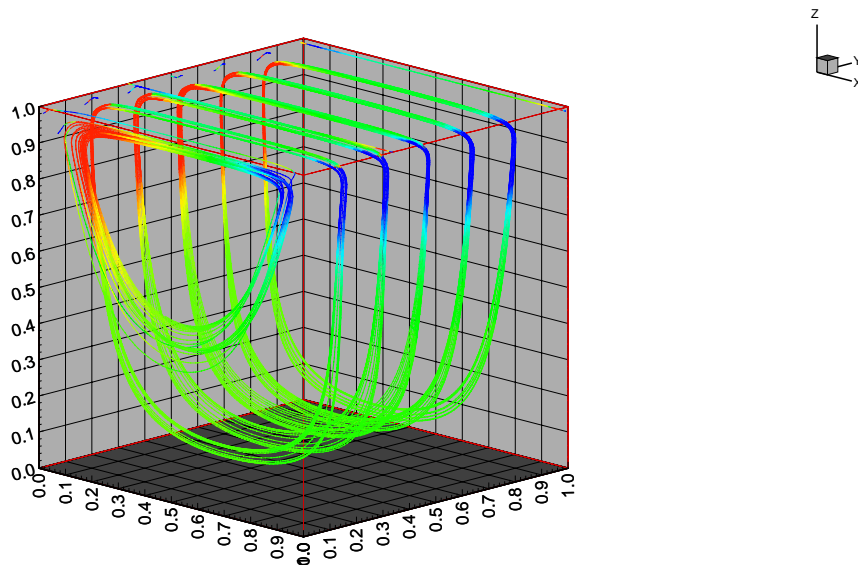


Abb. 1: Stromlinien für ein 3D Driven-Cavity-Problem; Grauwerte zeigen den Druck.

Die theoretischen, bisher lückenhaften Ergebnisse zur Konstruktion von dazu benötigten stabilen biorthogonalen Wavelets auf einem Intervall werden gegenwärtig in [2] mit einer Implementierung verschiedener, auf  $B$ -Splines beruhender Beispiele zusammengestellt. Des weiteren wurde mit [3] ein umfassender Überblick über die Verwendung wavelet-artiger Basen zur komplexitätsoptimalen Lösung von partiellen Differentialgleichungen und Integralgleichungen erstellt, in dem besonders auf die Konstruktion stabiler Wavelet-Basen auf 2D-Polyeder-Oberflächen, auf adaptive Quadratur und wavelet-basierende Fehlerschätzer eingegangen wird.

**Literatur**

1. W. DAHMEN, A. KUNOTH, K. URBAN, *A wavelet-Galerkin method for the Stokes equations*, Technical Report ISC-95-05-MATH, Institute for Scientific Computation, Texas A&M University, Revised version, August 1995, erscheint in: Computing.
2. W. DAHMEN, A. KUNOTH, K. URBAN, *Biorthogonal spline wavelets on the interval – Stability and moment conditions*, in Vorbereitung.
3. W. DAHMEN, A. KUNOTH, R. SCHNEIDER, *Operator equations, multiscale concepts and complexity*, WIAS-Preprint No. 206, Berlin 1995, erscheint in: Lectures in Applied Mathematics, J. Renegar, M. Shub and S. Smale (eds.), American Mathematical Society.
4. A. KUNOTH, *Computing integrals of refinable functions – Documentation of the program*, Version 1.1, Technical Report ISC-95-02-MATH, Institute for Scientific Computation, Texas A&M University, Mai 1995.
5. K. URBAN, *Multiskalenverfahren für das Stokes-Problem und angepaßte Wavelet-Basen*, Dissertation, RWTH Aachen, 1995, erscheint in: Aachener Beiträge zur Mathematik, Augustinus-Verlag, Aachen.

**Die Gleichung der tragenden Linie für gekrümmte Tragflügel in oszillatorischer Bewegung****Bearbeiter:** S. Prößdorf**Kooperation:** G. Chiocchia, D. Tordella (Dept. of Aerospace Engineering, Politecnico di Torino)

In diesem Projekt wurde eine neue Methode der nicht stationären linearen tragenden Linie zur Bestimmung der Zirkulation und der Auftriebsverteilung entlang der Spannweite eines gekrümmten Tragflügels unter den Bedingungen harmonischer Schwingungen kleiner Amplituden entwickelt. Die Methode beruht auf der sogenannten Dreiviertelpunktmethode von Pistoiesi-Weissinger und deren Kopplung mit der nicht stationären Theorie von Possio für die Bewegung von Tragflächen. Dies führt auf eine singuläre Integro-Differentialgleichung vom modifizierten Prandtl'schen Typ. Diese Gleichung wird eingehend analysiert, insbesondere werden alle Singularitäten der verschiedenen Kernfunktionen, die für die Lösung der Gleichung von entscheidender Bedeutung sind, untersucht. Die Singularitäten hängen entscheidend von der geometrischen Form des Tragflügels und den physikalischen Strömungsparametern ab. Die numerische Lösungsmethode ist eine auf Tschebyscheffscher polynomialer Approximation für die gesuchte Lösung beruhende Kollokation unter Benutzung der Gauss'schen Quadraturtechnik. Für dieses Verfahren werden Stabilität und Fehlerabschätzungen in gewichteten Sobolev-Normen und in gewichteten gleichmäßigen Normen bewiesen.

Die Methode wurde für verschiedene geometrische und kinematische Tragflügelkonfigurationen numerisch getestet. Vergleiche mit bekannten Lösungen, die auf der Theorie der tragenden Fläche basieren (siehe B. Laschka) zeigten die Effizienz der Methode besonders im Falle harmonischer Schwingungen sowie in den Fällen langsamer und moderat schneller pulsierender Bewegungen. Außerdem konnte die Anwendbarkeit der Methode im Falle halbmondförmiger Flügel nachgewiesen werden, für den es in der Literatur bisher keinerlei Ergebnisse gab. Die Methode läßt weitere Anwendungen z. B. für Vorabschätzungen des aerodynamischen Verhaltens von Tragflügeln oder in der Physik der Fortbewegung von Tieren (u. a. Vogelflüge) zu.



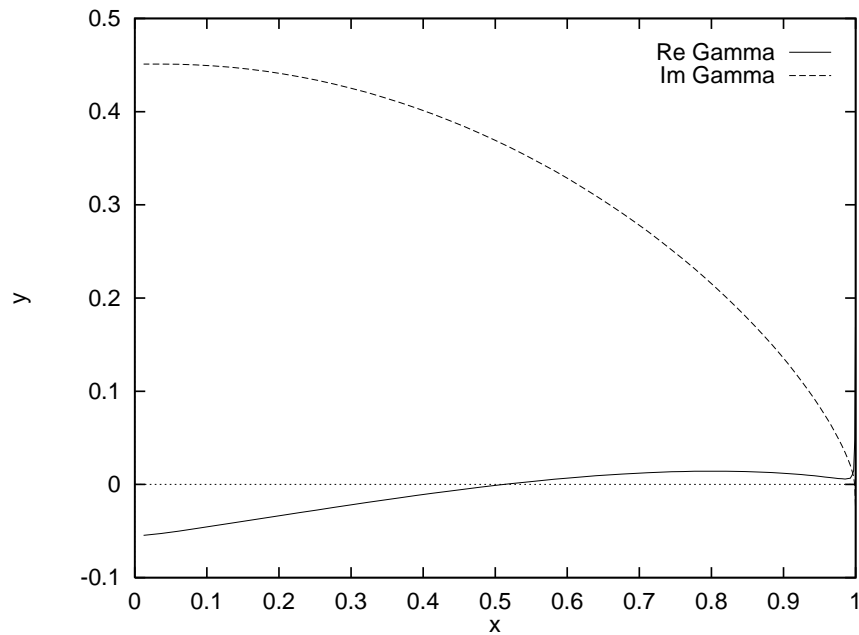


Abb. 1: Spannweitenweise Zirkulation an einem Delta-Tragflügel bei schwingender Bewegung (reduzierte Frequenz = 0.4)

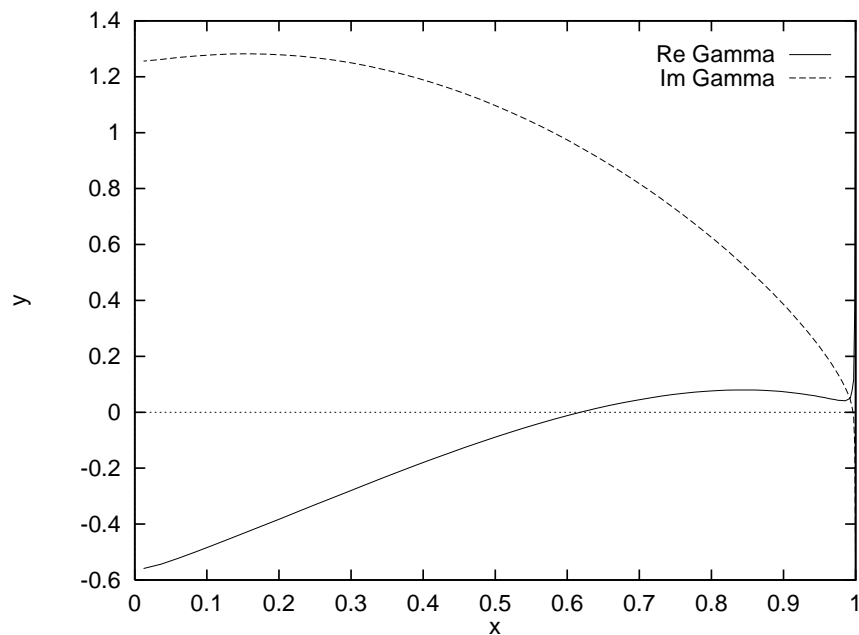


Abb. 2: Spannweitenweise Zirkulation an einem Delta-Tragflügel bei schwingender Bewegung (reduzierte Frequenz = 1.2)

## Literatur

1. S. PRÖSSDORF, D. TORDELLA, *On an extension of Prandtl's lifting line theory to curved wings*, Impact of Computing in Science and Engineering 3 (1991), 192-212.
2. G. CHIOCCHIA, D. TORDELLA, S. PRÖSSDORF, *The lifting line equation for a curved wing in oscillatory motion*, eingereicht in: ZAMM, WIAS-Preprint No. 218, 1996.

## Kollokations-Randelement-Methoden mit nicht glatten Splines

**Bearbeiter:** S. Prößdorf

**Kooperation:** W. McLean (The University of New South Wales, Sydney)

Für Randelementmethoden zur numerischen Lösung zweidimensionaler Randwertaufgaben, die glatteste Splines als Ansatzfunktionen benutzen, existiert (zumindest im Falle glatter Randkurven) eine vollständige Stabilitäts- und Fehleranalyse (siehe [1] und die dort zitierte Literatur). Von den Ingenieuren werden bei der Benutzung von Randelementmethoden jedoch oft Splines mit Defekt, d. h. Splines mit mehrfachen Knoten (z. B. stetige quadratische Splines oder Hermiteische kubische Splines) bevorzugt, da in diesem Fall die Steifigkeitsmatrizen der diskretisierten Gleichungen eine viel einfachere Struktur besitzen. Für diesen Fall gab es in der Literatur bislang kaum Stabilitätsaussagen oder Fehlerabschätzungen. Ziel des vorliegenden Projektes war es, diese Lücke zu schließen. Für Kollokationsmethoden zur Lösung periodischer eindimensionaler Pseudodifferentialgleichungen, die Splines mit Defekt als Ansatzfunktionen benutzen, wurden notwendige und hinreichende Stabilitätskriterien bewiesen und Fehlerabschätzungen in der Skala der Sobolev-Normen angegeben. Außerdem wurden Superkonvergenzergebnisse bei spezieller Wahl der Kollokationspunkte (d. h. Erhöhung der Konvergenzordnung bezüglich schwacher (negativer) Sobolev-Normen) nachgewiesen. Die theoretischen Ergebnisse wurden durch zahlreiche numerische Tests, z. B. für die Einfachschichtpotentialgleichung, bestätigt. Kernstück des Projektes ist eine Fehleranalyse für translationsinvariante Pseudodifferentialoperatoren (d. h. Operatoren mit konstanten Koeffizienten), die auf Fourieranalysis-Techniken und der Verallgemeinerung eines bekannten Ergebnisses von L. Collatz und W. Quade (Rekursionsformel für die Fourierkoeffizienten der Splines) beruht. Die Verallgemeinerung auf den Fall variabler Koeffizienten bzw. Symbole gelingt mittels lokaler Prinzipien, die in einem früheren Projekt des Bearbeiters entwickelt wurden.

### Literatur

1. S. PRÖSSDORF, B. SILBERMANN, *Numerical Analysis for Integral and Related Operator Equations*, Akademie-Verlag and Birkhäuser, 1991.
2. W. MCLEAN, S. PRÖSSDORF, *Boundary element collocation methods using splines with multiple knots*, WIAS-Preprint No. 192, Berlin 1995, erscheint 1996 in: Numer. Math.

**Multiskalen-Vorkonditionierer und optimale Randelement-Löser für die Laplace-Gleichung****Bearbeiter:** S. Prößdorf**Kooperation:** B. N. Khoromskij (Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Rußland)

In diesem Projekt werden einige Strategien zur Konstruktion asymptotisch optimaler Algorithmen zur Lösung von Randintegralgleichungen für innere und äußere Randwertprobleme für die Laplace-Gleichung über polygonalen Gebieten entwickelt und analysiert. Das innere Dirichlet- oder Neumann-Problem ist bekanntlich äquivalent zur direkten Behandlung der Dirichlet-Neumann-Abbildung oder deren Inversen, d. h. des Poincaré-Steklov (PS)-Operators. Zur Konstruktion eines schnellen Algorithmus für den diskreten PS-Operator wenden wir, im Falle von polygonalen Gebieten, die aus Rechtecken und regulären Dreiecken zusammengesetzt sind, den Multiskalen-Vorkonditionierer nach Bramble-Pasciak-Xu auf das äquivalente Interface-Problem in  $H^{1/2}$  an. Ein schneller Matrix-Vektor-Multiplikationsalgorithmus basiert auf der Frequenz-Abschneidetechnik, angewandt auf die lokalen Schur-Komplemente. Das vorgeschlagene Kompressionsschema für den diskreten inneren PS-Operator hat die Komplexität  $O(N \log^q N)$ ,  $q \in \{2, 3\}$ , mit einem Speicherbedarf von  $O(N \log^2 N)$ , wobei  $N$  die Anzahl der Freiheitsgrade auf dem polygonalen Rand ist. Im Falle des äußeren Problems schlagen wir eine Modifikation der direkten Standard-Randelementmethode vor, deren Implementierung sich reduziert auf eine Wavelet-Approximation entweder des Einfachschichtpotentials oder des hypersingulären harmonischen Potentials sowie auf eine Matrix-Vektor-Multiplikation für den diskreten inneren PS-Operator.

**Literatur**

1. B. N. KHOROMSKIJ, S. PRÖSSDORF, *Multilevel preconditioning on the refined interface and optimal boundary solvers for the Laplace equation*, Advances in Computational Mathematics 4 (1995), 331–355.

## Ein Waveletalgorithmus zur Lösung des fixen geodätischen Randwertproblems

**Bearbeiter:** A. Rathsfeld

**Kooperation:** R. Klees (Delft University of Technology)

Ein klassisches Grundproblem der Geodäsie besteht in der Bestimmung des Schwerfeldes der Erde aus gemessenen Schwerewerten über der als bekannt vorausgesetzten Erdoberfläche. Mathematisch bedeutet dies die Lösung der Poisson-Gleichung mit einer nichtlinearen Randbedingung. Führt man nun ein gut approximierendes Vergleichsfeld ein und vernachlässigt man Glieder kleiner Ordnung, so kann das Randwertproblem auf das lineare Problem der schiefen Ableitung für die Laplace-Gleichung zurückgeführt werden.

Dieses Problem wird mittels Randelementtechnik diskretisiert und numerisch gelöst. Dabei entstehen große Systeme linearer Gleichungen mit vollbesetzten Matrizen, deren Aufstellung und Lösung viel Rechenzeit und Speicherplatz erfordert. Als alternatives Verfahren haben wir einen Waveletalgorithmus entwickelt (vgl. [1]), bei dem 95 % der Einträge in der  $9000 \times 9000$  Matrix vernachlässigt werden können. Wenn die Matrix mit einem geeigneten Quadraturverfahren berechnet und das Gleichungssystem iterativ gelöst wird, dann kann die Gesamtrechenzeit für ein  $2200 \times 2200$  System auf 53 % der Zeit für herkömmliche Verfahren reduziert werden. Es hat sich also gezeigt, daß die bekannten theoretischen Resultate von Dahmen, Pröbldorf und Schneider [2] für einfache Modellprobleme auch im Fall komplizierter Geometrien aus praktisch relevanten Anwendungen von großem Nutzen sind.

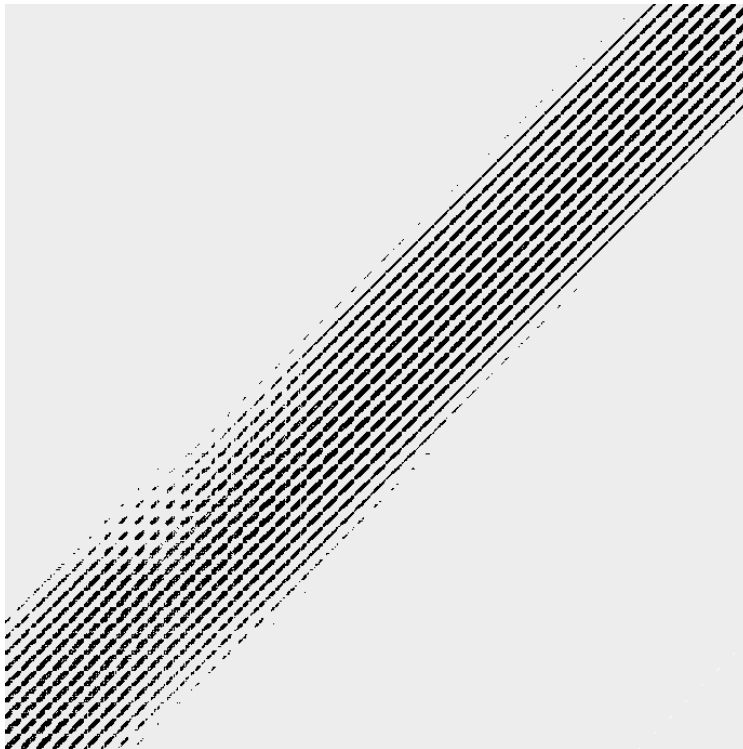


Abb. 1: Steifigkeitsmatrix für Standardmethode:  
schwarz = Einträge  $\geq 10^{-4}$ , grau = Einträge  $\geq 10^{-5}$

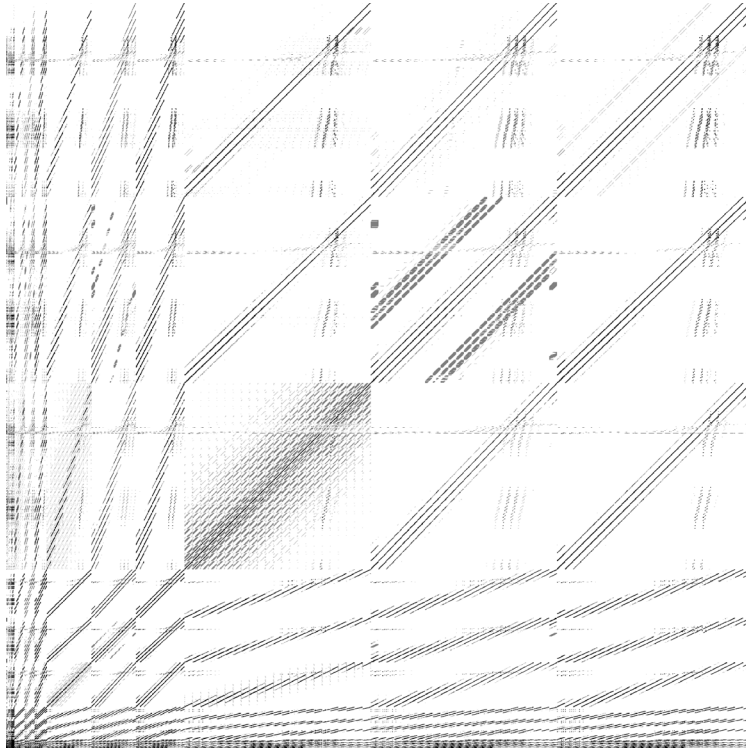


Abb. 2: Steifigkeitsmatrix für Waveletmethode:  
schwarz = Einträge  $\geq 10^{-4}$ , grau = Einträge  $\geq 10^{-5}$

### Literatur

1. A. RATHSFELD, *A wavelet algorithm for the boundary element solution of a geodetic boundary value problem*, in Vorbereitung.
2. W. DAHMEN, S. PRÖSSDORF, R. SCHNEIDER, *Wavelet approximation methods for pseudo-differential equations II: Matrix compression and fast solution*, *Advances in Computational Mathematics*, 1 (1993), 259-335.

## Randintegralgleichungen und die schnelle Lösung der biharmonischen Gleichung

**Bearbeiter:** G. Schmidt

**Kooperation:** B. N. Khoromskij (Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Rußland)

Es wurden analytische und numerische Eigenschaften von Randintegraloperatoren für die biharmonische Gleichung in Gebieten mit Ecken untersucht. Zur Begründung von Randelementmethoden zur Lösung von Randwertaufgaben elliptischer Gleichungen in nicht glatten Gebieten werden die Abbildungseigenschaften von entsprechenden Randintegraloperatoren in den Spurräumen der schwachen Lösung benötigt. Aufbauend auf den Ergebnissen für das Dirichletproblem ([1]) wurden in [3] die bekannten Randwertaufgaben für die Plattengleichung untersucht. Dabei wurden die Abbildungseigenschaften der Randintegraloperatoren für die Plattengleichung vollständig beschrieben und äquivalente Systeme von Randintegralgleichungen abgeleitet. Diese Systeme sind stark elliptisch, so daß die Konvergenz von Galerkin-Randelement-Methoden gesichert ist.

Aus den Abbildungseigenschaften der Randintegraloperatoren lassen sich unmittelbar die der Poincaré-Steklov-Operatoren für die biharmonische Gleichung ableiten. Mittels dieser Operatoren wurde in [2] ein optimaler Algorithmus zur Lösung des Dirichletproblems entwickelt und theoretisch begründet.

### Literatur

1. G. SCHMIDT, B. N. KHOROMSKIJ, *Boundary integral equations for the biharmonic Dirichlet problem on nonsmooth domains*, WIAS-Preprint No. 129, Berlin 1994.
2. B. N. KHOROMSKIJ, G. SCHMIDT, *A fast interface solver for the biharmonic Dirichlet problem on polygonal domains*, WIAS-Preprint No. 162, Berlin 1995.
3. G. SCHMIDT, *Boundary integral operator for plate bending in domains with corners*, WIAS-Preprint No. 180, Berlin 1995.

## Approximative Approximation

**Bearbeiter:** G. Schmidt

**Kooperation:** V. Maz'ya (Universität Linköping, Schweden), M. Sulimov (Universität St. Petersburg)

In den letzten Jahren wurden von V. Maz'ya numerische Algorithmen zur Lösung nichtlinearer partieller Differential- und Integrodifferentialgleichungen entwickelt, die auf der Anwendung von Integralgleichungsmethoden und speziellen Approximationsverfahren beruhen. Diese Verfahren nutzen Basisfunktionen, die die effektive Auswertung von verschiedenen Potentialoperatoren der mathematischen Physik ermöglichen, aber nicht Polynome reproduzieren können. Die Konvergenzanalyse der vorgeschlagenen numerischen Algorithmen erfordert die theoretische Untersuchung der genannten Approximationsverfahren. Da Polynome nicht reproduziert werden und die Anwendung bei numerischen Verfahren im Hintergrund steht, ist es günstig, einen modifizierten Approximationsbegriff einzuführen. Es wird verlangt, daß das Verfahren Funktionen mit einer gewissen Ordnung bei einer vorgegebenen Genauigkeit approximiert, aber im Grenzfall müssen die Approximierenden nicht gegen die Funktion konvergieren. Vom Standpunkt der Numerik aus sind diese Forderungen plausibel, da bei der numerischen Lösung von Anwendungsproblemen die gewünschten Größen immer innerhalb gewisser Toleranzen berechnet werden müssen. Andererseits wird durch diesen Zugang die Klasse der approximierenden Funktionen wesentlich erweitert, so daß es möglich ist, neue Algorithmen zu entwickeln, die auf der Anwendung von Integralgleichungsmethoden basieren. Im Falle nichtlinearer Evolutionsgleichungen wurden explizite Lösungsverfahren implementiert, die gegenüber bekannten Verfahren wesentlich genauer und robuster sind.

1995 wurde in Fortsetzung der im Vorjahr durchgeführten Arbeiten insbesondere die Kubatur von mehrdimensionalen Integraloperatoren mit singulären Kernfunktionen untersucht. In [1] wurden neue Klassen von Kubaturformeln für bekannte Potentiale der mathematischen Physik angegeben, die sich recht einfach implementieren lassen und beliebig hohe Konvergenzraten erreichen.

Um diese Ergebnisse auf den Fall glatter Funktionen in Gebieten im  $\mathbb{R}^n$  zu übertragen, ist es notwendig, die Approximation auf graduierten Gittern zu untersuchen. Für den Polyederfall ist es gelungen, der Approximation angepaßte graduierte Gitter und Kubaturformeln anzugeben, die bei vertretbarem Aufwand hinreichend genaue Approximationen der Integraloperatoren liefern (eine Arbeit hierzu ist in Vorbereitung).

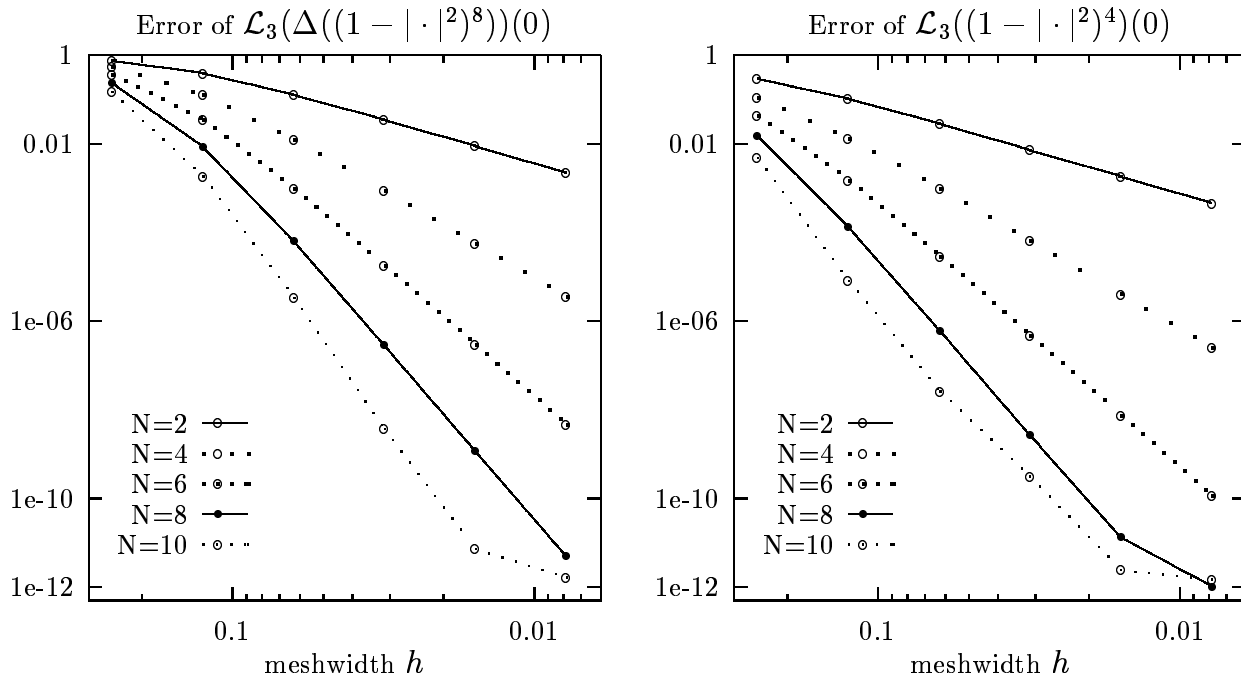


Abb. 1: Fehler verschiedener Approximationsordnungen für die Kubatur des Newtonschen Potentials.

## Literatur

1. V. MAZ'YA, G. SCHMIDT, „Approximate Approximations“ and the cubature of potentials, WIAS-Preprint No. 177, Berlin 1995, erscheint in: Rend. Mat. Acc. Lincei.



## **3.5 Forschungsgruppe Stochastische Systeme mit Wechselwirkung**

### **3.5.1 Zusammenfassung**

Die mathematische Analyse sehr großer Systeme und Strukturen mit wechselwirkenden Komponenten, zumal solcher, die inhomogen und irregulär sind, steht im Brennpunkt des Interesses in zahlreichen Bereichen der Naturwissenschaft (Festkörperphysik, Materialwissenschaften, Biologie, Neurophysiologie), aber auch, im Rahmen zunehmender Miniaturisierung und Komplexifizierung, technologischer Anwendungen (Neuronale Netze, Kommunikationsnetze). In derartigen großen Systemen treten qualitativ neue, kollektive Phänomene auf, die von spezifischen Details weitgehend unabhängig sind und in den unterschiedlichsten Anwendungen in ganz ähnlicher Weise modelliert werden. Besonders in stark ungeordneten Systemen ist die existierende mathematische Theorie noch sehr unzufriedenstellend, andererseits aber, besonders auch im Hinblick auf eine aussagefähige Interpretation und Extrapolation numerischer Simulationen, die hier oftmals an ihre Grenzen stoßen, dringend gefordert. Die Forschungsgruppe widmet sich dieser Problematik vom Standpunkt der Wahrscheinlichkeitstheorie mit der Zielsetzung, Methoden und Verfahren zu entwickeln, um, ausgehend von den mikroskopischen Modellen, Gleichungen für eine Beschreibung der globalen, makroskopischen Größen dieser Systeme zu erhalten.

### 3.5.2 Projekte

#### Spin-Gläser und Neurale Netze

**Bearbeiter:** A. Bovier

**Förderung:** EU, CHRX-CT93-0411

**Kooperation:** V. Gayrard (CPT-Marseille), P. Picco (CPT-Marseille)

Eine ausführliche Darstellung der Fragestellungen, denen wir uns in diesem Projekt widmen, wurde im Jahresbericht 1994 gegeben. Im diesem Jahr wurden eine Reihe von wichtigen neuen Resultaten erzielt. So wurde in der Arbeit [1] unter schwächstmöglichen Voraussetzungen ein Prinzip großer Abweichungen für die Verteilung der (unendlich vielen) Ordnungsparameter im Hopfield Modell bewiesen. Dies bedeutet, daß ein perfektes thermodynamisches Verhalten mit deterministischen thermodynamischen Potentialen für dieses ungeordnete Modell mit unendlich vielen relevanten Ordnungsparametern vorliegt. In der Praxis noch relevantere Resultate wurden in [2] für den Fall, daß die Zahl der „pattern“ proportional zur Systemgröße skaliert, gezeigt. Hier wurden alle wesentlichen heuristischen Erwartungen bezüglich des Verhaltens des Modells für kleine Proportionalitätsfaktoren  $\alpha$  mathematisch rigoros bewiesen. Dabei wurden Methoden zur Analyse komplizierter Zufallsfunktionen unbeschränkt vieler Variablen entwickelt, die auch in anderen Fragen der statistischen Mechanik ungeordneter Systeme von Nutzen sein werden.

Die schon im Vorjahr begonnene Untersuchung von Varianten des Hopfield Modells mit lang, aber endlich reichweitiger Wechselwirkung („Kac-Hopfield Modell“) [3], wurde ebenfalls intensiv weiter betrieben. Insbesondere geht es uns nunmehr darum, diese Modelle auf mesoskopischer Ebene zu charakterisieren. Das heißt, wir betrachten lokale Ordnungsparameter und untersuchen deren Verteilung unter dem Gibbs Maß bei geeigneter Skalierung. Dabei ergibt sich asymptotisch eine Beschreibung durch eine Ginzburg-Landau-artige Feldtheorie, wobei das entsprechende Funktional aber noch zufällig ist. Technisch ist die Kontrolle der Approximationsfehler hier äußerst aufwendig. Die Untersuchung des eindimensionalen Falles steht zur Zeit vor dem Abschluß [4]. Im höherdimensionalen Fall sind noch erhebliche Schwierigkeiten zu überwinden, was wohl noch geraume Zeit in Anspruch nehmen wird.

#### Literatur

1. A. BOVIER, V. GAYRARD, *An almost sure large deviation principle for the Hopfield model*, WIAS-Preprint No. 146 (1995), erscheint in Ann. Probab., (1996).
2. A. BOVIER, V. GAYRARD, *The retrieval phase of the Hopfield model: A rigorous analysis of the overlap distribution*, WIAS-Preprint No. 161 (1995), eingereicht bei Prob. Theor. Rel. Fields (1995).
3. A. BOVIER, V. GAYRARD, P. PICCO, *Large deviation principles for the Hopfield model and the Kac-Hopfield model*, Prob. Theor. Rel. Fields **101**, 511-546 (1995).
4. A. BOVIER, V. GAYRARD, P. PICCO, *Distribution of overlap profiles in the one-dimensional Kac-Hopfield model*, in Vorbereitung.

## Grenzflächen in zufälligen Medien

**Bearbeiter:** A. Bovier

**Förderung:** EU, CHRX-CT93-0411

**Kooperation:** Ch. Külske (Universität Rennes)

Eine der grundsätzlichen Fragen in der Theorie ungeordneter Systeme ist die, unter welchen Bedingungen eine „schwache“ zufällige Störung eines homogenen Systems dessen Eigenschaften in qualitativer Weise modifizieren kann. So stellt sich beispielsweise die Frage, ob rigide Phasengrenzflächen in Ferromagneten bei schwacher Verunreinigung ihre Stabilität beibehalten oder verlieren. Die Antwort auf diese Frage wird von der Raumdimension abhängen. So wurde im Rahmen von SOS (solid-on-solid) Modellen Stabilität gegenüber schwacher Unordnung in Dimensionen  $D \geq 4$  bewiesen [1]. In diesem Jahr konnte ein dazu komplementäres Resultat bewiesen werden: In Dimensionen kleiner oder gleich drei existieren schon bei beliebig schwacher Unordnung keine translationskovarianten Gibbs-Zustände mehr, d. h. Grenzflächen werden schon durch beliebig kleine zufällige Störungen „rauh“ [2]. Die bisherigen Resultate sind noch rein qualitativ und insofern noch nicht völlig zufriedenstellend; wünschenswert wären Methoden, die genauere Aussagen über die Größe von Fluktuationen der Grenzflächen in endlichen Systemen erlauben. Hieran und an verwandten Fragestellungen wird in Zukunft weiter gearbeitet werden.

## Literatur

1. A. BOVIER, CH. KÜLSKE, *A rigorous renormalization group method for interfaces in random media*, Rev. Math. Phys. **6**, 413-496 (1994).
2. A. BOVIER, CH. KÜLSKE, *There are no nice interfaces in 2 + 1-dimensional SOS modeling random media*, WIAS-Preprint No. 151 (1995), erscheint in J. Statist. Phys. (1996).

## Ising Modelle auf Baumgraphen

**Bearbeiter:** D. Ioffe

In Ising Modellen auf Baumgraphen gibt es zwei verschiedene kritische Temperaturen: Die gewöhnliche kritische Temperatur  $T_c$ , die das Ende der paramagnetischen Phase angibt, sowie eine tiefere Temperatur  $T_c^{sg} < T_c$ , die als „Spin-Glas“ Übergangstemperatur bezeichnet wird. In dem Temperaturbereich zwischen  $T_c$  und  $T_c^{sg}$  erwartet man, daß der mit freien Randbedingungen konstruierte „ungeordnete“ Gibbszustand extremal ist. Dies wurde erst 1995 von Bleher, Ruiz und Zagrebnov für den Fall homogener Bäume (Bethe-Gitter) bewiesen, wobei eine technisch sehr komplizierte und mühsame Methode verwendet wird. In [1,2] haben wir einen sehr einfachen und natürlichen Zugang zu diesem Problem entwickelt, der die entsprechende Charakterisierung des ungeordneten Zustandes nicht nur auf Bethe-Gittern, sondern auch auf allgemeinen lokal endlichen Bäumen liefert.

## Literatur

1. D. IOFFE, *A note on the extremality of the disordered state for the Ising model on the Bethe lattice*, WIAS-Preprint No. 164 (1995), erscheint in Lett. Math. Phys. (1996).
2. D. IOFFE, *Extremality of the disordered state for the Ising model on general trees*, WIAS-Preprint No. 211 (1995), erscheint in Proceedings of „Workshop on trees“, Versailles, 1995.

## Wulff-Konstruktion und Phasentrennung

**Bearbeiter:** D. Ioffe

**Kooperation:** J.-D. Deuschel (TU-Berlin), E. Bolthausen (Universität Zürich)

Eine makroskopische Beschreibung der Gleichgewichtsform von Kristallen wurde bereits um die Jahrhundertwende von Wulff gegeben. Eine Herleitung dieser makroskopischen Konstruktion auf der Basis der statistischen Mechanik blieb jedoch bis zum Ende der achtziger Jahre ein völlig offenes Problem. In einer bahnbrechenden Arbeit von Dobrushin, Kotecky und Shlosman wurde dies erstmals für das zweidimensionale Ising Modell bei tiefen Temperaturen geleistet. In [1] haben wir die wesentlichen Resultate dieser Autoren auf den gesamten Temperaturbereich unterhalb der kritischen Temperatur verallgemeinert.

In Dimensionen größer als zwei ist die rigorose Herleitung der Wulff-Konstruktion noch immer ein offenes Problem, an dem wir derzeit intensiv arbeiten. Erste Resultate für die sogenannte „Winterbottom“ Konstruktion, die die Gleichgewichtsform von Tropfen im Kontakt mit einer festen Wand beschreibt, liegen bereits vor [2].

## Literatur

1. D. IOFFE, *Exact large deviation bounds up to  $T_c$  for the Ising model in two dimensions*, Probab. Theor. Rel. Fields **102**, 313-330 (1995).
2. E. BOLTHAUSEN, D. IOFFE, *Harmonic crystal on the wall: A microscopic approach*, in Vorbereitung.

## **Dünne organische Schichten**

**Bearbeiter:** A. Liemant

**Kooperation:** L. Brehmer, Institut für Festkörperphysik der Universität Potsdam

Die Arbeiten zur Untersuchung des Hoppingtransportes von Ladungen in amorphen Festkörpern wurden fortgesetzt. Grundlage der theoretischen Behandlung ist das von uns entwickelte mikroskopische Hoppingmodell, das die amorphe Struktur der lokalisierten Zustände - auf denen der Ladungstransport stattfindet - sowohl bzgl. der räumlichen als auch der energetischen Anordnung berücksichtigt. Im Falle geringer Ladungsträgerkonzentration kann die Analogie zu elektrischen Netzen mit zufälligen Widerständen genutzt werden. Dies führt zu asymptotischen Untersuchungen des effektiven Widerstandes eines Netzes mit einer unbegrenzt wachsenden Anzahl von Widerständen.

## **Literatur**

1. A. LIEMANT, *Leitfähigkeit eindimensionaler periodischer elektrischer Netze*, WIAS-Preprint No. 209 (1995).

## Katalytische Verzweigungsstrukturen

**Bearbeiter:** K. Fleischmann

**Förderung:** DFG

**Kooperation:** D. A. Dawson (Carleton University Ottawa), G. Leduc (Université du Québec à Montréal), J.-F. Le Gall (Université Pierre et Marie Curie, Paris), Y. Li und C. Mueller (University of Rochester)

Das Studium katalytischer Verzweigungsstrukturen ist durch zwei verschiedene Gesichtspunkte motiviert. Auf *mikroskopischer* Ebene ist es oft so, daß chemische Reaktionen zwischen Molekülen nur dann stattfinden können, wenn ein Katalysator anwesend ist. *Makroskopisch* werden chemische Reaktionen durch Reaktions-Diffusions-Gleichungen beschrieben, wobei die Katalysatoren als räumlich heterogene Ratenfunktionen (Reaktionskoeffizienten) erscheinen. Hierbei treten mitunter die Katalysatoren nur in gewissen *lokalisierten Zonen* auf, wie in fadenartigen Netzwerken, auf Oberflächen kugelartiger Gebilde oder in porösen Medien.

In der mathematischen Literatur wurden solche Reaktions-Diffusions-Gleichungen vorrangig mit Methoden der partiellen Differentialgleichungen untersucht, wobei die Reaktions-Ratenfunktionen als mehr oder weniger wohlverhaltend auf gewissen Oberflächen oder Teilmengen angenommen wurden (Bramson und Neuhauser, Chadam und Yin, Chan und Fung, Durrett und Swindle). Andererseits gibt es *biologische Reaktionen* (z. B. Glykolyse), bei denen Enzyme auf fadenförmigen Netzwerken angeordnet sind und als Katalysatoren wirken (Pagliaro und Taylor). Hier handelt es sich mehr um ein irreguläres, fraktal-ähnliches katalytisches Medium.

Unser Zugang besteht darin, Reaktionsraten durch *maßwertige stochastische* Prozesse zu beschreiben. Hieraus ergeben sich eine ganze Reihe von Konstruktionsfragen, da einerseits die Reaktionsraten irreguläre Situationen erfassen sollen, wie gerade beschrieben, aber andererseits noch mathematisch handhabbar sein müssen.

Es gibt einen engen Zusammenhang zwischen einer speziellen Klasse von quasi-linearen Reaktions-Diffusions-Gleichungen mit regulären Reaktionskoeffizienten und *Verzweigungs-Teilchen-Systemen bzw. Superprozessen*. Beispielsweise haben Dynkin und Kuznetsov sowie Le Gall diese Beziehung genutzt, um Fragen behebbarer Singularitäten dieser Gleichungen zu studieren, während Gorostiza und Wakolbinger auf solchem Wege das Langzeitverhalten von Lösungen von Systemen von Reaktions-Diffusions-Gleichungen untersucht haben.

Ein ähnlicher Zusammenhang besteht zwischen katalytischen Verzweigungsstrukturen und katalytischen Reaktions-Diffusions-Gleichungen, der zu einem wahrscheinlichkeitstheoretischen Zugang zum Studium dieser Gleichungen führen kann. Zusätzlich bietet die Beschreibung durch Verzweigungs-Teilchen-Systeme die Möglichkeit einer Behandlung auf 'mikroskopischer' Ebene und ist überdies von selbständigem mathematischem Interesse.

Im Berichtszeitraum ist es gelungen, eine stetige Super-Brownsche Bewegung in einem *Super-Brownschen Medium* zu konstruieren, s. [1]. Hier bilden nicht nur die reagierenden Substanzen ('Populationen') eine räumliche Verzweigungsstruktur, sondern auch die Katalysatoren, die gerade die Reaktionen der Substanzen ermöglichen. Hierfür war es notwendig, das von Barlow, Evans und Perkins entwickelte Konzept von Brownschen Kollisions-Lokalzeiten der Super-Brownschen Bewegung für den Fall unendlicher Maße zu verallgemeinern.

Eine andere Aktivität bestand darin, eine Super-Brownsche Bewegung in einem *lokal-unendlichen katalytischen Medium* zu konstruieren, s. [2], die durch Dynkin's bisher allgemeinste Klasse von räumlichen Verzweigungsstrukturen nicht erfaßt ist. Die hohe Konzentration katalytischer Masse führt dazu, daß die sich verzweigenden Populationen bereits vor dem Erreichen des katalytischen Zentrums eliminiert werden. Somit wurde zugleich ein für kritische Verzweigungsprozesse neuartiger Effekt nachgewiesen.

### **Literatur**

1. D. A. DAWSON, K. FLEISCHMANN, *A continuous super-Brownian motion in a super-Brownian medium*, WIAS-Preprint No. 165 (1995), eingereicht bei Journ. Theoret. Probab.
2. K. FLEISCHMANN, C. MUELLER, *A super-Brownian motion with a locally infinite catalytic mass*, WIAS-Preprint No. 197 (1995), eingereicht bei Probab. Theory Relat. Fields.



## Clusterbildungseffekte wechselwirkender Diffusionen

**Bearbeiter:** K. Fleischmann

**Kooperation:** J. Th. Cox (Syracuse University), S. N. Evans (University of California at Berkeley), A. Greven (Universität Erlangen-Nürnberg)

Die Herausbildung zufälliger *Cluster* ist ein Phänomen, das in vielen angewandten Gebieten beobachtet werden kann. Sie wird in der Regel durch zwei Effekte verursacht: Zum einen durch eine lokale Tendenz zur Angleichung, zum anderen durch verrauschte Transporteffekte, die der Clusterbildung sowohl entgegen wirken, als auch sie verstärken können und schließlich globale Übereinstimmungen ermöglichen. Es besteht ein großes Interesse, Einzelheiten dieser Mechanismen zu verstehen und dahinter liegende Grundprinzipien aufzuzeigen.

Aus angewandter Sicht kommen Impulse hierzu vor allem aus der *Populationsgenetik*. Typischerweise hat man hier Kolonien von Individuen verschiedener Genotypen, die einem „zufälligen Durchmischen“ (Resampling) innerhalb der Kolonien und einer Migration zwischen den Kolonien unterworfen sind. Eine mathematische Modellierung ist mit *wechselwirkenden Diffusionen* möglich. Dies ist eine reiche Klasse von Modellen, die sich bereits bewährt hat.

Aufbauend von Ergebnissen von Arratia über das eindimensionale Votermodell, von Sawyer über das Stepping-Stone-Modell, und Klenke über hierarchisch wechselwirkende Diffusionen, wurde ein neues mathematisches Modell entwickelt, s. [1], in welchem Clusterbildungseffekte mehr ‘innerhalb des Modells’ beschrieben werden können. Üblicherweise (insbesondere in den genannten Quellen) ist die Indexmenge (Phasenraum) eine abzählbare Menge (z. B.  $Z^d$ ). Um Cluster zu erfassen, muß man skalieren, und man verläßt den anfänglichen Rahmen einer abzählbaren Menge. Wir arbeiten daher von vorn herein mit einem *hierarchischen ‘Kontinuum’-Modell*, das den Fragestellungen mehr angepaßt ist. Die damit notwendigen Konstruktionsfragen wurden erfolgreich gelöst. Die Clusterformierung im subkritischen Regime wird jetzt mehr unmittelbar durch analytische Hilfsmittel beschrieben und führt schließlich zu einem vertieften Verständnis der Problematik.

## Literatur

1. S. N. EVANS, K. FLEISCHMANN, *Cluster formation in a stepping stone model with continuous, hierarchically structured sites*, WIAS-Preprint No. 187 (1995), erscheint in: Ann. Probab. (1996)

## Stochastische Teilchensysteme und Approximation der Boltzmann-Gleichung

**Bearbeiter:** W. Wagner

**Kooperation:** S. Rjasanow (Universität Kaiserslautern)

Der Schwerpunkt der Forschungsarbeit lag in der Weiterentwicklung und Untersuchung stochastischer Teilchensysteme mit variablen Gewichten unter dem Aspekt ihrer Anwendung zur numerischen Behandlung nichtlinearer Gleichungen vom Boltzmann-Typ. Es wurde zum einen die Konvergenz der empirischen Maße gegen die Lösung der makroskopischen Gleichung unter schwachen Voraussetzungen an die Parameter des Systems gezeigt [1]. Durch geeignete Auswahl dieser Parameter konnte eine signifikante Reduktion der Varianz (statistische Fluktuationen) bei der Berechnung verschiedener Funktionale der Lösung erreicht werden. Diese Untersuchungen wurden an Hand von Testrechnungen für Modellbeispiele illustriert [1,2].

### Literatur

1. S. RJASANOW, W. WAGNER, *A generalized collision mechanism for stochastic particle schemes approximating Boltzmann type equations*, WIAS-Preprint No. 157 (1995).
2. S. RJASANOW, W. WAGNER, *Stochastic systems of weighted particles approximating the spatially inhomogeneous Boltzmann equation*, Proceedings ICIAM 95 (Hamburg, 1995)

## **3.6 Forschungsgruppe Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik**

### **3.6.1 Zusammenfassung**

Die Forschungsgruppe verfolgt ein diversifiziertes Forschungsprogramm zur angewandten, algorithmisch orientierten Wahrscheinlichkeitstheorie und zur mathematischen Statistik. Im Berichtszeitraum kamen weitere Synergieeffekte durch verstärkte Kooperation innerhalb der Gruppe zum Tragen; intellektuelle Ressourcen wurden durch gruppenübergreifende Zusammenarbeit im Rahmen des WIAS erschlossen. Auf dem Gebiet der statistischen Software wurde die Aktivität verstärkt; das Programm ClusCorr zur Clusteranalyse hochdimensionaler Datenmengen wurde unter MS Windows/Excel implementiert und eine erste Anwendung im Kredit-Scoring durchgeführt. In das Forschungsprogramm zu kinetischen Gleichungen wurde die asymptotische Analysis linearer Transportgleichungen aufgenommen, wobei die umfangreichen Erfahrungen und Ergebnisse auf dem Gebiet der theoretischen stochastischen Numerik herangezogen werden konnten. Auf dem Gebiet der angewandten stochastischen Numerik wurden die laufenden, mit intensiven Simulationsuntersuchungen verbundenen Forschungsprojekte fortgesetzt; weitere potentielle Anwendungsgebiete wurden erschlossen (Polymerenphysik, Langevin-Lasergleichungen, Marketing). Die Querverbindungen der Numerik stochastischer Differentialgleichungen zur Theorie der Monte-Carlo-Algorithmen wurden in einem weiteren gruppeninternen Kooperationsprojekt behandelt. Bei der mathematischen Statistik standen weiterhin Fragen nichtparametrischer (unendlichdimensionaler) Modelle im Vordergrund. Motiviert sind diese in erster Linie durch stochastische inverse und schlecht gestellte Probleme. Die Grundlagenuntersuchungen zu optimalen Konvergenzgeschwindigkeiten, Hypothesentests und Approximationen abstrakter Experimente (u. a. auch erstmals systematisch im Rahmen der Theorie großer Abweichungen) wurden ergänzt durch die Mitarbeit im interdisziplinären Sonderforschungsbereich 373 „Quantifikation und Simulation ökonomischer Prozesse“. Höhepunkte des wissenschaftlichen Lebens waren die Tagung „Seminar on Mathematical Statistics Paris-Berlin: Complex Models in Nonparametrics“ und der gemeinsam mit dem SFB 373 veranstaltete Workshop „Smoothing and Resampling in Economics“.

### 3.6.2 Projekte

#### Numerische Modelle stationärer kinetischer Gleichungen

**Bearbeiter:** H. Babovsky, A. Mader

In der numerischen Simulation praxisrelevanter Probleme der Gasdynamik dominieren aufgrund der Komplexität nichtlinearer kinetischer Gleichungen stochastische Teilchenverfahren. Solche Algorithmen sind für Evolutionsprobleme in den letzten Jahren untersucht und mathematisch dadurch gerechtfertigt worden, daß für sie geeignete Gesetze der großen Zahlen hergeleitet werden konnten. Für stationäre Probleme hingegen fehlt eine solche Rechtfertigung, und numerische Experimente zeigen in vielen Situationen systematische Defekte. Das vorliegende Projekt konzentriert sich auf das eng umgrenzte Gebiet der stochastischen Simulation nichtlinearer eindimensionaler kinetischer Randschichten und ihrer Kopplung an strömungsdynamische Bereiche.

In [1] wurde das Verhalten stochastischer Teilchensysteme in der Nähe von Rändern systematisch untersucht. Im Vordergrund stand die Frage nach geeigneten Einström- und Reflexionsgesetzen an den physikalischen und künstlichen Rändern. Werden diese angemessen modelliert, so zeigt sich, daß außerhalb der kinetischen Randschicht die zur Herleitung der Navier-Stokes-Gleichungen benötigten Abschlußrelationen mittels Transportkoeffizienten erfüllt sind und dadurch eine Kopplung an strömungsdynamische Lösungen ermöglicht wird.

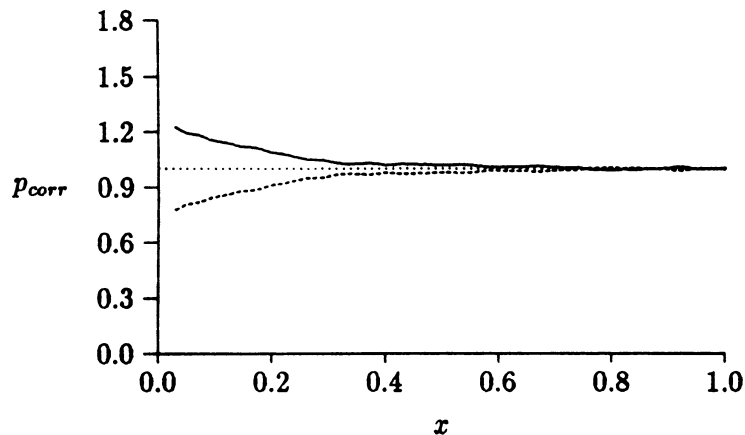


Abb. 1: Relaxation von Druckkoeffizienten

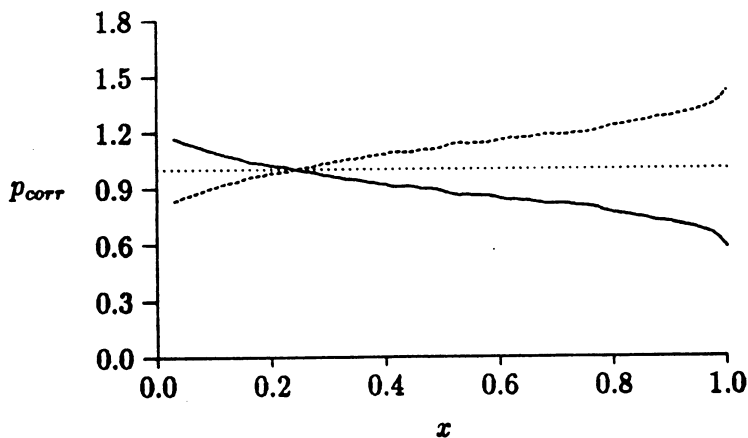


Abb. 2: Druckkoeffizienten bei inkorrekten künstlichen Randbedingungen

Abb. 1 zeigt die Relaxation von Koeffizienten des Drucktensors bei angemessener Behandlung des künstlichen rechten Randes im Gegensatz zur nicht angemessenen Modellierung (Abb. 2).

In [2] wurden deterministische Verfahren zur Behandlung von Modell-Stoßtermen der Boltzmann-Gleichung diskutiert, welche wesentliche Eigenschaften des Stoßoperators unverändert lassen. Die Entwicklung deterministischer Verfahren dient einmal dem Vergleich und damit der Einschätzung stochastischer Verfahren, zum anderen als Einstieg in die Entwicklung komplexerer deterministischer Algorithmen. Es ist zu erwarten, daß sich auf deterministische Verfahren moderne Diskretisierungs- und Lösungstechniken effizienter anwenden lassen als auf stochastische Simulationen. Die in Abb. 3 dargestellten Geschwindigkeitsprofile einer stationären eindimensionalen Modellströmung zeigen erhebliche Unterschiede zwischen stochastischer Simulation (durchgezogene Linie) und deterministischer Approximation (unterbrochene Linie).

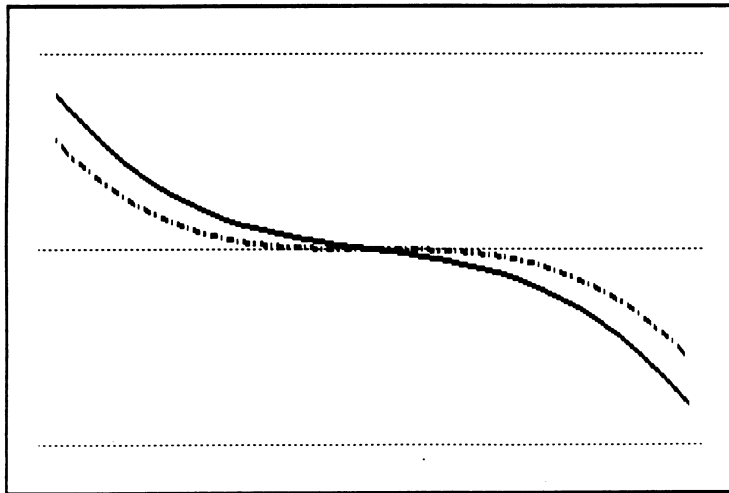


Abb. 3: Vergleich stochastischer mit deterministischer Simulation

Mit der Umsetzung der oben aufgeführten Ergebnisse in Algorithmen für mehrdimensionale Probleme wurde begonnen. Die Berechnung stationärer Lösungen erfolgt dabei einmal durch Relaxation des zeitabhängigen Problems, zum anderen durch Behandlung des stationären Problems als Fixpunktproblem mit einem geeigneten Iterationsverfahren.

### Literatur

1. H. BABOVSKY, *Simulation of kinetic boundary layers*, WIAS-Preprint No. 140, Berlin, 1995.
2. H. BABOVSKY, *Discretization and numerical schemes for stationary kinetic model equations*, WIAS-Preprint No. 179, Berlin, 1995.

## Asymptotische Analysis linearer Transportgleichungen

**Bearbeiter:** H. Babovsky, G. N. Milstein

Asymptotische Gleichungen als Modelle kinetischer Gleichungen spielen aufgrund ihrer reduzierten Komplexität in der Praxis eine wichtige Rolle. Ihre Herleitung sowie die numerische Kopplung an die kinetischen Ausgangsgleichungen sind Fragen von großer Aktualität.

Diffusions- bzw. strömungsdynamische Gleichungen als Modelle kinetischer Gleichungen erlauben eine wesentlich einfachere analytische und numerische Behandlung physikalischer Phänomene als die viel komplexere kinetische Beschreibung. Diskutiert werden ihre Herleitungen beispielsweise zur Modellierung des dünnen Luftpolsters zwischen Magnetkopfgleiter und Speicherplatte eines modernen Speichermediums. In [1] wurde eine Variante von Donskers Invarianzprinzip und damit eine Diffusionsgleichung für ein Testteilchen in einer dünnen Streuschicht zwischen zwei diffus reflektierenden Platten hergeleitet. Wesentlich waren hierbei stochastische Einflüsse, insbesondere die Diffusions-Randbedingungen an den Platten. Offen blieb hierbei zum einen, wie Rauigkeiten der Plattenoberflächen in die Modellierung einbezogen werden können und zum anderen, ob ähnliches Verhalten auch bei völlig deterministischer (möglicherweise sogar reversibler) Dynamik möglich ist. In [2] wurde das Verhalten eines Testteilchens studiert, welches an den Platten gemäß einem periodischen deterministischen Reflexionsgesetz (ähnlich dem der elastischen Reflexion an einer periodischen rauhen Oberfläche) gestreut wird. Durch Anwendung klassischer Resultate über Automorphismen auf dem Torus konnte für Modelle mit kontinuierlichem Geschwindigkeitsbereich ein Diffusionslimit hergeleitet werden. Diskrete Geschwindigkeitsmodelle zeigen dagegen ein hiervon grundlegend abweichendes Verhalten.

Makroskopische Gleichungen können aus kinetischen Gleichungen durch Einführung einer Singularität in der Dichte des Streumediums hergeleitet werden. Im Zusammenhang mit der numerischen Kopplung von makroskopischen mit mesoskopischen Gleichungen ist es nun wichtig, das Verhalten von Lösungen kinetischer Gleichungen in der Nähe von räumlichen Singularitäten der Dichte zu studieren. Da numerische Verfahren für kinetische Gleichungen in der Regel auf stochastischen Teilchensystemen beruhen, ist es naheliegend, das Verhalten stochastischer Transportprozesse in der Nähe von Singularitäten zu untersuchen. In [3] konnte eine vollständige Charakterisierung wichtiger Größen der stochastischen Dynamik in Abhängigkeit von der Art der Singularität an den Rändern eines Intervalls gegeben werden. Diese erlaubt eine Klassifikation der zugehörigen Cauchy-Probleme in Anfangs- und Anfangs-Randwertprobleme und beantwortet damit erste Fragen bezüglich der Möglichkeit einer Kopplung von Bereichen, welche durch eine Singularität getrennt sind.

### Literatur

1. H. BABOVSKY, *Diffusion limits for flows in thin layers*, erscheint in: SIAM J. Appl. Math., 1996.
2. H. BABOVSKY, *Limit theorems for deterministic Knudsen flows between two plates*, WIAS-Preprint No. 147, Berlin, 1995.
3. H. BABOVSKY, G. N. MILSTEIN, *Transport equations with singularity*, WIAS-Preprint No. 200, Berlin, 1995.

## Identifikation von Streufeldern durch rückgestreute Teilchenströme

**Bearbeiter:** H. Babovsky

Inverse Probleme im Zusammenhang mit kinetischen Randwertproblemen spielen in einer Reihe von Anwendungsproblemen eine wichtige Rolle. Hierzu gehört beispielsweise die Untersuchung der Erdatmosphäre. Neuerdings werden solche Fragestellungen auch im Zusammenhang mit der optischen Tomographie diskutiert.

Wie der Übersichtsartikel [1] zeigt, wurden seit einer Reihe von Jahren eine Vielzahl von Arbeiten zu inversen kinetischen Problemen geschrieben. Dennoch sind vom mathematischen (wie auch vom praktischen) Standpunkt sehr viele grundlegende Fragen noch offen. In [2] wurde ein numerischer Algorithmus hergeleitet, welcher zumindest in eindimensionalen Modellproblemen bei Schichtdicken von wenigen mittleren freien Weglängen die Identifikation von Streuschichtprofilen erlaubt. Interessant an diesem Verfahren ist, daß hierbei das inverse Problem direkt (d. h. ohne Umweg über das häufige Lösen des direkten Problems mit Parameteranpassung) gelöst wird. Die Zukunft wird zeigen, ob sich hierauf ein effizienter, für die Praxis interessanter Algorithmus entwickeln läßt. Einige Aspekte bezüglich der Anwendbarkeit auf komplexere Fragestellungen sind in [3] andiskutiert.

### Literatur

1. N. J. MCCORMACK, *Inverse radiative transfer problems: A review*, Nucl. Sci. Eng. **112**, 185–198, 1992.
2. H. BABOVSKY, *An inverse model problem in kinetic theory*, Inverse Problems, **11**, 555–570, 1995.
3. H. BABOVSKY, *Inverse problems in kinetic theory*, eingereicht für Proceed. ICIAM '95, 1995.

## Monte-Carlo- und Quasi-Monte-Carlo-Simulation stochastischer Differentialgleichungen

**Bearbeiter:** N. Hofmann, P. Mathé

Bei der computergestützten Simulation stochastischer Differentialgleichungen werden die erforderlichen zufälligen Parameter ersetzt durch (auf dem Computer erzeugte) Pseudozufallszahlen. Die Probleme, die durch diese Ersetzung entstehen, sind für die Monte-Carlo-Integration gut untersucht, siehe [3]. Es stellt sich dabei heraus, daß für geeignete Klassen von Input durch geschickte Wahl von (quasizufälligen) Integrationsknoten (Folgen geringer Diskrepanz) die Fehlerabschätzungen gegenüber der in der Monte-Carlo-Theorie üblichen Varianzabschätzung verbessert werden können, siehe [4].

Im Projekt ist untersucht worden, ob sich derartige Ergebnisse auch bei der Simulation stochastischer Differentialgleichungen wiederfinden. Einfache numerische Experimente mit einigen der bekannten Folgen geringer Diskrepanz belegten, daß dies nicht der Fall zu sein braucht. Darüber hinaus konnte sogar gezeigt werden, daß dies nicht sein kann: Für Folgen reeller Zahlen ist es nicht möglich, gleichzeitig geringe Diskrepanz zu haben und für numerische Simulation von stochastischen Differentialgleichungen geeignet zu sein. Dieser unerwartete theoretische Sachverhalt bietet Stoff für weitergehende Untersuchungen.

Erwähnenswert ist in diesem Zusammenhang, daß vollständig gleichverteilte Folgen, siehe [2], die in anderem Zusammenhang untersucht wurden, gut zur Simulation geeignet sind. Auch Pseudo-Zufallszahlen, die standardmäßig auf den Rechnern verfügbar sind, erwiesen sich als zuverlässig. Eine theoretische Basis hierfür steht allerdings aus.

Die erzielten Ergebnisse sind präsentiert worden sowohl auf der ICIAM '95 als auch im Rahmen eines Plenarvortrages auf dem SIAM-AMS-Meeting '95 in Park City (Utah). Eine Darstellung findet sich im WIAS-Preprint [1].

### Literatur

1. N. HOFMANN AND P. MATHÉ, *On quasi-Monte Carlo simulation of stochastic differential equations*, WIAS-Preprint No. 166, Berlin, 1995.
2. D. KNUTH, *The Art of Computer Programming, Vol 2/Seminumerical Algorithms*, Addison-Wesley, Reading Mass., 1969.
3. L. KUIPERS AND H. NIEDERREITER, *Uniform Distribution of Sequences*, Wiley & Sons, New York, 1974.
4. H. NIEDERREITER, *Quasi-Monte Carlo methods and pseudo-random numbers*, Bull. AMS, 84, 957–1041, 1978.



## Rekonstruktion stochastischer Prozesse

**Bearbeiter:** P. Mathé

**Kooperation:** T. Müller-Gronbach, FU Berlin

Fragen der optimalen Rekonstruktion stochastischer Prozesse aus einer endlichen Anzahl von Beobachtungen derselben sind seit den grundlegenden Arbeiten von Sacks/Ylvisaker, 1966 ff, vgl. [3,4], vielfach studiert worden.

In (nahezu) allen Publikationen spielen Hilbertraum-Techniken (RKHS) eine zentrale Rolle. In der Arbeit [2] sind die wesentlichen Ergebnisse, die mit derartigen Techniken erreichbar sind, dokumentiert. In diesem Projekt sollte ein eher approximationstheoretischer Zugang Anwendung finden. Dies war in der Tat möglich; die vorliegenden Ergebnisse gestatten allerdings nicht, Resultate für größere als die bisher untersuchten Klassen von Prozessen zu finden. Aus der jetzigen Sicht wird jedoch deutlich, daß dies nicht zufällig so ist: Die große Klasse der Prozesse mit Kovarianzstruktur vom Produkttyp erweist sich (im Gaußschen Fall) gerade als Klasse der Prozesse mit Markoveigenschaft. Somit erscheint eine natürliche Grenze für traditionelle Ansätze sichtbar. Die Tatsache, daß in allen bekannten Fällen die Rekonstruktion in einem Zeitpunkt allein durch die benachbarten Designpunkte bestimmt wird, findet hier eine einfache Erklärung.

Die Ergebnisse der Untersuchungen sind auf dem SIAM-AMS-Meeting '95 in Park City (Utah) vorgetragen worden und werden in den Proceedings veröffentlicht.

## Literatur

1. P. MATHÉ, *Optimal reconstruction of stochastic evolutions*, Proc. SIAM-AMS Meeting, Park City, Lectures Applied Math, 1995.
2. T. MÜLLER-GRONBACH, *Optimal design for approximating a stochastic process with respect to a minimax criterion*, Preprint FB Math. FU Berlin, 1993.
3. J. SACKS AND D. YLVISAKER, *Designs for regression problems with correlated errors*, Ann. Math. Stat. (37), 66–89, 1966.
4. J. SACKS AND D. YLVISAKER, *Designs for regression problems with correlated errors; Many parameters*, Ann. Math. Stat., (39) 48–69, 1968.

## Effizienz stochastischer Verfahren der globalen Optimierung

**Bearbeiter:** P. Mathé

**Kooperation:** U. Voll, FU Berlin

Wenn es darum geht, komplexe Optimierungsprobleme zu behandeln, die mit den herkömmlichen Verfahren (lineare, konvexe ...) nicht angegangen werden können, dann gibt es verschiedene Möglichkeiten, durch Einführen zufälliger Parameter akzeptable Näherungslösungen zu erhalten. Einer der vielversprechendsten Ansätze verbirgt sich hinter dem Konzept des *Simulated Annealing*, siehe [1]. Für viele Anwendungsbereiche (insb. hochparametrische Traveling-Salesman-Probleme) hat sich diese Klasse von stochastischen Optimierungsverfahren bewährt.

Mathematische Resultate, die das Phänomen Simulated Annealing annähernd erklären können, sind rar. Die einfache Frage, wie eine zu minimierende Funktion beschaffen sein muß, damit das Verfahren effektiv eine Näherungslösung findet, ist weitgehend ungeklärt. Derartige grundlegende mathematische Fragestellungen sind Gegenstand des Projekts.

Der approximationstheoretische Apparat (vgl. [3]) zur Untersuchung der Effizienz stochastischer numerischer Verfahren kann hier eingesetzt werden, um vertiefte Kenntnisse über die Wirksamkeit derartiger stochastischer Suchverfahren zu gewinnen.

Bei der Anwendung des Simulated Annealing gilt es, zwei Parameter geeignet zu steuern:

- die Geschwindigkeit der Abkühlung
- die Relaxationzeit der Metropolissschritte.

Die letzte Frage ist im Rahmen eines Teilprojekts mit Herrn U. Voll bearbeitet worden. Aufbauend auf [2] konnten grundlegende Zusammenhänge zwischen gruppentheoretischen Eigenschaften des Grundbereichs und der Konvergenzgeschwindigkeit darauf agierender (schnellmischender) Markovketten erarbeitet werden.

Wegen seiner großen Bedeutung für praktische Anwendungen ist dieses Projekt langfristig angelegt.

### Literatur

1. E. H. L. AARTS AND P. J. M. LAARHOVEN, *Simulated Annealing: Theory and Applications*, Reidel, Dordrecht, 1987.
2. P. DIACONIS, *Group Representations in Probability and Statistics*, IMS-Lecture Notes, **11**, 1988.
3. P. MATHÉ, *Approximation Theory of Stochastic Numerical Methods*, Habilitationsschrift, FU Berlin, 1994.

## Numerische Lösung von stochastischen Differentialgleichungen in berandeten Gebieten

**Bearbeiter:** G. N. Milstein

**Kooperation:** M. V. Tret'yakov, Universität Ekaterinburg

Aufgaben der numerischen Lösung von Systemen stochastischer Differentialgleichungen (SDG) entstehen im Zusammenhang mit stochastischen Verfahren für Randwertaufgaben bei partiellen Differentialgleichungen. In der Arbeit [1] werden Fragen der starken Approximation von Lösungen von SDG in beschränkten Gebieten behandelt. In [2-4] werden Randwertaufgaben für parabolische Differentialgleichungen gelöst. Bei diesen Methoden wird wesentlich der wahrscheinlichkeitstheoretische Apparat der SDG eingesetzt. Für deren numerische Lösung werden spezielle Methoden der schwachen Approximation entwickelt, die im Hinblick auf die Behandlung partieller Differentialgleichungen durch Monte-Carlo-Methoden ausreichend sind. Die in den Arbeiten [2-4] entwickelten Algorithmen basieren auf der Konstruktion geeigneter Markovketten. Untersucht werden Fragen der Konvergenz, der Approximationsgüte und der numerischen Komplexität dieser Verfahren.

Analoge Probleme werden für elliptische Randwertaufgaben betrachtet, bei deren Lösung neue Schwierigkeiten entstehen. Von besonderem Interesse sind solche Probleme mit kleinem Parameter. Im vorliegenden Fall ist es natürlich, spezielle Methoden der numerischen Integration für Systeme mit geringem Rauschen zu verwenden, vgl. [5,6].

Die Arbeit [7] beinhaltet die Untersuchung der Orbitalstabilität unter zufälligen Störungen.

### Literatur

1. G. N. MILSTEIN, *The simulation of phase trajectories of a diffusion process in a bounded domain*, erscheint in: Stochastics and Stochastics Reports.
2. G. N. MILSTEIN, *The solving of boundary value problems by numerical integration of stochastic equations*, Mathematics and Computers in Simulation, **38**, 77-85, 1995.
3. G. N. MILSTEIN, *The solution of the first boundary value problem for parabolic equations by integration of stochastic equations*, Theor. Prob. Appl., **40**, (3), 657-665, 1995.
4. G. N. MILSTEIN, *Application of numerical integration of stochastic equations for the solution of boundary value problems with Neumann Boundary Condition*, erscheint in: Theor. Prob. Appl.
5. G. N. MILSTEIN AND M. V. TRET'YAKOV, *Mean-square numerical methods for stochastic differential equations with small noises*, eingereicht bei: SIAM J. on Scientific Computing, 1995.
6. G. N. MILSTEIN AND M. V. TRET'YAKOV, *Numerical methods in weak sense for stochastic differential equations with small noise*, eingereicht bei: SIAM J. on Numerical Analysis, 1995.
7. G. N. MILSTEIN AND L. B. RYASHKO, *A first approximation of the quasipotential in problems of the stability of systems with random non-degenerate perturbations*, J. Appl. Maths. Mech., **59**, (1), 47-56, 1995.

## ClusCorr - Statistiksoftware unter Microsoft EXCEL

**Bearbeiter:** H.-J. Mucha, R. Siegmund-Schultze

Auf dem Gebiet der computerorientierten Statistik ist die erste Version der Windows-Software *ClusCorr* zur Clusteranalyse, Klassifikation und multivariaten grafischen Darstellung umfangreicher und hochdimensionaler Datenmengen entwickelt und erstmals in Hannover auf der CeBIT 95 präsentiert worden. *ClusCorr* unter Microsoft EXCEL zielt auf einen breiten Anwenderkreis, der theoretisch und praktisch in Lehre, Ausbildung, Forschung und Wirtschaft mit statistischer Datenanalyse befaßt ist. Den Schwerpunkt der Software bilden Clusteranalysemethoden, die auf adaptiven Distanzen beruhen. In hochdimensionalen Merkmalsräumen können oft erst durch Benutzung adaptiver Distanzen Strukturen (Klassen, Hierarchien) erkannt und mit multivariaten Projektionsmethoden visualisiert werden. Mit *ClusCorr* können die Ergebnisse auch validiert werden.

Abb.1 zeigt ein sog. Plot-Dendrogramm. Hierbei wird das Ergebnis hierarchischer Clusteranalysen, das Dendrogramm, in perspektivischer, rotierbarer Darstellung auf eine Ebene aufgesetzt, die z. B. von zwei Faktoren (berechnet durch Projektionsmethoden wie Hauptkomponenten-, Diskriminanz- oder Korrespondenzanalyse), Variablen oder geographischen Koordinaten aufgespannt wird. Die der Abb.1 zugrundeliegenden Daten (Beschreibungen von 13938 Faustkeilen verschiedener Fundorte) stammen aus archäologischen Forschungen zu Migrationsbewegungen.

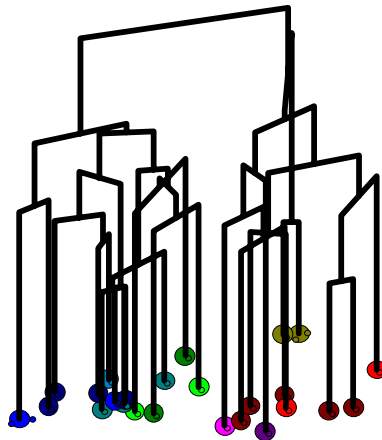


Abb. 1: Plot-Dendrogramm von Faustkeilfundorten

## Literatur

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

## Kredit Scoring

**Bearbeiter:** H.-J. Mucha, R. Siegmund-Schultze

**Kooperation:** K. Dübon, Forschungszentrum Daimler-Benz, Ulm

Kreditgeber (Banken, Kaufhäuser, etc.) sind bei der Vergabe von Krediten daran interessiert, daß sowohl die Rückzahlung der Kreditsumme als auch die Begleichung von Bearbeitungsgebühren und entstehenden Zinsen ordnungsgemäß abgewickelt wird. Für die Kredit(karten)geber ist es daher wichtig, die zukünftige Bonität eines potentiellen Kreditnehmers abzuschätzen. Die computerorientierte Statistik wird stark gefordert: Es sind sehr umfangreiche Datenmengen, bestehend aus numerischen und alphanumerischen Informationen, zeitlich effektiv in kompaktes und statistisch optimales „Bonitätswissen“ zu überführen. Das Bonitätswissen muß zudem „vor Ort“ von mathematischen Laien leicht handhabbar und intuitiv verständlich sein und vom zuständigen Management des Kreditgebers mitgetragen und akzeptiert werden. Spezielle adaptive Distanzmaße erweisen sich als optimal im Sinne der Trennbarkeit „guter“ und „schlechter“ Kreditnehmer. Sie werden auch benutzt, um hochdimensionale alphanumerische und numerische Daten graphisch darzustellen. Im Vergleich mit anderen statistischen Verfahren (Fahrmeir und Hamerle (1984)) können wir auf die geringsten Fehlerraten verweisen. Die zugehörige Software *XCredit* läuft unter Microsoft EXCEL. Abb.1 zeigt Fehlerkurven für Trainings- und Testdaten (16795 bzw. 14745 Kunden von Mobiltelefonkarten). Jeder Kunde wird durch Informationen beschrieben, die in einer Datensatzzeile stehen:

```
k1,kB,kFF,k2,k1,k1,k2,k0,k0,k0,kD,k1,k2,k4,k8,k7,k1
k0,kS,kME,k0,k1,k1,k3,k0,k0,k0,kD,k0,k4,k1,k0,k7,k0
...
```

Uns ist nur die letzte Angabe je Zeile vom Inhalt her bekannt: die Klassenzuordnung. Die Fehlerraten für die Testdaten betragen 4.62 % (C4.5-Algorithmus nach Quinlan), 5.03 % (logistische Regression), 5.67 % (lineare Diskriminanzanalyse) und 4.47 % (*XCredit*).

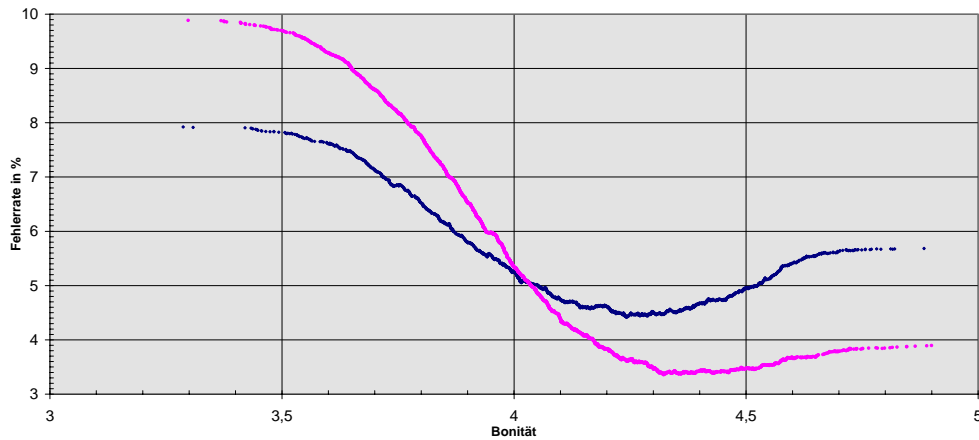


Abb. 1: Fehlerraten Kredit Scoring: Trainingssample (große Amplitude) und Testsample

## Literatur

1. L. FAHRMEIR, A. HAMERLE, *Multivariate statistische Verfahren*, DeGruyter, Berlin, 1984.
2. H.-J. MUCHA, R. SIEGMUND-SCHULTZE AND K. DÜBON, *Adaptive cluster analysis techniques - software and applications*, erscheint in: *Classification and Data Analysis*, Yajima, K. and Tanaka, Y. (Eds.), Springer-Verlag, Heidelberg.

## **Adaptive Clusteranalyse**

**Bearbeiter:** H.-J. Mucha

**Kooperation:** W. Härdle, Institut für Statistik und Ökonometrie, Humboldt-Universität

**Förderung:** SFB 373 „Quantifikation und Simulation ökonomischer Prozesse“

Die adaptiven Clusteranalysemethoden der interaktiven Statistiksprache *XploRe* wurden auch unter UNIX verfügbar gemacht. In Vorträgen sowie in einer Publikation (Springer-Verlag) wurden die Distanzmaße und Clusteranalyseverfahren, die in der sogenannten „XClust - Library“ zusammengefaßt sind, vorgestellt, und in Anwendungen wurden Praxisrelevanz und Einsatzfähigkeit nachgewiesen. Die Bearbeitung ökonomischer Fragestellungen, wie z. B. Leistungsvergleiche von Unternehmen, belegt den praxisorientierten interdisziplinären Charakter dieses Projektes.

## **Literatur**

1. H.-J. MUCHA, *XClust: Clustering in an Interactive Way*, in: *XploRe: an Interactive Statistical Computing Environment*, W. Härdle, S. Klinke and B. A. Turlach (Eds.), 141–168, Series Statistics and Computing, Springer-Verlag, New York, 1995.

## Nichtlineare Waveletmethoden zur Schätzung bei lokal stationären Zeitreihen

**Bearbeiter:** M. Neumann

**Kooperation:** R. Dahlhaus, Universität Heidelberg, R. von Sachs, Universität Kaiserslautern

**Förderung:** SFB 373 „Quantifikation und Simulation ökonomischer Prozesse“

Mit Wavelet-Methoden können Phänomene erfaßt und bearbeitet werden, die abrupte Oszillationen und Sprünge aufweisen. Speziell erlauben diese Methoden im Gegensatz zu herkömmlichen Glättungsverfahren (z. B. Kernschätzer) eine lokale Anpassung der Stärke der Glättung an die jeweils lokal vorhandene Glattheit. Der Vorteil solcher Methoden wird offensichtlich, wenn die zu schätzende Funktion räumlich inhomogene Glattheitsmerkmale aufweist. Die Annahme einer solchen inhomogenen Glattheit erscheint auch für eine Reihe von Kurvenschätzproblemen in der Zeitreihenanalyse gerechtfertigt. Ausgehend vom lokalen Frequenzprofil einer Zeitreihenbeobachtung können Glättungsmethoden wesentlich effizienter als bisher zeitabhängig (lokal adaptiv) gestaltet werden. Derzeit richtet sich ein beträchtliches Interesse auf die Analyse nichtstationärer Zeitreihen. Ein geeigneter Rahmen für eine strenge asymptotische Theorie ist durch das Modell der lokalen Stationarität (Dahlhaus (1993)) gegeben. Im Berichtszeitraum wurde ein gemeinsames Projekt mit R. von Sachs (Kaiserslautern) zur Schätzung des evolutionären Spektrums mittels nichtlinearer Waveletmethoden abgeschlossen. Diese Arbeit wurde auf der Tagung „Smoothing and Resampling in Economics“ in Berlin vorgestellt. Weiterhin entstand in Zusammenarbeit mit Prof. R. Dahlhaus und R. von Sachs eine Arbeit zur Schätzung der Parameterfunktionen in einem nichtstationären autoregressiven Modell.

## Literatur

1. R. DAHLHAUS, *Fitting time series models to nonstationary processes*, Beiträge zur Statistik 4, Universität Heidelberg, 1993.
2. M. H. NEUMANN AND R. V. SACHS, *Wavelet thresholding in anisotropic function classes and application to adaptive estimation of evolutionary spectra*, Discussion Paper 24/95, SFB 373, Humboldt-Universität, Berlin, eingereicht bei: Ann. Statist., 1995.
3. M. H. NEUMANN AND R. V. SACHS, *Wavelet thresholding: Beyond the Gaussian i.i.d. situation*, in: Lecture Notes in Statistics: Wavelets and Statistics, A. Antoniadis, Ed., 301–329, 1995.
4. R. DAHLHAUS, M. H. NEUMANN AND R. V. SACHS, *Nonlinear wavelet estimation of time-varying autoregressive processes*, WIAS-Preprint No. 159 (1995), eingereicht bei: Bernoulli, 1995.



## Optimale nichtparametrische Verfahren bei statistischen inversen Problemen

**Bearbeiter:** M. Neumann

Eine wichtige Klasse von statistischen Problemen ist dadurch gekennzeichnet, daß man nur indirekte Informationen über das zu schätzende Objekt zur Verfügung hat. Häufig sind solche Probleme schlecht gestellt, was geeignete Regularisierungsverfahren erfordert. Beispiele für schlecht gestellte statistische inverse Probleme sind Dekonvolution, Regression mit Fehlern in den Variablen, Probleme aus der Bildverarbeitung sowie Dichteschätzung in der Computertomographie.

Im Berichtszeitraum wurden Methoden zur Lösung spezieller Problemstellungen aus diesem Bereich entwickelt. Auch im Rahmen der statistischen inversen Probleme kommt es häufig vor, daß die zu rekonstruierende Funktion Sprünge aufweist, z. B. in der Bildverarbeitung oder Computertomographie. Bei einigen Problemstellungen (z. B. der Schätzung von Grenzbereichen) ist man direkt an der Lage solcher Unstetigkeiten interessiert; häufig ist die Inferenz darüber ein erster Schritt bei der Schätzung einer Funktion selbst. Im einfachsten, für die obige Problemklasse jedoch repräsentativen Modell wurde ein Verfahren zur Schätzung solcher Sprungstellen entwickelt und seine asymptotische Optimalität gezeigt.

In der Literatur zu Dekonvolutionsproblemen wird fast ausschließlich vorausgesetzt, daß die Fehlerdichte exakt bekannt ist. Dies ist in praktischen Anwendungen oft unrealistisch. Man kann jedoch auf ein realistisches und gleichzeitig konsistentes Verfahren hoffen, wenn man diese Fehlerdichte aus zusätzlichen Informationen schätzen kann. Der Verlust für die Schätzung der interessierenden Dichte selbst, welchen man durch die unexakte Kenntnis der Fehlerdichte zwangsläufig erleidet, wurde in einer weiteren Arbeit untersucht. Es wurde ein entsprechend modifiziertes Regularisierungsverfahren vorgeschlagen sowie dessen Optimalität gezeigt.

### Literatur

1. M. H. NEUMANN, *Optimal change-point estimation in inverse problems*, WIAS-Preprint No. 163 (1995), Berlin, eingereicht bei: Scandinavian Journal of Statistics, 1995.
2. M. H. NEUMANN, *On the effect of estimating the error density in nonparametric deconvolution*, WIAS-Preprint No. 205 (1995), Berlin, eingereicht bei: Journal of Nonparametric Statistics, 1995.

## Asymptotische Theorie statistischer Experimente

**Bearbeiter:** M. Nussbaum

**Kooperation:** I. Grama (Kishinev, Moldawien), A. Gushchin (Moskau), P. Hall (Canberra), A. Korostelev (Detroit), M. Low (Philadelphia), S. van de Geer (Leiden)

**Förderung:** DAAD, DFG, HCM-Netzwerk „Statistics of Stochastic Processes“

Die grundlegende Aufgabe in diesem Gebiet ist die Approximation allgemeiner statistischer Modelle durch einfachere; es entsteht dabei eine Theorie, die sich abstrakter Konzepte bedient und die (in der Tragweite für die Statistik) etwa der Funktionalanalysis vergleichbar ist. Der Schwerpunkt der Untersuchungen liegt bei den nichtparametrischen, d. h. unendlichdimensionalen Problemen; eingeschlossen sind stochastische inverse Probleme der Tomographie und Bildverarbeitung, Zusammenhänge zur entsprechenden deterministischen Theorie sowie die Statistik stochastischer Differentialgleichungen. Ein zentrales Thema in diesem Zusammenhang war die asymptotische Äquivalenz nichtparametrischer Experimente zu Gaußschen Folgen, im Sinne des Le Cam'schen Defizienzabstandes. Die Arbeiten zur globalen Approximation für Modelle aus unabhängigen, identisch verteilten Zufallsvariablen konnten abgeschlossen werden (s. [7]), im grundlegenden Fall glatter, nach unten beschränkter Dichten auf dem Einheitsintervall. Daran anschließend wurden nichtgaußsche Regressionsmodelle untersucht [2]; der Nachweis der asymptotischen Äquivalenz zu Gaußschen Experimenten gelang durch Einsatz einer entsprechenden funktionalen KMT-Ungleichung für den Partialsummenprozeß nicht identisch verteilter Zufallsvariablen [1]. In Analogie zu Gaußschen Approximationen sind auch Poissonsche begleitende Folgen nichtparametrischer Experimente von Interesse; hier konnte ein entsprechendes Resultat von Le Cam für Produktexperimente wesentlich erweitert werden (für Glattheitsgrade der Dichte unter  $1/2$ , s. [4]). Vorbereitende Arbeiten für die Behandlung allgemeinerer Semimartingal-Modelle wurden im parametrischen Rahmen der Verzweigungsprozesse durchgeführt, vgl. [3]. Das Studium nichtparametrischer Experimente ist motiviert durch Glättungsaufgaben bei stochastischen inversen und schlecht gestellten Problemen. Die Untersuchungen über optimale Konvergenzgeschwindigkeiten für Schätzungen von Konturen der Trägergebiete von Wahrscheinlichkeitsdichten [5] stellten gleichzeitig eine Verbindung zu den Fragen nach Grenzexperimenten in der Extremwerttheorie her. Eine Anwendung der asymptotischen Äquivalenztheorie auf das Problem der exakten Risikoasymptotik bei der Dichteschätzung wurde in [6] gegeben.

## Literatur

1. I. GRAMA, M. NUSSBAUM, *A functional KMT approximation for partial sums of independent variables*, in Vorbereitung.
2. I. GRAMA, M. NUSSBAUM, *Asymptotic equivalence of regression experiments*, in Vorbereitung.
3. A. GUSHCHIN, *On efficiency bounds for estimating the offspring mean in a branching process*, WIAS-Preprint No. 175, Berlin, 1995.

4. M. LOW, M. NUSSBAUM, S. VAN DE GEER, *Poissonization of product experiments*, in Vorbereitung.
5. P. HALL, M. NUSSBAUM, S. STERN, *On the estimation of a support curve of indeterminate sharpness*, Technical report, Australian National University, Canberra, 1995.
6. A. KOROSTELEV, M. NUSSBAUM, *Density estimation in the uniform norm and white noise approximation*, WIAS-Preprint No. 154, Berlin, 1995.
7. M. NUSSBAUM, *Asymptotic equivalence of density estimation and Gaussian white noise*, WIAS-Preprint No. 174, Berlin, 1995, erscheint in: Ann. Statist., 1996.

## Stabilität und Konvergenz in der Numerik stochastischer Differentialgleichungen

**Bearbeiter:** H. Schurz, K. R. Schneider (FG 2)

**Kooperation:** P. E. Kloeden (Deakin University, Geelong), W. P. Petersen (ETH, Zürich), Y. Saito (Shotoku College, Gifu-Shi)

Die numerische Lösung stochastischer gewöhnlicher Differentialgleichungen (SODEs) und deren qualitatives Verhalten steht im Mittelpunkt dieses Projekts. Es sind zahlreiche stochastisch-numerische Verfahren bekannt, siehe z. B. [1] - [4]. Der Schlüssel zur effektiven Konstruktion und Analyse stochastisch-numerischer Verfahren liegt im Verständnis des Wechselspiels zwischen Stabilität, Konsistenz, Konvergenz und Komplexität der damit verbundenen Algorithmen, wie in der deterministischen Numerik (vgl. [1]).

In [5] und [8] wurden Stabilitätsuntersuchungen an bilinearen, mehrdimensionalen Testgleichungen mit multiplikativem Rauschen durchgeführt. Dabei wurde im wesentlichen auf die Theorie und Eigenschaften positiver Operatoren zurückgegriffen. Es wurden u. a. das Quadratmittelstabilitätsverhalten der impliziten Milstein-Methoden und der impliziten Balance-Methoden bezüglich der Nulllösung analysiert. Dabei erwies sich die Stabilität der impliziten Euler-Methoden als eine notwendige Bedingung für die Stabilität der impliziten Milstein-Methoden. Des weiteren konnte eine hinreichende Bedingung für die Quadratmittelstabilität der impliziten Euler-Methoden gefunden werden. Außerdem ist die Korrektur mit stochastischen Termen in den Balance-Methoden für deren Quadratmittelstabilität nicht notwendig. Alle bisher genannten numerischen Methoden folgen dem Prinzip der monotonen Inklusion der Quadratmittel-Stabilitätsbereiche. Zur Quadratmittelstabilitätsindikation (adäquates Stabilitätsverhalten) eignen sich nur implizite Trapez- und Mittelpunktsregeln! Die beschriebenen Resultate reduzieren erheblich den Aufwand bei der Konstruktion „stochastisch-stabiler“ numerischer Verfahren. Eine ähnliche Analyse konnte für die Klasse von linearen SODEs mit additivem Rauschen durchgeführt werden, s. [9].

Ein weiteres Problem stellt sich mit der Regularisierung numerischer Lösungen. Die am meisten benutzten Verfahren wie die der Euler- und Milstein-Methoden verlassen beschränkte Teilgebiete (Unterräume), im Gegensatz zu einigen zugrundeliegenden zeitstetigen dynamischen Systemen. In einigen Fällen kann dieses Problem ohne Raumdiskretisierung gelöst werden. Dazu eignet sich die Klasse der impliziten Balance-Methoden (BIMs), siehe [7]. Der Zusammenhang zwischen „wachsender Impliztheit“ und der Forderung von algebraischen Nebenbedingungen spielt eine wesentliche Rolle bei der Konstruktion adäquater numerischer Lösungen. In der Stochastik wurde dieser Zusammenhang erstmalig in [7] offengelegt und bildet somit einen Ausgangspunkt für die numerische Analyse stochastischer differential-algebraischer Gleichungen (SDAEs) sowie zweiseitiger Randwertprobleme. Zur Konstruktion von effizienteren Verfahren zur Lösung höherdimensionaler Probleme eignen sich linear-implizite Methoden (stochastische Rosenbrook-Methoden als Verallgemeinerung deterministischer linear-impliziter Methoden, siehe [1], [8]). Wir beweisen schwache Konvergenz und Konvergenz im quadratischen Mittel der entsprechenden numerischen Lösungen gegen die exakte Lösung unter den allgemein üblichen Lipschitz- und Beschränktheitsbedingungen. Die Überlegenheit dieser Methoden zeigt sich in der relativ einfachen Implementierung, in der Effizienz und in der Möglichkeit, damit Quadratmittel-A-stabile numerische Lösungen zu erzielen. Zur pfadweisen Kontrolle muß man aber stochastische Impliztheit berücksichtigen, z. B. durch BIMs.

**Literatur**

1. P. DEUFLHARD, F. BORNEMANN, *Numerische Mathematik II: Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen*, Walter de Gruyter, Berlin, 1994.
2. P. E. KLOEDEN, E. PLATEN, H. SCHURZ, *Numerical solution of stochastic differential equations through computer experiments*, Universitext, Springer, Berlin, 1994.
3. G. N. MILSTEIN, *Numerical integration of stochastic differential equations*, Kluwer Academic Publisher, Dordrecht, 1995.
4. W. WAGNER, *Stochastische numerische Verfahren zur Berechnung von Funktionalintegralen*, Habilitationsschrift, Report R-MATH-02/89, IMATH, Berlin, 1989.
5. H. SCHURZ, *Asymptotical mean square stability of an equilibrium point of some linear numerical solutions with multiplicative noise*, Stoch. Anal. Appl. 14 (3), 1996.
6. H. SCHURZ, *A note on pathwise approximation of stationary Ornstein-Uhlenbeck processes with diagonalizable drift*, WIAS-Preprint No. 112, Berlin, 1994.
7. H. SCHURZ, *Numerical regularization for SDEs: Construction of nonnegative solutions*, WIAS-Preprint No. 160, Berlin, 1995, erscheint in: J. Dyn. Sys. Appl.
8. H. SCHURZ, *Lecture Notes on Numerical Analysis of Stochastic Differential Equations*, Humboldt-Universität, Technische Universität, Berlin, 1994–1996.

## Stochastische Analysis in Hydrologie, Mechanik und Nachrichtentechnik

**Bearbeiter:** H. Schurz

**Kooperation:** Karmeshu (Jawaharlal Nehru University, New Delhi), G. I. Schueller (TU, Innsbruck), L. Möller (ETH, Zürich), H. C. Öttinger (ETH, Zürich), C. Bucher (FH, Weimar), G. Denk (TU, München), F. M. Reich (BMW, München)

Im Mittelpunkt dieses Projekts stehen Fragen der Anwendung stochastischer Modellierung, Analysis und Simulation in ausgewählten Gebieten aus Technik- und Ingenieurwissenschaften, wie z. B. Hydrologie, Seismologie, Kommunikationstechnik und in der Polymerenphysik.

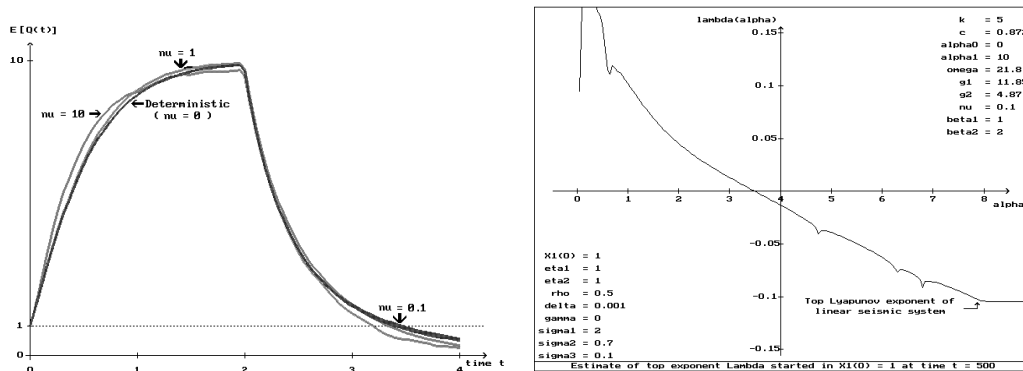


Abb. 1 - 2: Mittlere Abflußrate — Größter Lyapunov Exponent

Erste konkrete Ergebnisse liegen in der Hydrologie und Seismologie bereits vor, wie z. B. Untersuchungen zur stochastischen Modellierung und Schätzung der zeitlichen Momentenentwicklungen von nichtlinearen Abflußraten in Wasserreservoirs [3]. Eine Schätzung des ersten Moments des Abflusses von einem nichtlinearen Reservoir bei exponentiell abklingender Regenfallintensität ist im ersten Bild zu sehen. Stationäre Lösungen der auftretenden Fokker-Planck-Kolmogorov-Gleichung der nichtlinearen Abflußrate konnten exakt berechnet werden. In der Seismologie (siehe [1],[2]) gelang es uns, nichtkonstante Delayterme in höherdimensionalen stochastischen Integrodifferentialsystemen sowohl theoretisch als auch numerisch zu behandeln. Die auftretenden seismischen Störungen und Rauschquellen führen zu einer signifikanten Amplifikation und zu einer Phasenverschiebung der stochastischen Oszillationen (Destabilisierung). Des weiteren untersuchten wir die Stabilität der zugehörigen Momentenentwicklungen. Notwendige und hinreichende Bedingungen für die Stabilität der ersten beiden Momente der linearisierten Dynamik sind in [1] angegeben. Durch die Natur seismischer Störungen ist es naheliegend, auch das pfadweise Stabilitätsverhalten der zu modellierenden Baukonstruktion zu erforschen. Die mathematische Grundlage dazu bildet die Theorie und Schätzung von Lyapunov-Exponenten. Untersucht wurden u. a. die Abhängigkeit dieser Exponenten von der Kontrollgeschwindigkeit, die im mechanischen System zum Aufbau der Kontrollkräfte für dessen Stabilisierung notwendig ist, vgl. Abb. 2. Außerdem wurden Wahrscheinlichkeiten der kritischen Niveauüberschreitung numerisch geschätzt (Abb. 3) sowie Phasendiagramme des nichtlinearen Systems visualisiert (Abb. 4).

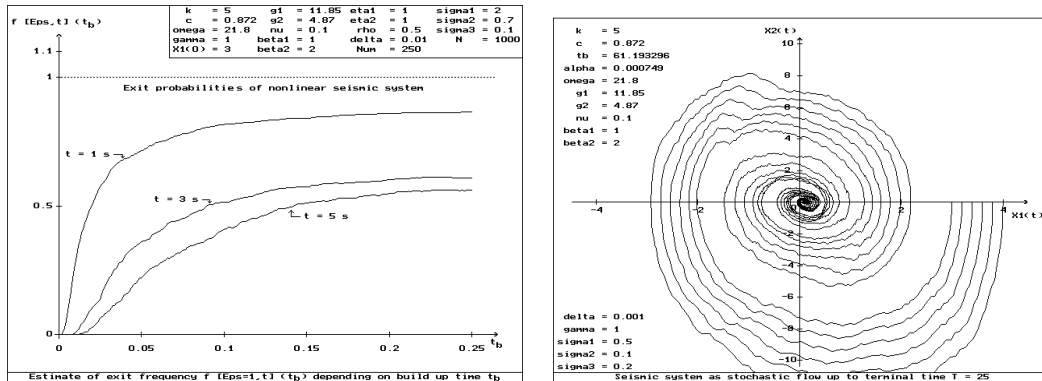


Abb. 3 - 4: Kritische Austritts-Wahrscheinlichkeiten — Phasenporträt eines kubischen Oszillators

Im Rahmen dieses Projektes fand eine Sichtung weiterer potentieller Anwendungsmöglichkeiten der stochastischen Analysis und Numerik statt.

## Literatur

1. KARMESHU, H. SCHURZ, *Effects of distributed delays on the stability of structures under seismic excitation and multiplicative noise*, SADHANA 20 (82–84), 451-474, 1995.
2. KARMESHU, H. SCHURZ, *Stochastic stability of structures under active control with distributed time delays*, in: M. Lemaire, J. L. Favre, A. Mebarki (Eds.) *Applications of Statistics and Probability*, A.A. Balkema Publishers, Rotterdam, 1111-1119, 1995.
3. KARMESHU, H. SCHURZ, *Moment evolution of the outflow-rate from nonlinear conceptual reservoirs*, IAAS-Preprint No. 84, Berlin, 1994.

## Angewandte stochastische Analysis in Finanzwesen, Marketing und Sozialwissenschaften

**Bearbeiter:** H. Schurz

**Kooperation:** Karmeshu (Jawaharlal Nehru University, New Delhi), F. Delbaen (ETH, Zürich), U. Küchler (Humboldt-Universität, Berlin)

**Förderung:** SFB 373 „Quantifikation und Simulation ökonomischer Prozesse“

Bei der Modellierung und Simulation von Finanzinstrumenten (Derivate, Optionen) spielt mehr und mehr das dynamische Verhalten von stochastischen Zinsraten und Zinsstrukturkurven eine entscheidende Rolle. Die Entwicklung und Erforschung von Zinsraten- und Preismodellen erfordert adäquate analytische und numerische Techniken und Simulationsstudien dieser Prozesse. Wir verbinden den Erkenntnisstand über die moderne Theorie zum qualitativen Verhalten stochastischer dynamischer Systeme mit der Leistungsfähigkeit stochastisch-numerischer Verfahren. Als Modellklasse untersuchen wir die in [4] vorgeschlagenen verallgemeinerten stochastischen Differentialgleichungen

$$dX_t = a_0(t)(b_0(t) - X_t)dt + \sum_{j=1}^m \sigma_j(t)(X_t)_+^{\alpha_j} (b_j(t) - X_t)_+^{\beta_j} *_{\nu} dW_t^j \quad (1)$$

zur Modellierung nichtnegativer Zinsraten  $X_t$  mit deterministischen nichtnegativen Parametern  $\alpha_j, \beta_j$  und fixem stochastischen Kalkülparameter  $\nu \in [0, 1]$  (0 entspricht dem Itô-Kalkül). Fast alle zeitstetigen Markovschen Zinsratenmodelle sind darin enthalten, z. B. die Modelle von Vasiček, Cox-Ingersoll-Ross, Dothan, Courtadon und Chan. Erste Resultate hinsichtlich strenger Existenz, Eindeutigkeit und fast sicherer Beschränktheit der Lösung konnten erzielt werden, siehe [4]. Dazu benutzten wir die Technik stochastischer Lyapunov-Funktionen und die Dynkins Formel. Adäquate numerische Lösungen dafür sind derzeit nur durch geeignete implizite Balance-Methoden (BIMs) konstruierbar. Es gelang,  $L^2$ -Konvergenz und fast sichere numerische Beschränktheit ohne Zuhilfenahme von Projektionsmethoden zu verifizieren. Umfangreiche Simulationsstudien, die in [2], [3] und [5] für den Besselprozeß begonnen wurden, bestätigen diese Aussage. Das obige Modell zeigt eine große Vielfalt von qualitativen Eigenschaften (z. B. Markov pseudo switching), die eine enorme Anpassungsfähigkeit an reale Datensätze garantieren. Zum Beispiel gibt es eine einfache Teilklasse, die Nichtnegativität, zweiseitige Beschränktheit und zwei zeitweilig anziehende Levels besitzt. Ein qualitativ ähnliches Verhalten tritt im stochastischen Marketing auf. Das BASS Modell beschreibt, wie sich ein Produkt, eine neue Technologie, Idee, Neuigkeiten, Gerüchte im zu beobachtenden Medium (Markt) ausbreiten. Erstmals wurde in [1] ein entsprechendes stochastisches Modell zur Modellierung der Diffusion von Innovationen vorgestellt und simuliert. Es ist eine Verallgemeinerung des deterministischen BASS Modells unter Berücksichtigung von Parameterschwankungen und einer gewissen Ungewißheit im Markt/Medium. So wird angenommen, daß sich die Anzahl der Adoptionen  $N_t$  durch die Itô Differentialgleichung

$$dN_t = (p(t) + \frac{q(t)}{M}N_t)(M - N_t)dt + \sigma(t)(N_t)_+^{\alpha} (M - N_t)_+^{\beta} dB_t \quad (2)$$

mit  $p > 0$  als Koeffizient der Innovation,  $q > 0$  als Koeffizient der Imitation und  $M \gg 1$  als maximale Anzahl möglicher Adoptionen beschreiben läßt. In Analogie zu den obigen Problemen



im Finanzwesen werden die analytische und numerische Lösung untersucht. Die mathematische Rechtfertigung findet sich in [6], Simulationsergebnisse dazu in [1] und [6]. Hauptergebnis ist die Erkenntnis, daß Ungewißheit in parametrischer oder in modellierender Form zu erheblichen Unterschieden im qualitativen Verhalten gegenüber dem deterministischen Modell führt. Zum Beispiel kann der „point of inflection“, der Punkt der höchsten Marktnachfrage, unter zufälligen Einflüssen deutlich früher erreicht werden. Dies dürfte eine wesentliche Information für die Praxis des Marketing sein. Aufgrund der Nichtlinearität des Modells sind weitere interessante Studien (wie Niveauüberschreitungen oder Persistenz) zu erwarten.

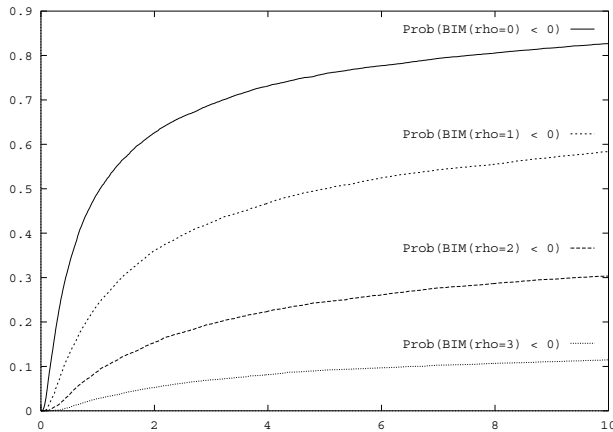


Abb. 1: Effekt der „wachsenden Impliztheit“ auf die Wahrscheinlichkeit negativer numerischer Zinsratenentwicklungen für den Itô Besselprozeß

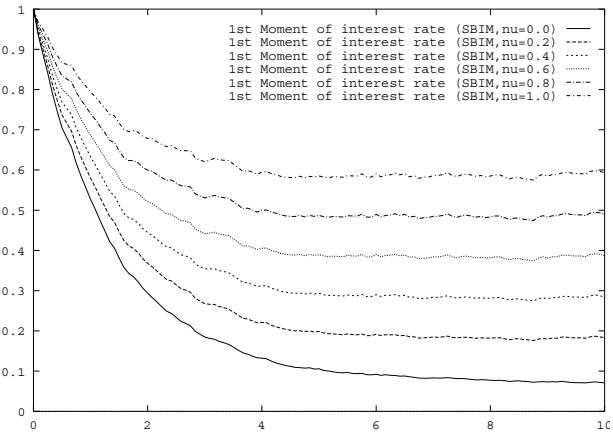


Abb. 2: Effekt des „wachsenden stochastischen Kalkulusparameters“  $\nu \in [0, 1]$  auf die mittlere Zinsratenentwicklung im erweiterten Cox-Ingersoll-Ross Modell

## Literatur

1. KARMESHU, V. B. LAL, H. SCHURZ, *Simulation of stochastic innovation diffusion*, Manuskript, WIAS, Berlin, 1995.
2. U. KÜCHLER, N. HOFMANN, H. SCHURZ, *Simulation of stochastic interest rates and term structures*, Manuskript, Humboldt-Universität, Berlin, 1994.
3. H. SCHURZ, *Numerical regularization for SDEs: Construction of nonnegative solutions*, WIAS-Preprint No. 160, Berlin, 1995, erscheint in: J. Dyn. Sys. Appl.
4. H. SCHURZ, *Regularity of stochastic interest rates*, Manuskript, WIAS, 1995.
5. H. SCHURZ, *Construction of nonnegative numerical solution for SDEs: Explosions, life time and uniform boundedness*, Discussion paper No. 40, SFB 373, Humboldt-Universität, Berlin, 1994.
6. H. SCHURZ, *Modelling, analysis and simulation of stochastic innovation diffusion*, WIAS-Preprint No. 167, Berlin, 1995, erscheint in: Proc. ICIAM'95, ZAMM.

## Statistische Modellwahl durch Hypothesentests

**Bearbeiter:** V. Spokoiny

**Kooperation:** W. Härdle, O. Lepski, S. Sperlich (Humboldt-Universität Berlin), A. Juditsky (Rennes), A. Puhalskii (Moskau)

**Förderung:** SFB 373 „Quantifikation und Simulation ökonomischer Prozesse“

Modellenannahmen sind eine entscheidende Voraussetzung für jede statistische Datenanalyse. Wenn die Modelle spezifiziert sind, sind nur die relevanten Parameter durch Beobachtungen zu schätzen. Typische parametrische (endlichdimensionale) Modelle sind die in der angewandten Literatur dominierenden Probit- und logistischen Regressionsmodelle, siehe McCullagh and Nelder [9]. Hier wird die grundlegende Annahme getroffen, daß die Form der Link- und Indexfunktionen bekannt ist. Nichtparametrische oder semiparametrische Methoden weisen demgegenüber weit mehr Flexibilität auf; z. B. wird keine spezifische Form der Linkfunktion vorausgesetzt. Diese kann durch Beobachtungen geschätzt werden; hierzu ist Information über Glattheitseigenschaften dieser Funktion erforderlich (vgl. Horowitz [3] oder Severini und Stanisvalis [11]). Andererseits bilden aber parametrische Modelle häufig eine bessere Basis für eine weitere Datenanalyse; folglich werden Methoden benötigt, um parametrische gegen nicht- oder semiparametrische Modelle zu testen. Grundlegende Ergebnisse über nichtparametrische Hypothesentests wurden in den Arbeiten von Ingster [4,5] erzielt. Diese Resultate wurden in verschiedene Richtungen weiterentwickelt, um sie bei ökonometrischen Problemen zu verwenden, siehe Härdle und Mammen [1], Lepski und Spokoiny [8], Härdle, Sperlich und Spokoiny [2]. Die Anwendung dieser Ergebnisse wird wiederum dadurch behindert, daß die Tests Informationen über Glattheitseigenschaften der Modellfunktion voraussetzen, die normalerweise nicht gegeben sind. Diese Schwierigkeit motiviert die Entwicklung adaptiver nichtparametrischer Tests. Dieses Problem wurde in [7] untersucht, wobei ein optimaler adaptiver Test konstruiert wurde. Damit verwandt sind die Ergebnisse zur adaptiven nichtparametrischen Schätzung in [8], wo gezeigt wurde, daß die durch nichtlineare Wavelet-Smoother erreichten optimalen Konvergenzgeschwindigkeiten über Besovschen Funktionenklassen auch durch gewisse alternative adaptive Schätzer angenommen werden.

Eine Vielzahl statistischer Problemstellungen mit einem auf dem Begriff großer Abweichungen basierenden Optimalitätskriterium wurde in [6] und [10] untersucht. Dieser Optimalitätsbegriff führt zu einer neuen Klasse von Tests und Schätzungen, die die Maximum-Likelihood-Methode verallgemeinern. Der Allgemeinheitsgrad dieser Untersuchungen führt in die Nähe der abstrakten Theorie der statistischen Experimente; ein Zusammenhang zur Theorie großer Abweichungen wird hergestellt.

## Literatur

1. W. HÄRDLE AND E. MAMMEN, *Comparing nonparametric versus parametric regression fits*, Ann. Statist., **4**, 1926-47, 1993.
2. W. HÄRDLE, SPERLICH AND V. SPOKOINY, *Semiparametric single index versus fixed link function modelling*, eingereicht in: Ann. Statist., 1995.

3. J. HOROWITZ, *Semiparametric and nonparametric estimation of quantal response models*, in: G. S. Maddala, C. R. Rao and H. D. Vinod (eds), *Handbook of Statistics*, Elsevier Science Publishers, 45-72, 1993.
4. Y. INGSTER, *Minimax nonparametric detection of signals in white gaussian noise*, *Problems Inform. Transmission*, (18), 130–140, 1982.
5. Y. INGSTER, *Asymptotically minimax hypothesis testing for nonparametric alternatives*, *Math. Methods of Statist.*, (2,3,4), 85–114, 171–189, 249–268, 1993.
6. A. KOROSTELEV, V. SPOKOINY, *Exact asymptotics of minimax Bahadur risk in Lipschitz regression*, WIAS-Preprint No. 183 (1995), erscheint in: *Statistics*.
7. O. LEPSKI, E. MAMMEN, V. SPOKOINY, *Ideal spatial adaptation to inhomogeneous smoothness: An approach based on kernel estimates with variable bandwidth*, WIAS-Preprint No. 191 (1995), erscheint in: *Ann. Statist.*
8. O. LEPSKI AND V. SPOKOINY, *Minimax nonparametric hypothesis testing: The case of an inhomogeneous alternative*, Technical Report 44, SFB, Humboldt-Universität, Berlin, eingereicht in: *Bernoulli*, 1995.
9. P. MCCULLAGH AND J. A. NELDER, *Generalized Linear Models*, *Monographs on Statistics and Applied Probability*, 2nd, **37**, Chapman and Hall, London, 1989.
10. A. PUKHALSKI AND V. SPOKOINY, *On large deviation efficiency in statistical inference*, WIAS-Preprint No. 196 (1995), eingereicht bei: *Bernoulli*, 1995.
11. T. A. SEVERINI AND J. G. STANISWALIS, *Quasi-likelihood Estimation in Semiparametric Models*, *Journal of the American Statistical Association*, **89**, 501-11, 1994.
12. V. SPOKOINY, *Adaptive hypothesis testing using wavelets*, WIAS-Preprint No. 176, Berlin, eingereicht in: *Ann. Statist.*, 1995.

## 3.7 Forschungsgruppe Differenzierbare Dynamik und Ergodentheorie

### 3.7.1 Zusammenfassung

Ausgehend von der qualitativen Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen und Evolutionsgleichungen sowie von Fragen der klassischen Mathematik (u.a. der Differentialgeometrie, globalen Analysis und mathematischen Physik) hat die Theorie der dynamischen Systeme Begriffe und Methoden entwickelt, die in den genannten Gebieten zur Klärung grundlegender Probleme beitragen. Hierbei ist ein eigenständiger Zweig der heutigen Mathematik entstanden, dessen Untersuchungen von konkreten numerischen Anwendungen bis zu theoretischen Grundlagenfragen reichen. Den letzteren ist die Arbeit der Forschungsgruppe gewidmet, die sich durch folgende Aspekte näher charakterisieren läßt.

Einmal besitzt die Dynamik durch die Frage nach der Struktur von charakteristischen invarianten Mengen, unter denen die Attraktoren eine besondere Rolle spielen, eine wichtige geometrische Komponente. Zum anderen stehen maßtheoretische Methoden (Ergodentheorie) gleichberechtigt neben den geometrischen, und die Klärung des Zusammenhanges zwischen diesen beiden Blickrichtungen bietet interessante Probleme. Der Weg von der geometrischen Dynamik zur Ergodentheorie führt am Ende zur stochastischen Dynamik, in der statt geometrischer Bewegungen stochastische Prozesse die zu untersuchenden Objekte darstellen. In den Arbeiten der Gruppe gelingt es, meist durch konkrete Beispiele oder Anwendungen motiviert, Beiträge zu allgemein interessierenden aktuellen Fragen aus diesen drei Themenkreisen zu liefern.

Ein weiteres Arbeitsgebiet betrifft grundlegende Untersuchungen zur Theorie der dynamischen Zetafunktionen. Ausgangspunkt sind hier die geodätischen Flüsse, Beziehungen und Anwendungen erstreckten sich jedoch auf viele Gebiete und insbesondere auch auf die mathematische Physik.

### 3.7.2 Projekte

#### **Geometrie und Maß bei Attraktoren, die durch Bifurkation aus einem hyperbolischen Attraktor entstehen**

**Bearbeiter:** U. Bellack

**Kooperation:** H. G. Bothe

Bei vielen Ergebnissen über dynamische Systeme auf Mannigfaltigkeiten spielt Hyperbolizität eine Schlüsselrolle. Bedeutende Theoreme wie das über die Spektralzerlegung in Basismengen von S. Smale oder die Existenz von Markov-Zerlegungen (R. Bowen) setzen voraus, daß der betrachtete Diffeomorphismus zumindest auf der für die Langzeitdynamik relevanten Menge der nichtwandernden Punkte ( $\Omega$ -Menge) gleichmäßig hyperbolisch ist. Viele interessante Systeme erfüllen diese Voraussetzung jedoch nicht, und so gehen die Bemühungen dahin, für allgemeinere Systeme eine Strukturtheorie zu entwickeln. (Siehe hierzu die Arbeit [2] von T. Krüger und S. Troubetzkoy über Markov-Zerlegungen bei nicht gleichmäßig hyperbolischen Systemen.)

In unserem Projekt wird die Bifurkation eines wohlbekanntes hyperbolischen Attraktors (Solenoid) untersucht, bei der die Hyperbolizität verlorengeht. Gleichwohl kann gezeigt werden, daß die hierbei entstehenden Attraktoren topologisch transitiv sind und die periodischen Punkte in ihnen dicht liegen. In Analogie zum Sinai-Ruelle-Bowen-Maß auf dem Solenoid existieren nach der Bifurkation dynamisch definierte Maße, die die Dynamik fast aller Punkte aus dem Einzugsbereich beschreiben. Unter gewissen Voraussetzungen sind diese Maße für ein Teilintervall des Bifurkationsparameters auf einem Solenoid konzentriert, obwohl das in den neuen Attraktoren nirgends dicht liegt.

Ziel der weiteren Arbeit ist es, einerseits bisher notwendige Voraussetzungen abzuschwächen und andererseits die Situation nach der Bifurkation durch weitere dynamische Größen (Lyapunov-Exponenten, Entropie) zu beschreiben.

#### **Literatur**

1. R. BOWEN, *Equilibrium states and the ergodic theory of Anosov diffeomorphisms*, Lecture Notes in Math. 470 (1975).
2. T. KRÜGER, S. TROUBETZKOY, *Markov partitions for non-uniformly hyperbolic systems with singularities*, Erg. Theor. Dynam. Syst. 12 (1992), 487–508.
3. S. SMALE, *Differentiable dynamical systems*, Bull. Amer. Math. Soc. 73 (1967), 747–817.

## Einzugsbereiche hyperbolischer Attraktoren

**Bearbeiter:** H. G. Bothe

Die hier untersuchten Attraktoren  $\Lambda$  gehören zur Dynamik, die aus den Iterierten  $f^k$  ( $k \in \mathbf{Z}$ ) von einem Diffeomorphismus  $f : M \rightarrow M$  einer Mannigfaltigkeit  $M$  besteht. Der Einzugsbereich  $B(\Lambda)$  eines solchen Attraktors ist die Menge aller Punkte aus  $M$ , die bei wachsendem  $k$  von  $\Lambda$  angezogen werden. Als invariante Mengen tragen  $\Lambda$  und  $B(\Lambda)$  eine innere Dynamik, und da für gewisse Attraktoren  $\Lambda$  die innere Struktur befriedigend beschrieben werden kann, entsteht die Frage, wie diese die Dynamik auf  $B(\Lambda)$  beeinflusst. Als Klasse von Attraktoren mit bekannter innerer Struktur wird hier von den expandierenden Attraktoren  $\Lambda$  (siehe [3], [1]) ausgegangen, wobei sich die bisher vorliegenden Ergebnisse allerdings nur auf eindimensionale hyperbolische Attraktoren beziehen. Hier konnten zu früheren Resultaten (siehe [2]) weiterführende Erkenntnisse gewonnen werden, die u.a. Rückschlüsse auf den Einfluß der inneren Dynamik von  $\Lambda$  auf die Gesamtdynamik auf  $M$  auch jenseits von  $B(\Lambda)$  zulassen (welche Attraktoren implizieren mit Notwendigkeit die Existenz chaotischer Teildynamiken außerhalb  $B(\Lambda)$ ). Zudem gelang es, die Dynamik in  $B(\Lambda)$  auf ein durch  $\Lambda$  bestimmtes dreidimensionales Modell zurückzuführen.

### Literatur

1. H. G. BOTHE, *Expanding attractors with stable foliations of class  $C^1$* , Ergodic Theory and Related Topics, Proceedings, Güstrow 1990, pp. 36–61. Lecture Notes in Math. 1514 (1992).
2. H. G. BOTHE, *How 1-dimensional hyperbolic attractors determine their basins*, Preprint 11/95 des Forschungsbereiches Dynamik: Analysis, effiziente Simulation und Ergodentheorie.
3. R. F. WILLIAMS, *Expanding attractors*, Publ. Math. IHES 43 (1974).

## Nicht invertierbare Hufeisenabbildungen

**Bearbeiter:** H. G. Bothe

Für konkrete dynamische Systeme gelingt der Nachweis chaotischen Verhaltens zuweilen dadurch, daß man einen Teil des Phasenraumes durch eine Hufeisenabbildung (siehe [4]) beschreibt und damit eine enge Beziehung zu einer Shift-Dynamik herstellt (siehe z. B. [3], Kap. III). Die Frage, inwieweit der Zusammenhang zwischen Hufeisenabbildungen und Shift-Abbildungen in der symbolischen Dynamik erhalten bleibt, wenn man bei den ersteren auf Eindeutigkeit verzichtet, ist der Gegenstand dieses Projektes. Dabei ergibt sich, daß für fast alle nicht eineindeutigen Hufeisenabbildungen  $f$  der maximale invariante Teilraum zu einem vollen Shiftraum konjugiert ist, falls nur die Kontraktion von  $f$  in der stabilen Richtung genügend stark ist. Das gilt auch bei höherdimensionalen Analoga zu den üblichen zweidimensionalen Hufeisenräumen (siehe [2]). Zugleich wird der maximale Attraktor von  $f$  beschrieben. Eine in [1] entwickelte Methode kann herangezogen werden, um zu zeigen, daß einige der Ergebnisse, was die zu fordernde Stärke der Kontraktion betrifft, optimal sind.

## Literatur

1. H. G. BOTHE, *Attraktor of non invertible maps*, IAAS-Preprint No. 77, 1993.
2. H. G. BOTHE, *Shift spaces and attractor in non invertible horse shoes*, WIAS-Preprint (erscheint Feb. 1996).
3. J. MOSER, *Stable and random motions in dynamical systems*, Ann. Math. Studies 77 (1973).
4. S. SMALE, *Diffeomorphisms with many periodic points*, in S. S. Cairns (editor), *Differential and Combinatorial Topology*, pp. 63–80, Princeton (1963).

## Probleme aus der Theorie der dynamischen Zeta-Funktionen

**Bearbeiter:** A. Juhl

**Kooperation:** U. Bunke, M. Olbrich (Humboldt-Universität zu Berlin, SFB 288), A. Deitmar (Universität Heidelberg), D. Mayer (Universität Clausthal-Zellerfeld), S. Patterson (Universität Göttingen)

Gegenstand dieses Projektes ist die Dynamik des geodätischen Flusses von Riemannschen Mannigfaltigkeiten negativer Krümmung. Das Verständnis der geodätischen Flüsse solcher Metriken hat Modellcharakter für das Verständnis hyperbolischer hamiltonscher Dynamik. Die betrachteten Systeme sind (im Sinne von Gutzwiller) stark chaotisch. Für das tiefere Verständnis der Dynamik des geodätischen Flusses spielen die zugeordneten Zeta-Funktionen eine zentrale Rolle. Diese Funktionen sind meromorphe Funktionen einer komplexen Variablen. Die Charakterisierung der Nullstellen und Polstellen dieser Zeta-Funktionen und ihrer Werte an ausgezeichneten Stellen ist eines der zentralen Themen ihrer Theorie. Es gibt nun zwei prinzipiell voneinander verschiedene Methoden zur Untersuchung dieser Funktionen: Harmonische Analysis und Hyperbolische Dynamik. Seit der Entdeckung des auf der hyperbolischen Dynamik basierenden Zuganges (vgl. 8) ist es eines der herausfordernden Probleme in diesem Gebiet, die Verbindungen zwischen den beiden Zugängen zu verstehen. Das Projekt ist der Entwicklung dieser Verbindungen gewidmet. Dies basiert auf vorangegangenen Untersuchungen zu einer kohomologischen Theorie der Zeta-Funktionen, wie sie seit einigen Jahren vom Bearbeiter (und S. Patterson) angeregt und durchgeführt wurden (vgl. [2] und [7]). 1994 gelang eine Charakterisierung der Singularitäten der Zeta-Funktionen nur unter Benutzung von Invarianten der unterliegenden Dynamik (kanonische Ströme). Diese Charakterisierungen der Singularitäten haben eine enge Verwandtschaft mit den Ergebnissen, die mit den Methoden der hyperbolischen Dynamik abgeleitet werden. Auf der anderen Seite basiert die Theorie des Bearbeiters auf dem Verständnis der Verbindung der kanonischen Ströme mit automorphen Formen, und in diesem Sinn bauen diese Ergebnisse eine Brücke zwischen den beiden Zugängen. Im Jahr 1995 gelang es nun, die vorher entwickelte Theorie der kanonischen Ströme mit vorangegangenen andersartigen Charakterisierungen der Divisoren (durch algebraische Darstellungstheorie und durch Gamma-Kohomologie, vgl. 2, 6 und 7) zu verbinden. Dies basierte auf der Entwicklung einer neuen Hodge-Theorie für die stabile Blätterung, die es insbesondere erlaubt, die bisher vorliegenden Ergebnisse als eine neue Form einer Hodge-Theorie zu verstehen. Diese Ergebnisse erlauben nun für Räume konstanter negativer Krümmung und unendlichen Volumens die Aufstellung eines natürlichen Systems von Vermutungen, die die Singularitäten der entsprechenden Zeta-Funktionen mit verschiedenen Hodge-Theorien verbinden. Sie stehen in enger Verbindung mit Vermutungen von Patterson (vgl. [7]) und Arbeiten von Melrose, Mazzeo, Phillips u.a. zur Hodge-Theorie und Connes u.a. zur Indextheorie der Blätterungen. Diese Theorie wird in der Monographie [3] entwickelt.

## Literatur

1. D. FRIED, *The zeta functions of Ruelle and Selberg I*, Ann. Scient. Ec. Norm. Sup. 19 (1986), 491-517.



2. A. JUHL, *Zeta-Funktionen, Index-Theorie und hyperbolische Dynamik*, Habilitationsschrift Humboldt-Universität 1993.
3. A. JUHL, *An introduction to the cohomological theory of dynamical zeta functions*, Monographie (in Vorbereitung).
4. A. JUHL, *The cohomological theory of dynamical zeta functions. A review*, (WIAS-Preprint, in Vorbereitung).
5. U. BUNKE, M. OLBRICH, *Selberg Zeta and Theta functions. A differential operator approach*, Akademie-Verlag 1995.
6. U. BUNKE, M. OLBRICH, *Gamma-cohomology and the Selberg zeta function* (erscheint in Crelles Journal).
7. S. PATTERSON, *Two conjectures on Kleinian groups*, Vortrag in Warwick 1993.
8. D. RUELLE, *Zeta functions for expanding maps and Anosov flows*, Invent. Math 34 (1976), 231-242.

## Nicht vollständig invertierbare Systeme

**Bearbeiter:** J. Schmeling

**Kooperation:** S. Troubetzkoy (SUNY, Stony Brook, USA), Y. Pesin (Pennstate Univ., USA)

In der differenzierbaren Dynamik ist die Theorie invertierbarer Systeme (Diffeomorphismen, Flüsse) weitgehend entwickelt. Insbesondere wird das Augenmerk auf die Existenz physikalisch motivierter invarianter Maße (Sinai-Ruelle-Bowen-Maße) gerichtet, d. h. Maße, die physikalisch oder numerisch erkennbar sind. Damit meint man im speziellen Maße, die die Evolution von fast allen (bezügl. des Lebesgue-Maßes) Punkten des Einzugsbereiches beschreiben. Mit Hilfe eines solchen Maßes können dann Beziehungen zwischen Entropie (eine Größe, die die „Chaotizität“ mißt), Lyapunov-Exponenten (Größen, die die Sensibilität bezügl. der Anfangsbedingungen angeben) und Hausdorff-Dimension erstellt werden. Eine der wichtigsten Formeln für Diffeomorphismen auf Flächen ist die Young-Pesin-Formel für das SRB-Maß  $\mu_{\text{SRB}}$ :

$$\dim_{\text{H}} \mu_{\text{SRB}} = 1 - \frac{\log \gamma}{\log \lambda},$$

wobei  $\log \gamma > 0 > \log \lambda$  die Lyapunov-Exponenten von  $\mu_{\text{SRB}}$  sind.

Im Gegensatz zu den invertierbaren Systemen steht die Theorie der nichtinvertierbaren Systeme - wenn man von eindimensionalen reellen oder komplexen Systemen absieht - noch in den Anfängen. In dem hier vorgestellten Projekt wird versucht, diese Theorie zu entwickeln. Dazu betrachten wir die folgende Abbildung des Quadrates  $Q = \{(x, y) : |x| \leq 1, |y| \leq 1\}$  in sich:

$$f : Q \setminus \{(x, y) : y = kx\} \rightarrow Q, \quad |k| < 1$$

$$f(x, y) = \begin{cases} (\lambda(x-1) + 1, \gamma(y+1) - 1), & y < kx \\ (\lambda(x+1) - 1, \gamma(y-1) + 1), & y > kx \end{cases}$$

mit  $0 < \lambda < 1$ ,  $1 < \gamma < 2/(1 + |k|)$ , die der russische Radiophysiker Belykh als ein Modell in der Phasensynchronisation eingeführt hat.

Diese Abbildung ist für  $\lambda > 1/2$  nicht mehr invertierbar. Es ist uns gelungen, folgende Aussagen zu beweisen:

1. Es existiert ein physikalisch motiviertes Maß.
2. Genau dann, wenn die Young-Pesin-Formel gilt, ist die Abbildung  $f$ , eingeschränkt auf eine Menge von vollem Maß, invertierbar, auch falls  $\lambda > 1/2$ .
3. Die Young-Pesin-Formel gilt fast sicher bezüglich der Parameter  $(k, \lambda, \gamma)$ , falls  $\lambda \gamma < 1$ .

Zusammengefaßt ergibt sich, daß die Theorie der invertierbaren Systeme bei Beschränkung auf den Attraktor und fast alle Parameterwerte auch in diesem Fall gilt, falls die Summe der Lyapunov-Exponenten negativ ist, d. h. die Abbildung dissipativ ist. Andererseits bedeutet dieses Resultat auch, daß in Situationen, in denen hoch- oder unendlichdimensionale Systeme auf zweidimensionale projiziert werden, dieses Verfahren fast sicher die wesentlichen ergodischen und metrischen Eigenschaften des Ursprungssystems erhält.

## Dynamik von Verzweigungsprozessen

**Bearbeiter:** R. Siegmund-Schultze, J. Schmeling

**Kooperation:** K. Matthes (Universität Potsdam)

Die Untersuchungen zu Gleichgewichten und Genealogie von Verzweigungsprozessen verfolgen das Ziel, allgemeine Aussagen zu Existenz und Struktur von Gleichgewichten für Verzweigungsprozesse im Raum abzuleiten, wobei von der Klärung der zugehörigen Familienstruktur (Genealogie) ausgegangen wird. Bisher sind Aussagen dazu fast ausschließlich unter der Voraussetzung der Existenz von Momenten abgeleitet worden. Das Interesse an solchen Untersuchungen resultiert wesentlich aus der Rolle, die (zeitstetige) kritische Verzweigungsprozesse (als noch gut analytisch handhabbare Verallgemeinerung des Wienerprozesses) in der modernen stochastischen Analysis spielen (Superprozesse im Sinne von Dynkin und Dawson). Ebenso sind räumliche Verzweigungsprozesse weiterhin ein wichtiges Modell in der Theorie unendlicher Teilchensysteme. Der Verzicht auf Momentenannahmen führt dazu, daß sich die Familienstruktur nicht mehr durch einen stochastischen Prozeß, sondern durch ein Maß mit unendlicher Gesamtmasse auf dem Trajektorienraum beschreiben läßt, das bezüglich des Zeitshifts nur noch faktor-invariant ist. Ein entsprechender Ansatz wurde auf der Tagung über Verzweigungsprozesse (Oberwolfach, Dezember 1995) vorgestellt. Eine weitere Publikation, die die Serie der zu dieser Thematik in Zusammenarbeit mit K. Matthes und A. Wakolbinger (Frankfurt/Main) erstellten Arbeiten fortsetzen soll, wird angestrebt. Dabei wäre die Klärung der allgemeinen Existenz- und Strukturaussage ein wirklicher Durchbruch, der bestehenden Einzelaussagen ([3] im subkritischen Fall, [1] im kritischen Fall) einen allgemeinen Rahmen geben und zu einem wirklichen inhaltlichen Verständnis führen würde.

Im Zusammenhang mit der Untersuchung des Dimensionsspektrums zufälliger Fraktale, die durch Verzweigungsprozesse in Matrixräumen erzeugt werden, wird (in Fortsetzung von [2]) die Arbeit an einem seit längerer Zeit in Vorbereitung befindlichen Artikel weitergeführt und soll 1996 abgeschlossen werden. Die Oberwolfach-Tagung belegte, daß diese Problematik inzwischen auch in der Verzweigungstheorie zu einem Forschungsgegenstand geworden ist.

## Literatur

1. M. BRAMSON, J. T. COX AND A. GREVEN, *Ergodicity of critical spatial branching processes in low dimensions*, Ann. Prob. 21 (1993), No. 4, 1946–1957.
2. J. SCHMELING AND RA. SIEGMUND-SCHULTZE, *The singularity spectrum of self-affine fractals with Bernoulli measure*, IAAS-Preprint No. 14, 1992.
3. RA. SIEGMUND-SCHULTZE, *A subcritical spatially homogeneous branching process may have an equilibrium*, Math. Nachr. 151 (1991), 101–120.

## **4 Wissenschaftlich-technische Dienste**

### **4.1 Bibliothek**

Die Bibliothek beschafft in Auswahl wissenschaftliche Literatur zu den Hauptforschungsrichtungen des Instituts, in begrenztem Umfang Arbeitsplatzliteratur für den ständigen Gebrauch, einen kleinen Präsenzbestand in der Bibliothek zum Nachschlagen und die erforderliche Literatur zum Betrieb des Instituts (Gesetzblätter, Kommentare u.a.).

Im Jahre 1995 hat die Bibliothek durch den Zugang von rd. 2 400 Bestandseinheiten ihren Medienbestand auf rd. 55 700 Einheiten (Zeitschriftenbände, Bücher, Preprints/Reports) erweitern können.

Für die Auswahl stehen konventionelle und moderne Hilfsmittel zur Verfügung. Bei nicht ganz frischen Erscheinungen wird intensiver Gebrauch von Datenbanken zur Beurteilung der Relevanz der Titel gemacht. Aus Kostengründen wird hierbei den CD-ROM-Datenbanken der Vorzug gegeben.

Die Bestände stehen nicht nur den Institutsangehörigen, sondern auch der Fachöffentlichkeit zur Verfügung. Präsenzbestände werden auch durch Kopienbereitstellung nutzbar gemacht. Im Rahmen des Leihverkehrs werden Kopien in dringenden Fällen per Fax übermittelt.

#### **4.1.1 Zur Erwerbungsituation**

Für den Bucherwerb konnten 19 % des Bibliotheksetats eingesetzt werden. Leider ist der Aufwand für die wiederholte Erwerbung sich schnell ändernder Inhalte (Buchneuauflagen und Ergänzungen bei den Loseblattwerken) recht erheblich.

Die Gesamtzahl der laufend gehaltenen Zeitschriften beträgt rd. 240 (gegenüber 257 im Vorjahr), davon rd. 230 Fachzeitschriften sowie 10 sonstige.

Von den Fachzeitschriften des Jahrgangs 1995 konnten nur noch 135 Titel (gegenüber 195 im Vorjahr) gekauft werden. Die übrigen sind überwiegend gesammelte Geschenkexemplare, Dubletten, Musterhefte o.ä., haben also nicht die Aktualität und Vollständigkeit wie die Kaufzeitschriften.

Im August 1994 mußten budgetbedingt 60 Titel (das sind rd. 25 %) abbestellt werden, um mit den finanziellen Mitteln des Jahres 1995 auszukommen. Die Bibliothekskommission hatte einer solchen Profileinschränkung nach mühevollen Beratungen nur unter dem Zwang der Etatlage zustimmen können.

Im Verlauf des Jahres 95 hat sich gezeigt, daß in einer Reihe von Fällen der Verzicht auf diese Zeitschriften die Wissenschaftler behindert hat, so daß in 5 Fällen eine Wiederbestellung ab 1996 und eine Ergänzung des fehlenden Jahrgangs 95 vorgenommen werden mußte. Bei den ebenfalls schmerzlich vermißten sehr hochpreisigen abbestellten Zeitschriften konnte allerdings eine solche Korrektur nicht ins Auge gefaßt werden. Der obigen massiven Abbestellung standen lediglich 15 Neubestellungen für andere dringend benötigte Zeitschriften gegenüber.

Im Berichtsjahr selbst mußten wiederum 14 Zeitschriften für 1996 abbestellt werden, um die zu erwartende Preissteigerung abfangen und die erwähnten 5 Wiederbestellungen finanzieren zu können. Der Abbestellung stehen 8 Neubestellungen gegenüber.

### 4.1.2 Literaturbeschaffung aus anderen Bibliotheken

Im Profil des Bibliotheksalltags zeichnet sich eine deutliche, sprunghaft wachsende Erhöhung des nehmenden Leihverkehrs (einschl. Dokumentenbereitstellung durch Kopie) ab. Neben der mathematischen Fachliteratur, die wir entsprechend unseren finanziellen Möglichkeiten für den eigenen Bestand erwerben, erschließen und bereitstellen können, benötigen die Forschungs- bzw. Projektgruppen in zunehmendem Umfang Literatur, die aus fremden Bibliotheken beschafft werden muß. Der überwiegende Anteil davon ist anderen Fachdisziplinen zuzurechnen, was aufgrund der anwendungsorientierten Forschung ganz zwangsläufig ist. Noch kann ein hoher Prozentsatz der Anforderungen in Berliner Bibliotheken positiv erledigt werden, solange überwiegend nicht ganz neue Quellen beschafft werden müssen. (Bei diesen gibt es ohnehin die Probleme mit Einarbeitungs- und Bereitstellungsfristen.)

In diesem Service-Bereich der Bibliotheken besteht dringender Bedarf an der Lösung einiger Konflikte, die teils rechtlicher, teils kommerzieller, aber auch technischer, organisatorischer und psychologischer Natur sind:

- Traditioneller Leihverkehr – kostenpflichtige Dokumentenbereitsstellungsdienste
- Bestandsaufbau (Archivfunktion) der Bibliothek – Dokumentbereitstellung als Einwegmaterial beim Kunden – haushaltstechnische Behandlung der Kosten
- Erwartungen der Wissenschaftler orientieren sich an ihrem Bedarf und an den technischen Möglichkeiten – die Veränderung rechtlicher und kommerzieller Rahmenbedingungen hinkt hinterher (Urheberrecht, Technologiewandel, Existenzfragen).

Die Dringlichkeit einer Lösung dieses Teilproblems ist inzwischen anerkannt, und an zentralen Stellen wird unter staatlicher Förderung an Projekten gearbeitet, die zu einer tragbaren Lösung in Deutschland führen sollen. Derzeit gibt es eine Reihe funktionierender Dienste, aber sie sind zu teuer.

Unter aufmerksamer Beachtung der Entwicklung und der eigenen Nutzungsmöglichkeiten wurde daher auch 1995 noch überwiegend konventionell Literatur für die Wissenschaftler aus fremden Bibliotheken beschafft. Gegenüber 1994 gab es eine Steigerung um 70 %. Dokumentiert und gezählt sind die Initialaufträge. Mehrfachversuche, Verlängerungen usw. sind darin nicht inbegriffen, haben aber zahlenmäßig fast dasselbe Volumen.

### 4.1.3 Ausblick

Das langfristige Nebeneinander analoger und digitaler Informationsträger ist realistischerweise Konsens, auch wenn die Digitalisierung der zurückliegenden analogen Informationsträger (Printmedien) wegen der Vorteile für die Informations-Wiedergewinnung trotz der entstehenden Kosten angestrebt wird.

Künftig wird also unsere Weiterentwicklung darin bestehen, auch für die Katalogisierung und die Bereitstellung (sowohl aktiv wie passiv) von Nichtbuchmaterialien (NBM) gerüstet und kompetent zu sein.

## 4.2 Fachinformation

Die Fachinformation des WIAS administriert die Online-Nutzung der für die Mathematik wichtigsten bibliografischen Datenbanken und eines umfangreichen Pools von naturwissenschaftlich-technischen Datenbanken kommerzieller Anbieter. Diese Online-Dienste werden durch die Offline-Nutzung kostenpflichtiger Datenbanken im Hause via CD-ROM und die Nutzung gedruckter Informationsdienste ergänzt. Ferner stehen In-House-Datenbanken und die im Internet angebotenen Dienste zur Verfügung.

Komplexe Recherchen werden im WIAS in der Regel zentral bei der Fachinformation durchgeführt, aber auch selbständige Recherchemöglichkeiten am Arbeitsplatz der Wissenschaftler (Endnutzerkonzept) sind realisiert.

Der Server der Außendarstellung des Institutes wird von der Fachinformation administrativ betreut. Hier werden unter anderem die im WIAS erstellten Preprints in elektronischer Form zur weltweiten unbeschränkten Nutzung in den derzeit üblichen Formaten bereitgestellt.

### 4.2.1 Projekte

**Verbundvorhaben „Nutzung naturwissenschaftlich-technischer Datenbanken durch außeruniversitäre Forschungseinrichtungen in den neuen Bundesländern“ (NDF-Projekt)**

**Bearbeiter:** Th. Cierzynski, Fachinformationsbeauftragter; H. Rothkirch, Leiterin der Bibliothek; R. Tribiahn, Rechercheur

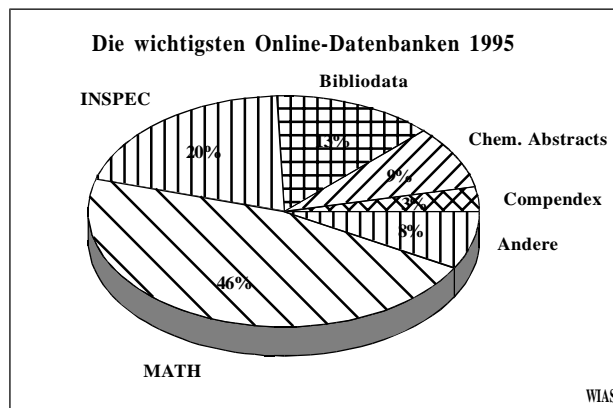
**Kooperation:** 20 außeruniversitäre Forschungseinrichtungen, Projektträger „Fachinformation“ in Darmstadt, Scientific Consulting Dr. Schulte-Hillen in Köln, FIZ Karlsruhe/STN International

**Förderung:** BMBF

Im Berichtszeitraum lag der Schwerpunkt der Arbeit in der weiteren Verbesserung, Institutionalisierung und Stabilisierung der Informationsversorgung des WIAS durch eine umfangreiche Liste von naturwissenschaftlich-technischen Datenbanken im Online-Betrieb oder in Form von CD-ROM.

Die Akzeptanz dieser Art von Recherchemitteln bei den wissenschaftlichen Mitarbeitern des Institutes konnte im Berichtszeitraum weiter ausgeweitet werden, was sich z. B. durch die rege Nutzung des Online-Datenbankangebotes dokumentiert.

Zu diesem Zweck wurden von der Fachinformation zwei Informationsveranstaltungen durchgeführt, in denen den Institutsmitarbeitern ein entsprechender aktueller Überblick über das Datenbankangebot vermittelt wurde. Dieses Vorgehen erwies sich unter dem Aspekt der projektorientierten Forschungsschwerpunkte des WIAS als optimal, da hierdurch den projektbearbeitenden Mitarbeitern schnell wichtige und wesentliche Informationen und Quellennachweise, insbesondere auf dem Gebiet der nicht-mathematischen Datenbanken, vermittelt werden konnten. Es hat sich als sinnvoll erwiesen, derartige Recherchen zentral in der Fachinformation durchzuführen. Als besonders wichtig erwies sich die Datenbank INSPEC von *The Institution of Electrical Engineers*, Stevenage, Hertfordshire, England.



Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeit der Fachinformation lag in der Vermittlung der Retrievalsprachen (z. B. Messenger, SPIRS) und der Beratung zu Recherchestrategien, die die wissenschaftlichen Mitarbeiter des WIAS in die Lage versetzen, direkt am Arbeitsplatz eigene Recherchen in den Datenbanken zur Mathematik (MATH, CompactMATH, MathSci) selbständig durchzuführen.

Ein nicht unwesentlicher Anteil der Arbeit der Fachinformation im WIAS bestand im Berichtszeitraum darin, den nahtlosen Übergang vom Betriebssystem VMS nach Unix für die benötigte und eingesetzte Retrievalsoftware zu realisieren und damit Kontinuität zu gewährleisten.

Die Fachinformation kooperiert mit den anderen Projektteilnehmern (NDF-Projektkreis, Anwendertreffen, Mail-Verteiler), was sich für die Aktualität und die Effizienz der Projektdurchführung als sehr wesentlich erwies.

Im Berichtszeitraum hat sich die Tendenz und die Erfahrung der vergangenen Jahre weiter bestätigt und verstärkt, daß der Nachweis von bibliografischen Quellen in elektronischen Datenbanken in der Fachinformation nur eine Komponente unter vielen in einem komplexen Prozeß moderner Informationsvermittlung darstellt, der weit über den ursprünglichen Inhalt der klassischen Fachinformation in der Mathematik hinausgeht.

## Literatur

1. R. TRIBIAHN, *Datenbank-Nutzung im WIAS : Online-Retrieval und In-House-Komponenten*, Berlin, Weierstraß-Institut, 1995. (Interner Bericht und Vortrag)
2. T. CIERZYNSKI, R. TRIBIAHN, *Individuelle Nutzung der Datenbank MATH im WIAS*, Berlin, Weierstraß-Institut, 1995. (Interner Bericht und Vortrag)
3. T. CIERZYNSKI, R. TRIBIAHN, *Der WIAS Pocket Guide zur Datenbank MATH*, Berlin, Weierstraß-Institut, 1995.

## Verbesserung des benutzerorientierten Zugriffs auf fachspezifische Online-Datenbanken und CD-ROM für mathematische Institute in der Bundesrepublik Deutschland (DMV-Projekt)

**Bearbeiter:** Thomas Cierzynski, Fachinformationsbeauftragter; Helga Rothkirch, Leiterin der Bibliothek

**Kooperation:** Deutsche Mathematiker-Vereinigung (DMV), Projektträger „Fachinformation“ bei der Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung (GMD), Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB), FIZ Karlsruhe/STN International, IuK-Kommissionen der wissenschaftlichen Fachgesellschaften Deutsche Mathematiker-Vereinigung (DMV), Deutsche Physikalische Gesellschaft (DPG), Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) und der Gesellschaft für Informatik (GI)

Überblicksartige Beschreibung der Wirkung des Projekts, an dem wir bis Ende 1993 gefördert mitgearbeitet haben und ab 1994 (durch Überwechseln in das NDF-Projekt) als assoziierter Teilnehmer:

Das Projekt wurde von Februar 1992 bis August 1992 vorbereitet. Es hat in den 3 Jahren vom 1.9.92 bis 31.8.95 zu ganz erheblichen Aktivitäten bei allen Teilnehmern geführt und damit sowohl wesentliche Erfolge im Hinblick auf das ursprüngliche Projektziel als auch einen beschleunigten Aufbruch in das angehende Informationszeitalter bewirkt.

Bereits innerhalb des ersten Projektjahres war die Erkenntnis dominant, daß unter Berücksichtigung vieler Faktoren innerhalb der wissenschaftlichen Information und ihrer Infrastruktur weitaus mehr zu konzipieren und zu lösen ist: Die Kette bzw. der Ring vom Informationserzeuger bis zum Nutzer enthält zuviele konflikthafte Partnerschaften (inzwischen fast Gegnerschaften), die auf technischen und wirtschaftlichen Unverträglichkeiten beruhen. Daher funktioniert das traditionelle System, das die wissenschaftlichen Erkenntnisse verbreitet und nutzbar macht, nicht mehr. Die gemeinsame Erkenntnis wurde manifest, daß Teillösungen nicht ausreichen, sondern daß eine grundlegende Innovation des Gesamtsystems unter Einbeziehung aller Beteiligten (Wissenschaftler als Informationserzeuger, Verlage, Fachinformationszentren, Bibliotheken, Hard- und Softwarebranche, Telekommunikation, Politik, Wirtschafts- und Rechtsinstanzen, Wissenschaftler als Informationsnutzer) und unter Berücksichtigung aller Randbedingungen anzustreben ist.

Im Umfeld der Projektleitung wurde die Idee ausgearbeitet, sobald als möglich Neuentstehendes den technologischen Möglichkeiten und dem Bedarf entsprechend, dabei verteilt, aber kompatibel zu gestalten und bei Bedarf Älteres auf dieses Niveau zu transformieren.

Die Findung und Realisierung geeigneter Informations- und Kommunikationsstrukturen (IuK) ist kompliziert, komplex, aufwendig und im Ergebnis noch unabsehbar. Von grundsätzlicherer Bedeutung ist jedoch die erwähnte Gesamtsicht.

Der Charakter eines umfassenden und verteilten Systems, die Vielfalt der Komponenten und der hohe Aufwand bedingen bereits die koordinierte Konzeption und die möglichst vielfache Nutzung.

Aus dieser Logik erwuchs die Konsequenz, daß sich in Deutschland vier benachbarte wissenschaftliche Fachgesellschaften (der Gebiete Physik, Mathematik, Chemie und Informatik) vertraglich auf Kooperation festgelegt haben.

Die Vorreiterrolle haben in diesem gesamten Prozeß die DMV und die Projektleitung gespielt. Es wurden eine Reihe abgestimmter Versionen für den Entwurf eines „Verteilten Informationssystems für die Mathematik“ (Math-Net) erarbeitet und diskutiert.

Vor dem Abschluß des DMV-Projektes (und bereits analog in den benachbarten Fachgesellschaften) wurden aus dem „Forum der Fachinformationsbeauftragten“ Vertreter zu einer IuK-Kommission der DMV bestimmt.

Für das WIAS hat die Mitarbeit im Projekt und im Forum wichtige Ergebnisse gebracht:



- Den verbesserten Zugriff auf Datenbanken, die für die projektorientierte mathematische Forschung und Anwendung relevant sind.
- Die Beteiligung mit einem eigenen Informationsangebot im Netz auf der Basis der Empfehlungen für ein Math-Net. Damit ist das WIAS innerhalb der *Mathematical Community* und darüber hinaus präsent, und die Voraussetzungen für die konzipierte horizontale Vernetzung sind gegeben.
- Die Integration in die Kommunikation und die abgestimmten Weiterentwicklungen auf diesem Gebiet der wissenschaftlichen Infrastruktur.

Der von der Fachinformation betreute Hyper-G-Server, der mit dem Browser Harmony (Unix-Clients) bzw. Amadeus (PC-Clients), aber auch aus der WWW-Welt via Netscape oder Mosaic erreichbar ist, enthält u.a. Informationen zum Institutsprofil, zu Publikationen und Veranstaltungen (siehe Abbildung).

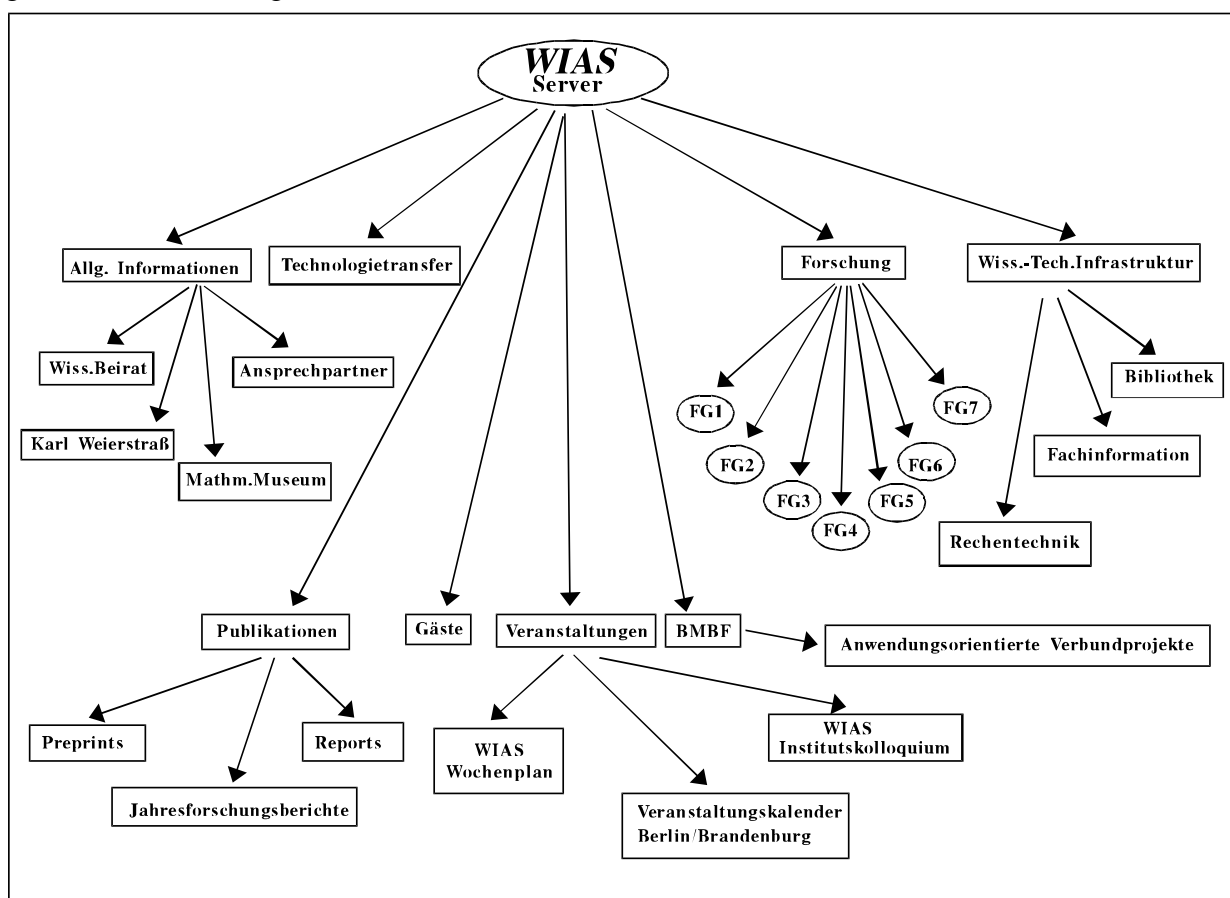


Abb. 1: Struktur des Hyper-G-Servers des WIAS, URL <http://hyperg.wias-berlin.de>

## Literatur

1. T. Cierzynski: *Neue Aspekte und Tools der Informationsvermittlung mittels globaler elektronischer Netzwerke in der Mathematik*, Berlin, Weierstraß-Institut, 1995 (Vortrag und interner Bericht).

### 4.3 Rechentechnik

Die Gruppe Rechentechnik besteht aus fünf Mitarbeitern. Zwei Mitarbeiter sind für die technische Betreuung der Rechner und deren Verkabelung zuständig und zwei Mitarbeiter kümmern sich um die Softwarebetreuung der 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-Informationendienste (HyperG, WWW, FTP).

Als Rechentechnik sind folgende Geräte installiert (in Klammern stehen die entsprechenden Zahlen des Jahres 1994) :

- 60 (50) PC ( 5 x 80386, 43 x 80486, 12 x Pentium) mit MS-DOS und MS Windows
- 2 (11) DEC VAX (1x 3600, 1 x 4000-300) unter OpenVMS
- 31 (17) DEC Alpha (2 x 3000-300X, 5 x 3000-400, 1 x 3000-500, 8 x 3000-600, 1 x 3000-700, 1 x 3000-800, 11 x 200 4/233, 2 x 1000 4/233) unter DEC UNIX (28), Windows NT (2), OpenVMS (1)
- 15 (10) Silicon Graphics (8 x Indigo, 4 x Indigo2, 1 x Crimson, 1 x ChallengeM, 1 x Onyx1) unter IRIX
- 10 (11) SUN (4 x SPARC 2, 5 x SPARC 10, 1 x SUNserver 630) unter SunOS
- 1 (0) HP (1 x HP 9000/715) unter HP UX
- 2 (1) PARSYTEC Transputersysteme (1 x Multicluster2 mit 32 Knoten, 1 x PowerXplorer mit 8 Knoten)

Neben dem Einsatz immer leistungsfähigerer Workstations und PCs bestimmten folgende Projekte die Entwicklung der Rechentechnik des WIAS im Jahr 1995 :

#### 1. Installation des ATM-Backbones

Das 1995 installierte Backbone besteht aus einem ATM-Switch (ASX200) sowie 6 Access-Switches (LAX20) der Firma Fore. Zunächst sind alle Maschinen mit ihren Ethernet-Interfaces an die LAX20 angeschlossen. Durch die erreichte Strukturierung des Netzes ist die Stabilität wesentlich verbessert worden. Außerdem ist eine Verbesserung des Durchsatzes zu beobachten. Diese wird sich durch direkten Anschluß wesentlicher Server an das ATM-Backbone spürbar erhöhen.

#### 2. Client-Server Architektur

Die Client-Server Architektur wurde weiter durchgesetzt. So wurden ein NFS-File-Server (2 x DEC 1000 4/233 + StorageWorks), ein Boot-Server für X-Terminals (HP 9000/715) sowie ein FTP-WWW-HyperG-Server (ChallengeM) installiert. Durch den Einsatz des File-Servers wurden die Abhängigkeiten der verschiedenen Architekturen (DEC, SGI, SUN) beseitigt, wodurch eine größere Stabilität des Gesamtsystems erreicht wurde. Durch die redundant konfigurierte Hardware wird in Verbindung mit der Software DECsafe/ASE eine sehr hohe

Verfügbarkeit des File-Servers auch bei Ausfall einzelner Komponenten erreicht. Mit dem File-Server wurde eine stabile und leistungsfähige Backup-Lösung für alle Nutzerdaten und die Systemdaten der Boot-Server installiert.

### 3. Grafiklabor

Mit der Einrichtung des Grafiklabors wurde begonnen. Als Grafikrechner wurde eine Onyx/1 mit Reality Engine2 installiert. Der Arbeitsplatz des für das Grafiklabor zuständigen Mitarbeiters wurde mit einer Indigo2 mit Elan-Grafik ausgestattet. Außerdem wurde ein Farbblaserdrucker Tektronix 540+ beschafft.

### 4. Netzmanagement

Es wurde HP OpenView als Netzmanagement-Software installiert. Für das spezielle Management der wesentlichen Netzkomponenten wird ForeView sowie CiscoWorks eingesetzt. Durch die Nutzung dieser Software ergeben sich wesentlich bessere Möglichkeiten der Lokalisierung von Fehlern und Engpässen im Netz einschließlich des ATM-Backbones.

### 5. Umstellung auf UNIX

Die Umstellung der Rechner auf UNIX-Systeme ist im wesentlichen abgeschlossen worden. Dabei wurde die Gruppe Rechentechnik tatkräftig von einigen Mitarbeitern des Institutes unterstützt. Diese Mitarbeiter bildeten zusammen mit Kollegen der Gruppe Rechentechnik die „Unix Support Group“.

Einzelne Dienste werden aus verschiedenen Gründen noch von VMS-Rechnern erbracht. Sobald diese Dienste von UNIX-Rechnern verfügbar sind werden die VMS-Rechner abgeschaltet.

### 6. BRAIN-Konsortium

Das Institut ist Mitglied im BRAIN-Konsortium geworden. Mit der Schaffung der technischen Voraussetzungen für den Anschluß an das Berliner MAN wurde begonnen. Durch die Realisierung dieses Projektes ist eine wesentliche Steigerung der Bandbreite des WIN-Anschlusses zu erwarten. Außerdem verbessern sich die Zugriffsbedingungen zu der Technik im ZIB.

## 5 Publikationen, wissenschaftliches Leben

### 5.1 Veröffentlichungen

- [1] H. BABOVSKY, *An inverse model problem in kinetic theory*, Inverse Problems, 11 (1995), pp. 555–570.
- [2] H. BABOVSKY, M. RESCH, *Workstation clustering: A powerful tool for numerical simulation in flight sciences and space research*, Flugwiss. Weltraumforschung, 19 (1995), pp. 253–258.
- [3] H. G. BOTHE, *The Hausdorff dimension of certain solenoids*, Ergodic Theory Dynamical Systems, 15 (1995), pp. 449–474.
- [4] A. BOVIER, V. GAYRARD, P. PICCO, *Gibbs states of the Hopfield model with extensively many patterns*, J. Statist. Phys., 79 (1995), pp. 395–414.
- [5] —, *Large deviation principles for the Hopfield and the Kac-Hopfield model*, Probab. Theory Related Fields, 101 (1995), pp. 511–546.
- [6] A. BOVIER, J.-M. GHEZ, *Remarks on the spectral properties of tight-binding and Kroning-Penney models with substitution sequences*, J. Phys. A, 28 (1995), pp. 2313–2324.
- [7] —, *Schroedinger operators generated by substitutions*, in Proc. of the 5th International Conference on Quasicrystals, 22-26 May 1995, Avignon, France, C. Janot, R. Mosseri, eds., World-Scientific, Singapore, 1995.
- [8] G. BRUCKNER, *On the regularization of the ill-posed logarithmic kernel integral equation of the first kind*, Inverse Problems, 11 (1995), pp. 65–77.
- [9] N. BUBNER, *A mathematical model for deformation-driven experiments on shape memory alloys*, in Computational Modelling of Free and Moving Boundary Problems III, L. Wrobel, B. Sarler, C. Brebbia, eds., Computational Mechanics Publications, Southampton, Boston, 1995, pp. 109–116.
- [10] —, *Modellierung dehnungsgesteuerter Phasenübergänge in Formgedächtnislegierungen*, Berichte aus der Mathematik, Shaker Verlag, Aachen, 1995. Dissertationsschrift.
- [11] K. BÜHRING, *A quadrature method for the hypersingular integral equation on an interval*, J. Integral Equations Appl., 7 (1995), pp. 263–301.
- [12] P. COLLI, J. SPREKELS, *Global solution to the full one-dimensional Frémond model for shape memory alloys*, Math. Methods Appl. Sci., 18 (1995), pp. 371–385.
- [13] —, *On a Penrose-Fife model with zero interfacial energy leading to a phase-field system of relaxed Stefan type*, Annali di Matematica pura ed applicata, CLXIX (1995), pp. 269–289.

- [14] D. DAWSON, K. FLEISCHMANN, *Super-Brownian motions in higher dimensions with absolutely continuous measure states*, J. Theoret. Probab., 8 (1995), pp. 179–206.
- [15] D. DAWSON, K. FLEISCHMANN, J.-F. LEGALL, *Super-Brownian motions in catalytic media*, in Branching processes: Proc. of the First World Congress, C. Heyde, ed., 1995, pp. 122–134. vol. 99 of Lecture Notes in Statistics, Springer.
- [16] R. DUDUCHAVA, S. PRÖSSDORF, *On the approximation of singular integral equations by equations with smooth kernels*, Integral Equations Operator Theory, 21 (1995), pp. 224–237.
- [17] D. ELLIOTT, S. PRÖSSDORF, *An algorithm for the approximate solution of integral equations of Mellin type*, Numer. Math., 70 (1995), pp. 427–452.
- [18] J. ELSCHNER, I. GRAHAM, *An optimal order collocation method for first kind boundary integral equations on polygons*, Numer. Math., 70 (1995), pp. 1–31.
- [19] K. FLEISCHMANN, J.-F. LEGALL, *A new approach to the single point catalytic super-Brownian motion*, Probab. Theory Related Fields, 102 (1995), pp. 63–82.
- [20] H. GAJEWSKI, *On the uniqueness of solutions to the drift-diffusion model of semiconductor devices*, Math. Methods Appl. Sci., 4 (1995), pp. 121 – 133.
- [21] G. HEBERMEHL, *Portabilität und Adaption von Software der linearen Algebra für Distributed Memory Computer*, in Software Engineering im Scientific Computing, W. Mackens, S. M. Rump, eds., Universität Hamburg, 1995, pp. 31–33.
- [22] G. HEBERMEHL, F.-K. HÜBNER, *Basic Linear Algebra Communication Subprograms (BLACS) for the PowerXplorer*, in PowerXplorer User Report, J. Knop, P. Schreiber, eds., Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, 1995, pp. 258–262.
- [23] F. HERZEL, K.-E. EHWALD, B. HEINEMANN, D. KRÜGER, R. KURPS, W. RÖPKE, H.-P. ZEINDL, *Deconvolution of narrow boron SIMS depth profiles in Si and SiGe*, Surface and interface analysis, 23 (1995), pp. 764–770.
- [24] D. HÖMBERG, *A mathematical model for the phase transitions in eutectoid carbon steel*, IMA J. Appl. Math., 54 (1995), pp. 31–57.
- [25] D. HORN, *Entwicklung eines Solvers für große Systeme von Differentialgleichungen der chemischen Verfahrenstechnik auf Parallelrechnern*, in Software Engineering im Scientific Computing, W. Mackens, S. M. Rump, eds., Universität Hamburg, 1995, pp. 37–38.
- [26] D. IOFFE, *Exact large deviation bounds up to  $t_c$  for the Ising model in two dimensions*, Probab. Theory Related Fields, 102 (1995), pp. 313–330.
- [27] H.-C. KAISER, J. REHBERG, *On stationary Schrödinger–Poisson equations*, Z. Angew. Math. Mech., 75 (1995), pp. 467–468.
- [28] KARMESHU, H. SCHURZ, *Effects of distributed delays on the stability of structures under seismic excitation and multiplicative noise*, SADHANA, 20 (1995), pp. 451–474,.

- [29] —, *Stochastic stability of structures under active control with distributed time delays*, in Applications of Statistics and Probability, M. Lemaire, J. L. Favre, A. Mebarki, eds., A.A. Balkema Publishers, Rotterdam, 1995, pp. 1111–1119.
- [30] B. KHOROMSKIJ, S. PRÖSSDORF, *Multilevel preconditioning on the refined interface and optimal boundary solvers for the Laplace equation*, Advances in Computational Mathematics, 4 (1995), pp. 331–355.
- [31] O. KLEIN, *Stability and uniqueness results for a numerical approximation of the thermo-mechanical phase transitions in shape memory alloys*, Adv. Math. Sci. Appl., 5 (1995), pp. 91–116.
- [32] P. KNABNER, C. J. VAN DUIJN, S. HENGST, *An analysis of crystal dissolution fronts in flows through porous media. Part 1: Compatible boundary conditions*, Adv. Water Resources, 18 (1995), pp. 171–185.
- [33] D. KRÜGER, J. SCHLOTE, W. RÖPKE, R. KURPS, C. QUICK, *Shallow junction formation by phosphorus diffusion from in situ spike-doped chemical vapor deposited amorphous silicon*, Microelectronic Engineering, 26 (1995), pp. 119–129.
- [34] A. KUNOTH, *Multilevel preconditioning – Appending boundary conditions by Lagrange multipliers*, Adv. Comp. Math., Special Issue Multiscale Meth., 4 (1995), pp. 145–170.
- [35] O. LEPSKI, V. SPOKOINY, *Local adaptivity to inhomogeneous smoothness. Resolution level*, Math. Methods Statistics, 4 (1995), pp. 239 – 258,.
- [36] G. N. MILSTEIN, *Numerical Integration of Stochastic Differential Equations*, Kluwer Academic Publishers, The Netherlands, 1995.
- [37] —, *The solution of the first boundary value problem for parabolic equations by integration of stochastic equations*, Theory Probab. Appl., 40 (1995), pp. 657–665.
- [38] —, *The solving of boundary value problems by numerical integration of stochastic equations*, Math. Comp. Simulation, 38 (1995), pp. 77–85.
- [39] G. N. MILSTEIN, L. B. RYASHKO, *A first approximation of the quasipotential in problems of the stability of systems with random non-degenerate perturbations*, J. Appl. Math. Mech., 59 (1995), pp. 47–56.
- [40] R. MODEL, R. HÜNLICH, M. ORLT, M. WALZEL, *Image reconstruction for random media by diffusion tomography*, Proc. SPIE, 2389 (1995), pp. 400–410.
- [41] R. MODEL, R. HÜNLICH, D. RICHTER, H. RINNEBERG, H. WABNITZ, M. WALZEL, *Imaging in random media: Simulating light transport by numerical integration of the diffusion equation*, Proc. SPIE, 2326 (1995), pp. 11–22.
- [42] H.-J. MUCHA, *Xclust: Clustering in an interactive way*, in XploRe: an Interactive Statistical Computing Environment, W. Härdle, S. Klinke, B. A. Turlach, eds., Springer-Verlag, New York, 1995, pp. 141–168, Series Statistics and Computing.

- [43] W. MÜLLER, K. R. SCHNEIDER, *Application of center manifold theory to the feedback stabilization of nonlinear discrete-time systems*, Z. Angew. Math. Mech., 75 – SI (1995), pp. S95 – S96.
- [44] M. NEUMANN, V. SPOKOINY, *On the efficiency of wavelet estimators under arbitrary error distributions*, Math. Methods Statistics, 4 (1995), pp. 137 – 166.
- [45] M. H. NEUMANN, *Discussion to the paper “Wavelet shrinkage: Asymptopia?” by Donoho et. al.*, J. Roy. Statist. Soc. Ser. B, 57 (1995), pp. 346–347.
- [46] M. H. NEUMANN, R. V. SACHS, *Wavelet thresholding: Beyond the Gaussian i.i.d. situation*, in Wavelets and Statistics, A. Antoniadis, ed., Lecture Notes in Statistics, Springer, 1995.
- [47] M. NUSSBAUM, *Discussion to the paper “Wavelet shrinkage: Asymptopia?” by Donoho et. al.*, J. Roy. Statist. Soc. Ser. B, 57 (1995), pp. 348–349.
- [48] A. RATHSFELD, *Nyström’s method and iterative solvers for the solution of the double-layer potential equation over polyhedral boundaries*, SIAM J. Numer. Anal., 32 (1995), pp. 924–951.
- [49] ———, *A wavelet algorithm for the solution of the double layer potential equation over polygonal boundaries*, J. Integral Equations Appl., 7 (1995), pp. 47–98.
- [50] L. RECKE, *Applications of the implicit function theorem to quasilinear elliptic boundary value problems with non-smooth data*, Comm. Partial Differential Equations, 20 (1995), pp. 1457 – 1479.
- [51] J. REHBERG, H.-C. KAISER, *About a stationary Schrödinger–Poisson system modeling quantum structures*, in The Fourth International Seminar on Simulation of Devices and Technologies, ISSDT’95, Berg–en–Dal, South Africa, 15 – 17 November 1995, Carl and Emily Fuchs Institute for Microelectronics (CEFIM) – University of Pretoria –, Nov. 1995, pp. 174–177.
- [52] G. REINHARDT, F.-K. HÜBNER, *Zur Nutzung standardisierter numerischer Basis-Software auf Workstations*, in Software Engineering im Scientific Computing, W. Mackens, S. M. Rump, eds., Universität Hamburg, 1995, pp. 75–77.
- [53] B. SANDSTEDTE, A. SCHEEL, *Forced symmetry breaking of homoclinic cycles*, Nonlinearity, 8 (1995), pp. 333 – 365.
- [54] J. SCHLOTE, K. TITTELBACH-HELMRICH, B. TILLACK, B. KUCK, R. HÜNLICH, *Systematic classification of LPCVD processes*, J. Physique II, C5 (1995), pp. C5–283–C5–290.
- [55] J. SCHMELING, R. WINKLER, *Typical dimension of the graph of certain functions*, Monatsh. Math., 119 (1995), pp. 303–320.
- [56] E. THOMÄ, R. TRIBIAHN, *Entwicklungen bei Patentdatenbanken*, Nachr. Dokumentation, 46 (1995), pp. 331–340.

- [57] —, *Online-Patentdatenbanken: Vergleich von Inhalt, Struktur und Recherchemöglichkeiten*, in 17. Online-Tagung der DGD : „Online und darüber hinaus ... Tendenzen der Informationsvermittlung“, Frankfurt am Main, 1995, Deutsche Gesellschaft für Dokumentation, pp. 139–154.
- [58] W. WAGNER, *Approximation of the Boltzmann equation by discrete velocity models*, J. Statist. Phys., 78 (1995), pp. 1555–1570.
- [59] —, *Random discrete velocity models and particle simulation schemes for the Boltzmann equation*, in Rarefield Gas Dynamics, J. Harvey, G. Lord, eds., Oxford University Press, Oxford, 1995, pp. 836–842.
- [60] —, *Stochastic particle methods and approximation of the Boltzmann equation*, Math. Comp. Simulation, 38 (1995), pp. 211–216.



## 5.2 Preprints, Reports

### 5.2.1 WIAS-Preprint-Serie

#### Preprints 1995<sup>1</sup>

- [139] Werner Horn, Jan Sokolowski, Jürgen Sprekels: Control problems with state constraints for the Penrose–Fife phase–field model.
- [140] Hans Babovsky: Simulation of kinetic boundary layers.
- [141] Ralf Kornhuber: A posteriori error estimates for elliptic variational inequalities.
- [142] Johannes Elschner, Youngmok Jeon, Ian H. Sloan, Ernst P. Stephan: The collocation method for mixed boundary value problems on domains with curved polygonal boundaries.
- [143] Johannes Elschner, Ernst P. Stephan: A discrete collocation method for Symm’s integral equation on curves with corners.
- [144] Dietmar Hömberg: A numerical simulation of the Jominy end–quench test.
- [145] Sabine Hengst: On the existence of classical solutions for a two phase flow through saturated porous media.
- [146] Anton Bovier, Véronique Gayraud: An almost sure large deviation principle for the Hopfield model.
- [147] Hans Babovsky: Limit theorems for deterministic Knudsen flows between two plates.
- [148] Björn Sandstede: Stability of multiple–pulse solutions.
- [149] Björn Sandstede: Constructing dynamical systems possessing homoclinic bifurcation points of codimension two.
- [150] Boris N. Khoromskij, Siegfried Prössdorf: Multilevel preconditioning on the refined interface and optimal boundary solvers for the Laplace equation.
- [151] Anton Bovier, Christof Külske: There are no nice interfaces in 2+1 dimensional SOS–models in random media.
- [152] Ilja Schmelzer: Covariant geometry description.
- [153] Alexander Korostelev, Michael Nussbaum: Density estimation in the uniform norm and white noise approximation.
- [154] Peter Hall, Michael Nussbaum, Steven E. Stern: On the estimation of a support curve of indeterminate sharpness.

---

<sup>1</sup>[http://hyperg.wias-berlin.de/WIAS\\_publications/preprints\\_1995](http://hyperg.wias-berlin.de/WIAS_publications/preprints_1995)

- [155] Lev D. Pustyl'nikov: On the stability of solutions and absence of Arnol'd diffusion in a nonintegrable Hamiltonian system of a general form with three degrees of freedom.
- [156] Ralf Kornhuber: Adaptive monotone multigrid methods for some non-smooth optimization problems.
- [157] Sergej Rjasanow, Wolfgang Wagner: A generalized collision mechanism for stochastic particle schemes approximating Boltzmann type equations.
- [158] Nikolai Nefedov, Klaus Schneider: Singularly perturbed systems: Case of exchange of stability.
- [159] Rainer Dahlhaus, Michael H. Neumann, Rainer von Sachs: Nonlinear wavelet estimation of time-varying autoregressive processes.
- [160] Henri Schurz: Numerical regularization for SDEs: Construction of nonnegative solutions.
- [161] Anton Bovier, Véronique Gayraud: The retrieval phase of the Hopfield model: A rigorous analysis of the overlap distribution.
- [162] Boris N. Khoromskij, Gunther Schmidt: A fast interface solver for the biharmonic Dirichlet problem on polygonal domains.
- [163] Michael H. Neumann: Optimal change-point estimation in inverse problems.
- [164] Dmitry Ioffe: A note on the extremality of the disordered state for the Ising model on the Bethe lattice.
- [165] Donald A. Dawson, Klaus Fleischmann: A continuous super-Brownian motion in a super-Brownian medium.
- [166] Norbert Hofmann, Peter Mathé: On quasi-Monte Carlo simulation of stochastic differential equations.
- [167] Henri Schurz: Modelling, analysis and simulation of stochastic innovation diffusion.
- [168] Annegret Glitzky, Rolf Hünlich: Energetic estimates and asymptotics for electro-reaction-diffusion systems.
- [169] Pierluigi Colli, Jürgen Sprekels: Remarks on the existence for the one-dimensional Frémond model of shape memory alloys.
- [170] Klaus R. Schneider, Adelaida B. Vasil'eva: On the existence of transition layers of spike type in reaction-diffusion-convection equations.
- [171] Nikolaus Bubner: Landau-Ginzburg model for a deformation-driven experiment on shape memory alloys.
- [172] Reiner Lauterbach: Symmetry breaking in dynamical systems.
- [173] Reiner Lauterbach, Stanislaus Maier-Paape: Heteroclinic cycles for reaction diffusion systems by forced symmetry-breaking.

- [174] Michael Nussbaum: Asymptotic equivalence of density estimation and Gaussian white noise.
- [175] Alexander A. Gushchin: On efficiency bounds for estimating the offspring mean in a branching process.
- [176] Vladimir G. Spokoiny: Adaptive hypothesis testing using wavelets.
- [177] Vladimir Maz'ya, Gunther Schmidt: "Approximate approximations" and the cubature of potentials.
- [178] Sergey V. Nepomnyaschikh: Preconditioning operators on unstructured grids.
- [179] Hans Babovsky: Discretization and numerical schemes for stationary kinetic model equations.
- [180] Gunther Schmidt: Boundary integral operators for plate bending in domains with corners.
- [181] Karmeshu, Henri Schurz: Stochastic stability of structures under active control with distributed time delays.
- [182] Martin Krupa, Björn Sandstede, Peter Szmolyan: Fast and slow waves in the FitzHugh–Nagumo equation.
- [183] Alexander P. Korostelev, Vladimir Spokoiny: Exact asymptotics of minimax Bahadur risk in Lipschitz regression.
- [184] Youngmok Jeon, Ian H. Sloan, Ernst P. Stephan, Johannes Elschner: Discrete qualocation methods for logarithmic–kernel integral equations on a piecewise smooth boundary.
- [185] Michael S. Ermakov: Asymptotic minimaxity of chi–square tests.
- [186] Björn Sandstede: Center manifolds for homoclinic solutions.
- [187] Steven N. Evans, Klaus Fleischmann: Cluster formation in a stepping stone model with continuous, hierarchically structured sites.
- [188] Sybille Handrock–Meyer: Identifiability of distributed parameters for a class of quasilinear differential equations.
- [189] James C. Alexander, Manoussos G. Grillakis, Christopher K.R.T. Jones, Björn Sandstede: Stability of pulses on optical fibers with phase–sensitive amplifiers.
- [190] Wolfgang Härdle, Vladimir G. Spokoiny, Stefan Sperlich: Semiparametric single index versus fixed link function modelling.
- [191] Oleg Lepskii, Enno Mammen, Vladimir G. Spokoiny: Optimal spatial adaptation to inhomogeneous smoothness: An approach based on kernel estimates with variable bandwidth selectors.
- [192] William McLean, Siegfried Prößdorf: Boundary element collocation methods using splines with multiple knots.

- [193] Michael H. Neumann, Rainer von Sachs: Wavelet thresholding in anisotropic function classes and application to adaptive estimation of evolutionary spectra.
- [194] Gottfried Bruckner, Siegfried Prößdorf, Gennadi Vainikko: Error bounds of discretization methods for boundary integral equations with noisy data.
- [195] Joachim Förste: Das transversale Feld in einem Halbleiterinjektionslaser.
- [196] Anatolii Puhalskii, Vladimir G. Spokoiny: On large deviation efficiency in statistical inference.
- [197] Klaus Fleischmann, Carl Mueller: A super-Brownian motion with a locally infinite catalytic mass.
- [198] Björn Sandstede: Convergence estimates for the numerical approximation of homoclinic solutions.
- [199] Olaf Klein: A semidiscrete scheme for a Penrose-Fife system and some Stefan problems in  $\mathbb{R}^3$ .
- [200] Hans Babovsky, Grigori N. Milstein: Transport equations with singularity.
- [201] Elena A. Lyashenko, Lev B. Ryashko: On the regulators with random noises in dynamical block.
- [202] Sergei Leonov: On the solution of an optimal recovery problem and its applications in nonparametric statistics.
- [203] Jürgen Fuhrmann: A modular algebraic multilevel method.
- [204] Rolf Hünlich, Regine Model, Matthias Orlt, Monika Walzel: Inverse problems in optical tomography.
- [205] Michael H. Neumann: On the effect of estimating the error density in nonparametric deconvolution.
- [206] Wolfgang Dahmen, Angela Kunoth, Reinhold Schneider: Operator equations, multiscale concepts and complexity.
- [207] Annegret Glitzky, Konrad Gröger, Rolf Hünlich: Free energy and dissipation rate for reaction diffusion processes of electrically charged species.
- [208] Jörg Schmeling: A dimension formula for endomorphisms – The Belykh family.
- [209] Alfred Liemant: Leitfähigkeit eindimensionaler periodischer elektrischer Netze.
- [210] Günter Albinus: A thermodynamically motivated formulation of the energy model of semiconductor devices.
- [211] Dmitry Ioffe: Extremality of the disordered state for the Ising model on general trees.
- [212] Stefan Seelecke: Equilibrium thermodynamics of pseudoelasticity and quasiplasticity.

### 5.2.2 Preprints/Reports an anderen Einrichtungen

- [1] E. ARGE, A. KUNOTH, *An efficient ADI-solver for scattered data problems with global smoothing*, Tech. Report SINTEF STF33 A95015, Oslo, Juni 1995, erscheint in: Numerical Methods and Software Tools in Industrial Mathematics.
- [2] H. G. BOTHE, *How 1-dimensional hyperbolic attractors determine their basins*, Preprint 11, Schwerpunktprogramm der DFG: Dynamik, 1995.
- [3] A. BOVIER, J.-M. GHEZ, *Schrödinger operators generated by substitutions*, Preprint CPT-95/P.3213, CPT-Marseille, 1995.
- [4] A. CHAMPNEYS, Y. KUZNETSOV, B. SANDSTED, HOMCONT: *An AUTO86 driver for homoclinic bifurcation analysis. Version 2.0.*, Technischer Report AM-R9516, CWI Amsterdam, 1995.
- [5] —, *A numerical toolbox for homoclinic bifurcation analysis*, Research Report 1/95, University of Bristol, 1995. Appl. Nonl. Math. Research Report.
- [6] W. DAHMEN, A. KUNOTH, K. URBAN, *A wavelet-Galerkin method for the Stokes equations*, Tech. Report ISC-95-02-MATH, Institute for Scientific Computation, Texas A&M University, 1995, erscheint in: Computing.
- [7] K. GATERMANN, R. LAUTERBACH, *Automatic classification for normal forms*, Preprint 95-3, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, 1995.
- [8] F. GUYARD, P. CHOSSAT, *Structurally stable heteroclinic cycles in bifurcation problems with  $O(3)$  symmetry and the spherical Bénard problem*, Preprint 95.03, Institut Non Linéaire de Nice, 1995.
- [9] P. HALL, M. NUSSBAUM, S. STERN, *On the estimation of a support curve of indeterminate sharpness*, Tech. Report SRR 039-95, Australian National University, Canberra, 1995.
- [10] M. KRUPA, B. SANDSTED, P. SZMOLYAN, *Fast and slow waves in the Fitzhugh-Nagumo equation*, Forschungsbericht 1, Technische Universität Wien, 1995.
- [11] A. KUNOTH, *Computing integrals of refinable functions – Documentation of the program*, Tech. Report ISC-95-02-MATH, Version 1.1, Institute for Scientific Computation, Texas A&M University, Mai 1995.
- [12] R. LAUTERBACH, J. SANDERS, *Bifurcation analysis using invariant theory*, Preprint, Vrije Universiteit Amsterdam, Dezember 1995.
- [13] O. LEPSKI, V. SPOKOINY, *Minimax nonparametric hypothesis testing: The case of an inhomogeneous alternative*, Tech. Report 44, SFB 373, Humboldt-Universität, Berlin, 1995.
- [14] —, *Optimal pointwise adaptive methods in nonparametric estimation*, Tech. Report 22, SFB 373, Humboldt-Universität, Berlin, 1995.

- [15] O. V. LEPSKI, E. MAMMEN, V. G. SPOKOINY, *Optimal spatial adaptation to inhomogeneous smoothness: An approach based on kernel estimates with variable bandwidth selection*, Tech. Report 3, SFB 373, Humboldt–Universität, Berlin, 1995.
- [16] M. H. NEUMANN, R. V. SACHS, *Wavelet thresholding in anisotropic function classes and application to adaptive estimation of evolutionary spectra*, Tech. Report Discussion Paper 24/95, SFB 373, Humboldt–Universität, Berlin, 1995.

### 5.3 Mitherausgabe von Zeitschriften

- H.G. Bothe, *Mathematische Nachrichten*, Akademie Verlag GmbH, Berlin.
- H. Gajewski, Advisory Board, *Mathematische Nachrichten*, Akademie Verlag GmbH, Berlin.
- ———, Editorial Board, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Akademie Verlag GmbH, Berlin.
- ———, Herausgeber, *Teubner-Texte zur Mathematik*, B. G. Teubner Verlagsgesellschaft mbH, Leipzig.
- M. Nussbaum, Editorial Board, *Annals of Statistics*, Institute of Mathematical Statistics, Hayward, Ca.
- ———, Comité de Rédaction, *Annales de l'Institut Henri Poincaré, Probabilités et Statistiques*, Editions Gauthiers-Villars, Paris.
- S. Pröbldorf, *Complex Variables: Theory and Applications*, Gordon and Breach Science Publishers, New York.
- ———, *Journal of Integral Equations and Applications*, The Rocky Mountain Mathematics Consortium, Lubbock.
- ———, *Mathematische Nachrichten*, Akademie Verlag GmbH, Berlin.
- ———, *Zeitschrift für Analysis und ihre Anwendungen*, Johann Ambrosius Barth Verlag, Edition Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin.
- J. Sprechels, Editorial Board, *Advances in Mathematical Sciences and Applications*, Gakkōtoshō, Tokio.
- W. Wagner, *Monte Carlo Methods and Applications*, Editorial Board, VSP, Utrecht,

## 5.4 Vorträge und Gastaufenthalte von Mitarbeitern

1. **G. Albinus**, *Nonlinear Galerkin methods for evolution equations with Lipschitz continuous strongly monotone operators*, International Conference „Function Spaces, Theory of Approximation, Nonlinear Analysis“, Moskau, 27. April 1995.
2. ———, *Thermodynamics of energy models of semiconductor devices*, ICIAM '95, Hamburg, 4. Juli 1995.
3. ———, *Thermodynamik der Energiemodelle für Halbleiter*, Workshop „Numerische Simulation von Mikrostrukturen und elektronischen Bauelementen“, Schloß Reisenburg, 17. Juli 1995
4. ———, *Nonlinear Galerkin methods for evolution equations*, 6-th International Colloquium on Differential Equations, Plovdiv, 21. August 1995.
5. **G. Albinus, Cl. Herrmann, G. Richter**, *Refinement of bandwidth-limited diode laser spectroscopy by adiabatic chirp*, International Conference on Tunable Diode Laser Spectroscopy, Moskau, 10. Juli 1995.
6. **R. Antonova, I. Bremer**, *Prinzipien maschinenunabhängiger Programmierung und Werkzeuge für die Entwicklung plattformunabhängiger graphischer Oberflächen – z.B. XVT-Power++ Benutzeroberfläche zur Darstellung einer Simulation von Copolymerprozessen*, Workshop „Standardisierung anwendungsorientierter Software“, Wissenschaftliches Zentrum - Thurnau, Bayreuth, 28. März 1995.
7. ———, *Ein DAE-System zur Simulation von Copolymerisationsprozessen*, Workshop „DAE - Koordinationstreffen, WIAS, Berlin, 13. Juni 1995.
8. ———, *Modeling and simulation of copolymerisation processes and discrete weighted residual methods*, ICIAM '95, Hamburg, Postervortrag am 7. Juli 1995.
9. ———, *Projektionsverfahren zur Simulation von Copolymerisationsprozessen*, Statusseminar der anwendungsorientierten Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik des BMBF, Forschungs- und Ingenieurzentrum der BMW AG, München, Postervortrag am 26. Oktober 1995.
10. **H. Babovsky**, *Zur numerischen Integration von Transportgleichungen*, TU Ilmenau, 23. Januar 1995.
11. ———, *Limit theorems for flows between parallel planes*, Workshop on kinetic equations, Universität Kaiserslautern, 13. Juni 1995.
12. ———, *Numerik kinetischer Gleichungen*, Universität Jena, 1. Juli 1995.
13. ———, *Inverse problems in kinetic theory*, ICIAM '95, Hamburg, 5. Juli 1995.
14. ———, *Mathematische Modellierung von Transportphänomenen*, TU Karlsruhe, 13. Juli 1995.
15. ———, *Diffusionslimites für deterministische Flüsse in dünnen Schichten*, DMV-Jahrestagung, Ulm, 19. September 1995.



16. ———, *Probleme der Strömungsmechanik in der Luft- und Raumfahrt*, BMBF Bonn, 27. November 1995.
17. **U. Bellack**, *Geometry and measure on a non-hyperbolic attractor*, Jahrestagung des Forschungsschwerpunktes Dynamik, Bad Windsheim, 12. Juni 1995.
18. **J. Borchardt, F. Grund, D. Horn, T. Michael, H. Sandmann**, (Poster), *Modellierung und Simulation von Quantum-Well-Halbleiterlasern*, Statusseminar „Anwendungsorientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik“, München, 26. Oktober 1995.
19. **A. Bovier**, *Schrödinger operators generated by substitutions*, CEN-Saclay, 24. Januar 1995.
20. ———, *Concentration of measure and large deviation inequalities in the Hopfield model*, ETH-Zürich, 25. Januar 1995.
21. ———, *Introduction to the Hopfield model*, Universita Karlova, Prag, 29. März 1995.
22. ———, *An almost sure large deviation principle for the Hopfield model*, Marc-Kac-Seminar, Utrecht, 12. Mai 1995.
23. ———, *Random matrices and the Hopfield model*, Workshop „Random matrices, disordered systems, and quantum chaos“, Bad Honnef, 19. Mai 1995.
24. ———, *Interfaces en milieux aléatoires*, Centre de Physique Théorique, Marseille, 27. Juni 1995.
25. ———, *Rigorous results on the low-temperature phase of the Hopfield model*, Workshop „Probability and Physics“, Renkum, 28. August 1995.
26. ———, *On the Kac-Hopfield model*, Workshop „Gibbs random fields and phase transitions“, Churanov, 2. Oktober 1995.
27. ———, *Interfaces in random media*, Workshop „Large deviations and statistical mechanics“, Bielefeld, 21. Oktober 1995.
28. **H. G. Bothe**, *Kuperberg's counterexample to the Seifert Conjecture*, Workshop on homoclinic and heteroclinic phenomena and their reduction to low dimensional dynamics, Berlin, 16. März 1995.
29. ———, *Shift spaces in non invertible horse shoes*, Jahrestagung des Forschungsschwerpunktes Dynamik, Bad Windsheim, 12. Juni 1995.
30. ———, *Attraktoren und ihre Einzugsbereiche*, Kolloquium des FB Mathematik, FU Berlin, 9. November 1995.
31. ———, *Nicht eindeutige Hufeisenabbildungen und symbolische Dynamik*, Kolloquium, TU Dresden, 28. November 1995.
32. **G. Bruckner**, *Zur Stabilisierung von trigonometrischen Kollokationsmethoden für eine Klasse von Integralgleichungen erster Art*, Symposium zu Inversen Problemen, Mathematische Methoden und Anwendungen, Chemnitz, 14. März 1995.

33. ———, *A decomposition method for the numerical solution of ill-posed linear first kind integral equations*, ICIAM '95, Hamburg, 6. Juli 1995.
34. **N. Bubner**, *A mathematical model of deformation-driven experiments on shape memory alloys*, Tagung Moving Boundaries '95, Computational Modelling of Free and Moving Boundary Problems, Bled, Slowenien, 29. Juni 1995.
35. ———, *A mathematical model of deformation-driven experiments on shape memory alloys*, ICIAM '95, Hamburg, 5. Juli 1995.
36. ———, *Simulations numériques des transitions de phases dans des alliages à mémoire de forme*, Université Nancy 1, 7. November 1995.
37. **J. Elschner**, *Optimal order approximation methods for boundary integral equations on curves with corners*, German–Israeli Workshop „On Linear One-Dimensional Singular Integral Equations“, Tel Aviv, 7. März 1995.
38. ———, *Quadrature methods for Symm's integral equation on polygons*, ICIAM '95, Hamburg, 3. Juli 1995.
39. **K. Fleischmann**, *Räumliche Verzweigungsmodelle in zufälligen Medien*, Forschungsseminar, FB Mathematik, TU Berlin, 7. Juni 1995.
40. ———, *Comparison of interacting diffusions and applications*, Kolloquium „Laboratory of Research in Statistics and Probability“, Carleton University, Ottawa, 24. November 1995.
41. ———, *A super-Brownian motion in a super-Brownian medium*, Tagung „Branching processes“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 20. Dezember 1995.
42. **J. Förste**, *Mathematische Methoden zur Analyse von Instabilitätsphänomenen in Verdichtern*, Institut für Luft- und Raumfahrt, TU Berlin, 11. Januar 1995.
43. **J. Fuhrmann**, *Two phase flow computation using algebraic multilevel methods*, SIAM Conference on Geosciences, San Antonio, 9. Februar 1995.
44. ———, *Algebraic multilevel methods for partial differential equations*, Multilevel Methods and Applications, Oberwolfach, 2. Mai 1995.
45. ———, *On numerical solution methods for nonlinear parabolic problems*, Seminar on Modelling and Computation in Environmental Sciences, ICA Stuttgart, 13. Oktober 1995.
46. ———, *Algebraic multigrid methods for porous media flow*, German-Polish Workshop on Multilevel Methods, WIAS, Berlin, 22. November 1995.
47. **K. Gärtner**, **H. Gajewski**, *On the discretization of van Roosbroeck's equations with magnetic field*, ICIAM '95, Hamburg, 4. Juli 1995.
48. **H. Gajewski**, *Zum inneren Zusammenhang von Modellierung, Funktionalanalysis und Numerik bei der Behandlung von Ladungstransportvorgängen in Halbleitern*, TU München, 26. Januar 1995.

49. **H. Gajewski, H.-Chr. Kaiser, J. Rehberg, H. Stephan**, (Poster), *Modellierung und Simulation von Quantum-Well-Halbleiterlasern*, Statusseminar „Anwendungsorientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik“, München, 26. Oktober 1995.
50. **A. Glitzky**, *Reaktions-Diffusionssysteme elektrisch geladener Spezies: Globale Existenz, Einzigkeit und asymptotisches Verhalten*, SFB 256, Bonn, 18. Mai 1995.
51. ———, *Electro-reaction-diffusion systems for heterostructures*, Postervortrag FBP '95, Zakopane, 16. Juni 1995.
52. **K. Gröger**, *Free energy estimates for reaction diffusion processes*, Tagung „Partielle Differentialgleichungen“, Oberwolfach, 16. August 1995.
53. ———, *Abschätzung der Freien Energie bei Reaktions-Diffusionsprozessen*, Michlin-Gedenkveranstaltung, WIAS, 11. Oktober 1995.
54. **F. Grund**, *DAE's in der chemischen Prozeßsimulation*, Workshop Scientific Computing in der chemischen Verfahrenstechnik, TU Hamburg-Harburg, 2. März 1995.
55. ———, *Sparse-matrix-techniques for vector computer*, ICIAM '95, Hamburg, 3. Juli 1995.
56. ———, *A parallel direct sparse solver for the plant simulation code SPEEDUP*, Workshop Skalierbare Parallelverarbeitung auf Cray-Systemen, Berlin, 7. November 1995.
57. **F. Guyard**, *Bifurcation equations for continuous groups*, Konferenz „Computer Algebra and Dynamical Systems“, RIACA, Amsterdam, 21. Juni 1995.
58. ———, *Heteroclinic cycles in bifurcation problems with  $O(3)$  symmetry*, ICIAM '95, Hamburg, 7. Juli 1995.
59. ———, *Bifurcation equations for continuous groups*, Workshop „Reduction of PDE's: Qualitative Analysis and Numerical Methods“, Tübingen, 19. November 1995.
60. ———, *Heteroclinic cycles in bifurcation problems with  $O(3)$  symmetry*, „Dynamical Systems Conference“, Groningen, 11. Dezember 1995.
61. **S. Handrock-Meyer**, *Application of wavelets to ill-posed problems*, Symposium zu Inversen Problemen, Mathematischen Methoden und Anwendungen, Chemnitz, 13. März 1995.
62. ———, *Identifiability of distributed physical parameters*, Workshop on Parameter Identification and Inverse Problems in Hydrology, Geology and Ecology, Karlsruhe, 10. April 1995.
63. ———, *Some remarks about utilization of wavelets for solving ill-posed problems*, ICIAM '95, Hamburg, 7. Juli 1995.
64. **G. Hebermehl**, *Portabilität und Adaption von Software der Linearen Algebra für Distributed Memory Computer*, Workshop Software Engineering im Scientific Computing, Hamburg, 8. Juni 1995.

65. ———, *Feldtheoretische Simulation von Mikrowellenschaltungen*, DMV-Jahrestagung, Ulm, 21. September 1995.
66. **S. Hengst**, *Zur Existenz klassischer Lösungen für eine Zweiphasenströmung*, DMV-Jahrestagung, Ulm, 18. September 1995.
67. **D. Hömberg**, *An extended model for phase transitions in steel*, Postervortrag FBP 95, Zakopane, 15. Juni 1995.
68. ———, *Mathematische Modellierung der Phasenübergänge in Stahl*, TU Bergakademie Freiberg, 22. Juni 1995.
69. ———, *Controlling the heat treatment of steel*, SOR 95, Passau, 14. September 1995.
70. **D. Horn**, *Entwicklung eines Solvers für große Systeme von Differentialgleichungen der chemischen Verfahrenstechnik auf Parallelrechnern*, Workshop Software Engineering im Scientific Computing, Hamburg, 7. Juni 1995.
71. **R. Hünlich**, *Reaktions-Diffusionssysteme elektrisch geladener Spezies: Energetische Abschätzungen und asymptotisches Verhalten*, SFB 256, Bonn, 18. Mai 1995.
72. ———, *Design und Simulation von Halbleiterbauelementen*, Statusseminar „Anwendungsorientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik“, München, 26. Oktober 1995.
73. ———, *Design und Simulation von Halbleiterbauelementen*, BMBF Bonn, 27. November 1995.
74. **D. Ioffe**, *Limit theorems in statistical mechanical setting*, Technion Haifa, 13. September 1995.
75. ———, *On the 2+1 Gaussian model*, Workshop „Gibbs random fields and phase transitions“, Churanov, 4. Oktober 1995.
76. ———, *Wulff construction and related limit theorems*, Workshop „Large deviations and statistical mechanics“, Bielefeld, 21. Oktober 1995.
77. ———, *Phase separation in the 2D Ising model*, Minikurs, Universität Zürich, 9., 16., 23. und 30. November 1995.
78. ———, *Extremality of the disordered state for the Ising model on general trees*, ETH Zürich, 22. November 1995.
79. ———, *On the shape of harmonic crystals: a microscopic approach*, Berliner Kolloquium Wahrscheinlichkeitstheorie, 20. Dezember 1995.
80. **A. Juhl**, *Zeta-Funktionen und Index-Theorie nicht-elliptischer Komplexe*, Universität Augsburg, 13. Januar 1995.
81. ———, *Dynamische Zeta-Funktionen und ihre kohomologische Theorie I, II*, Clausthal-Zellerfeld, 13./14. Juni 1995.

82. ———, *The transverse structure of the stable foliation*, Internationale Konferenz Differentialgeometrie und Dynamik auf Räumen negativer Krümmung, Tuczno, 14. September 1995.
83. ———, *Index theory for the stable foliation of the geodesic flow and zeta functions*, Kolloquium, Lille, 6. Oktober 1995.
84. ———, *Zeta functions and canonical currents*, Tagung Dynamical zeta functions, CNRS Luminy, Marseille, 11. Oktober 1995.
85. ———, *Selberg zeta and theta functions for locally symmetric spaces of rank 1*, Mittag-Leffler-Institut Stockholm, 16. November 1995.
86. ———, *Zeta functions and index theory for foliations*, Universität Uppsala, 27. November 1995.
87. ———, *Differential geometry on phase spaces, differential intertwining operators and zeta functions*, Mittag-Leffler-Institut Stockholm, 28. November 1995.
88. ———,  *$\Gamma$ -cohomology and zeta functions*, Mittag-Leffler-Institut Stockholm, 5. Dezember 1995.
89. ———, *Zur kohomologischen Theorie Selbergscher Zeta-Funktionen*, Universität Freiburg, 15. Dezember 1995.
90. **H.-Chr. Kaiser**, Poster *About a stationary Schrödinger-Poisson system in nanoelectronics*, 11th GAMM-Seminar on „Numerical Treatment of Coupled Systems“, Kiel, 21. Januar 1995.
91. **H.-Chr. Kaiser, J. Rehberg**, Poster *On the numerical treatment of the 2D stationary Schrödinger-Poisson equation in nanostructure semiconductor device modeling*, ICIAM '95, Hamburg, 3. Juli 1995.
92. ———, *The two dimensional stationary Schrödinger-Poisson equation with mixed boundary conditions in nonsmooth domains*, ICIAM '95, Hamburg, 7. Juli 1995.
93. ———, *About a stationary Schrödinger-Poisson system with Kohn-Sham potential in nanoelectronics*, 6th International Congress on Simulation of Semiconductor Devices and Processes, SISDEP'95, Erlangen, 8. September 1995.
94. **Karmeshu, H. Schurz**, *Stochastic stability of structures under active control with distributed time delays*, 7th International Conference on Applied Statistics and Probability, Paris, 12. Juli 1995.
95. **B. Kleemann**, *On the solution of the Helmholtz and Laplace equations using multiscale methods*, Workshop „Multiscale Methods in Numerical Analysis“, WIAS, Berlin, 30. März 1995.
96. ———, *Die Rolle der Integralgleichungsmethode in der diffraktiven Optik*, Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Angewandte Optik, Binz, 9. Juni 1995.

97. ———, *Integral equation method in diffractive optics: comparison with experiments*, International Workshop on Diffractive Optics, Prag, 22. August 1995.
98. ———, *Die Behandlung der Helmholtz- und Laplace-Gleichung mittels Multiskalenmethoden*, Workshop on Wavelets: Present State and Perspectives, ABB Forschungszentrum Heidelberg, 26. Oktober 1995.
99. **B. Kleemann, R. Güther**, *Zonenbeugungseffektivitäten für Fresnel-Linsen*, Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Angewandte Optik, Binz, 7. Juni 1995.
100. **B. Kleemann, B. Nelles**, *Beugungsgitter mit definierten Polarisationsseigenschaften*, Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Angewandte Optik, Binz, 7. Juni 1995.
101. **R. Kornhuber**, *Nicht-Existenzbeweise und Anwendungen*, Freie Universität Berlin, 8. Februar 1995.
102. ———, *Adaptive Monotone Mehrgittermethoden für Variationsungleichungen*, Universität Magdeburg, 10. März 1995.
103. ———, *A posteriori error estimates for linear and nonlinear problems*, Multilevel Methods and Applications, Oberwolfach, 5. Mai 1995.
104. ———, *Adaptive monotone multigrid methods for elliptic variational inequalities*, 8th International Conference on Domain Decomposition Methods, Peking, 17. Mai 1995.
105. ———, *Monotone multigrid methods for non-smooth optimization problems*, FBP '95, Zakopane, 15. Juni 1995.
106. ———, *Monotone multigrid methods for some free boundary problems*, Workshop on Numerical and Computational Methods for Free Boundary Problems, Freiburg, 4. September 1995.
107. ———, *Monotone multigrid methods for porous media flow*, Seminar on Modelling and Computation in Environmental Sciences. ICA Stuttgart, 12. Oktober 1995.
108. ———, *Mathematik und Umwelt*, BMBF Bonn, 28. November 1995.
109. **A. Kunothe**, *Multiskalenmethoden zur numerischen Lösung von Sattelpunktsproblemen – Anhängen von Randbedingungen mittels Lagrangescher Multiplikatoren*, Forschungsseminar Optimierung, Humboldt-Universität zu Berlin, 5. Januar 1995.
110. ———, *Multilevel preconditioning – Appending boundary conditions by Lagrange multipliers*, Seminar on Recent Advances in Numerical Methods for Partial Differential Equations, Politecnico di Torino, 14. Februar 1995.
111. ———, *Multilevel preconditioning of saddle point problems stemming from appending boundary conditions by Lagrange multipliers and applications to an optimal control problem*, Numerical Analysis Seminar, Texas A&M University, College Station, 20. April 1995.

112. ———, *Multilevel preconditioning – Appending boundary conditions by Lagrange multipliers*, Symposium on Advances and Trends in Computational and Applied Mathematics, University of Texas at Austin, Texas, 22. April 1995.
113. ———, *On the fast computation of integrals of refinable functions*, Center for Approximation Theory Annual Symposium, Texas A&M University, College Station, 23. April 1995.
114. ———, *Introduction to multiscale methods for elliptic PDE's: Theory and computational issues*, Seminar on Applied Multiscale Methods, Texas A&M University, College Station, 11. und 18. Mai 1995.
115. ———, *Computing refinable integrals*, 3rd U.S. National Congress of Computational Mechanics, Dallas, 14. Juni 1995.
116. ———, *Fast computation of integrals of wavelets*, AMS–SIAM Summer Seminar on Mathematics of Numerical Analysis, Park City, Utah, 4. August 1995.
117. ———, *Wavelets, boundary conditions and preconditioning*, AMS–SIAM Summer Seminar on Mathematics of Numerical Analysis, Park City, Utah, 4. August 1995.
118. ———, *Multilevel preconditioning – Appending boundary conditions by Lagrange multipliers*, Tagung „Wavelets“, Oberwolfach, 10. August 1995.
119. **R. Lauterbach**, *Complex dynamics and invariant theory*, Tagung über Gewöhnliche Differentialgleichungen, Oberwolfach, 24. März 1995.
120. ———, *Forced symmetry breaking and complex dynamics for PDE's*, 3rd SIAM Conference on Applications of Dynamical Systems, Snowbird (USA), 21. Mai 1995.
121. ———, *Complicated dynamics via forced symmetry breaking*, Universität Gent, 2. Juni 1995.
122. ———, *Bifurcation analysis using invariant theory*, Tagung „Bifurkation und Symmetrie“, Oberwolfach, 28. Juni 1995.
123. ———, *Forced symmetry breaking*, ICIAM '95, Hamburg, 3. Juli 1995.
124. ———, *Forced symmetry breaking and periodic solutions*, Conference on Dynamical Systems and Symmetry, Isaac-Newton-Institute, Cambridge, 30. Oktober 1995.
125. ———, *Dynamical systems and symmetry*, Dynamical Systems Conference, Groningen, 11. Dezember 1995.
126. **A. Liemant**, *Hoppingtransport in amorphen Gittergasen*, Universität München, 24. Oktober 1995.
127. **P. Mathé**, *Optimal recovery of certain martingales*, Banach Minisemester Warschau, 7. Februar 1995.
128. ———, *Complexity issues of sampling*, ICIAM '95, Hamburg, 4. Juli 1995.
129. ———, *Optimal reconstruction of stochastic evolutions*, SIAM-AMS-Meeting '95, Park City, 25. Juli 1995.

130. ———, *Monte Carlo and quasi-Monte Carlo simulation of stochastic differential equations*, Plenarvortrag SIAM-AMS-Meeting '95, Park City, 3. August 1995.
131. **T. Michael**, *Numerische Verfahren zur Lösung großer strukturierter Systeme von Algebra-Differentialgleichungen der chemischen Verfahrenstechnik*, DAE Koordinationstreffen, WIAS, 12. Juni 1995.
132. **R. Model, R. Hünlich, M. Orlt, M. Walzel**, *Image reconstruction for random media by diffusion tomography*, Biomedical Optics, San José (USA), 9. Februar 1995.
133. **R. Model, R. Hünlich**, *Optical imaging of highly scattering media*, ICIAM '95, Hamburg, 6. Juli 1995.
134. ———, *Parameter sensitivity in near infrared imaging*, BIOS Europe '95, Barcelona, 13. September 1995.
135. **H.-J. Mucha**, *The XClust library of XploRe*, 19. Jahrestagung der Gesellschaft für Klassifikation, Basel, 8. März 1995.
136. ———, *ClusCorr: Clusteranalyse unter Microsoft EXCEL*, CeBIT 95, Hannover, 13. März 1995.
137. ———, *Clustering techniques under EXCEL*, 8. Konferenz über die wissenschaftliche Anwendung von Statistik-Software, Heidelberg, 28. März 1995.
138. **H.-J. Mucha, R. Siegmund-Schultze**, *Adaptive Clusteranalyse und multivariate Grafik: Software und Anwendungen*, Forschungszentrum der Daimler Benz AG, Ulm, 6. Oktober 1995.
139. **H.-J. Mucha, R. Siegmund-Schultze**, *Kredit Scoring: ein adaptives Klassifikationsverfahren*, Forschungszentrum der Daimler Benz AG, Ulm, 9. November 1995.
140. **M. Neumann**, *Nonlinear wavelet methods in curve estimation*, 19. Jahrestagung der Gesellschaft für Klassifikation, Basel, 9. März 1995.
141. ———, *Spectral density estimation for locally stationary time series*, Universität Heidelberg, 13. Juli 1995.
142. ———, *Optimal change-point estimation in inverse problems*, Universität Heidelberg, 13. Juli 1995.
143. ———, *Optimal change-point estimation in inverse problems*, 21st European Meeting of Statisticians, Aarhus, 22. August 1995.
144. ———, *Nichtlineare Waveletmethoden in der Kurvenschätzung*, Statistische Woche, Leipzig, 26. September 1995.
145. ———, *Optimal change-point estimation in inverse problems*, Seminar Berlin-Paris, Schmerwitz, 28. September 1995.



146. ———, *Wavelet thresholding in anisotropic function classes and applications to adaptive estimation of evolutionary spectra*, Tagung „Smoothing and Resampling in Economics“, Berlin, 7. Oktober 1995.
147. ———, *Nichtlineare Waveletschätzung von zeitveränderlichen autoregressiven Prozessen*, Universität Braunschweig, 3. November 1995.
148. **M. Nussbaum**, *Statistische Entscheidungstheorie für einige inverse und schlecht gestellte Probleme*, TU Braunschweig, 13. Januar 1995.
149. ———, *Approximation nichtparametrischer Experimente*, Universität Hamburg, 3. Februar 1995.
150. ———, *Reduction theory for statistical ill-posed problems*, Australian National University, Canberra, 23. März 1995.
151. ———, *Equivalence asymptotique de certains modèles de processus stochastiques*, XXVIIes Journées de statistique, Jouy-en-Josas, 18. Mai 1995.
152. ———, *Estimating a density support curve of indeterminate sharpness*, Université Catholique de Louvain, 13. Juni 1995.
153. ———, *Accompanying experiments for nonparametric density estimation*, 21st European Meeting of Statisticians, Aarhus, 24. August 1995.
154. ———, *Degrees of ill-posedness in stochastic and deterministic noise models*, Miniworkshop on Inverse Problems, Utrecht, 10. Oktober 1995.
155. ———, *Stochastic ill-posed problems and approximation of experiments*, University of Technology, Delft, 11. Oktober 1995.
156. ———, *Stochastic ill-posed problems and approximation of experiments*, Universität Utrecht, 11. Oktober 1995.
157. ———, *Processus de vraisemblance et suites accompagnantes d'expériences*, Université Paris VI, 17. Oktober 1995.
158. ———, *Asymptotic equivalence of statistical experiments*, University of British Columbia, Vancouver, 29. November 1995.
159. **S. Pröbldorf**, *Wavelet methods for solving integral equations and boundary value problems*, University of Tasmania, Hobart, 20. Januar 1995.
160. ———, *Multiscale methods for the Helmholtz equation and related pseudodifferential equations*, The University of New South Wales, Sydney, 9. Februar 1995.
161. ———, *Pseudodifferential operators and wavelets*, Tagung „Linear Operators and Applications“, Oberwolfach, 9. Mai 1995.
162. ———, *Boundary element collocation methods using splines with multiple knots*, IABEM Symposium on Boundary Integral Methods for Nonlinear Problems, Siena, 31. Mai 1995.

163. ———, *Multiscale methods for pseudodifferential equations*, ICIAM '95, Hamburg, 4. Juli 1995.
164. ———, *Wavelet methods for solving pseudodifferential equations*, IWOTA 95, Regensburg, 4. August 1995.
165. ———, *Wavelet approximation methods for solving the exterior Dirichlet problem for the Helmholtz equation*, Tagung „Wavelets“, Oberwolfach, 10. August 1995.
166. ———, *Wavelet methods for pseudodifferential equations and boundary value problems*, Istituto di Analisi Numerica, Pavia, 22. September 1995.
167. ———, *Wavelet approximation methods for boundary integral equations*, Meeting „Recent approximation theory results in the numerical solution of differential and integral equations“, Cortona, 27. September 1995.
168. ———, *Boundary element collocation methods using non-smooth splines*, Meeting „Recent approximation theory results in the numerical solution of differential and integral equations“, Cortona, 29. September 1995.
169. ———, *Wavelet-Randelementmethoden*, Abschlußkolloquium des DFG-Schwerpunktes „Randelementmethoden“, Stuttgart, 3. Oktober 1995.
170. **A. Rathsfeld**, *A wavelet algorithm for the solution of the double layer potential equation over polygonal domains*, Workshop „Multiscale Methods in Numerical Analysis“, WIAS Berlin, 27. März 1995.
171. ———, *Waveletalgorithmen für Randelementmethoden*, Tagung „Wavelet–Approximation und Anwendungen“, Lübeck, 26. Mai 1995.
172. **L. Recke**, *Forced symmetry breaking, phase locking in equivariant dynamical systems and applications to laser modelling*, Tschechische Akademie der Wissenschaften, Prag, 22. Juni 1995.
173. ———, *Forced periodic and quasiperiodic frequency locking*, Université Catholique de Louvain, 28. November 1995.
174. **J. Rehberg**, *The Schrödinger–Poisson system including an exchange potential*. Workshop Applied Analysis, Clausthal, 17. Juli 1995.
175. **J. Rehberg, H.–Chr. Kaiser**, *About a stationary Schrödinger-Poisson system modeling quantum structures*, 4th International Seminar on Simulation of Devices and Technologies, ISSDT'95, Berg-en-Dal, Südafrika, 16. November 1995.
176. **G. Reinhardt**, *Zur Nutzung standardisierter numerischer Basis-Software auf Workstation*, Workshop Software Engineering im Scientific Computing, Hamburg, 8. Juni 1995.
177. **R. Rumpel**, *On the qualitative behaviour of nonlinear oscillators with dry friction*, Tagung „Nonsmooth systems“, Bad Honnef, 14. März 1995.

178. ———, *Zur qualitativen Analyse von nichtlinearen Schwingungen mit trockener Reibung*, DPG-Jahrestagung, TU Berlin, 20. März 1995.
179. ———, *On the qualitative behaviour of nonlinear oscillators with dry friction*, ICIAM '95, Hamburg, 7. Juli 1995.
180. **B. Sandstede**, *Center manifold theory for homoclinic solutions*, Learnshop „Homoclinic and Heteroclinic Phenomena and their Reduction to Low-Dimensional Dynamics“, Berlin, 15. März 1995.
181. ———, *Stability of multiple pulses*, Tagung „Topological and geometrical methods in ODE's“, Oberwolfach, 22. März 1995.
182. ———, *Numerical computation of homoclinic bifurcation points*, Workshop „Analysis and Continuation of Homoclinic Bifurcations“, CWI, Amsterdam, 15. Juni 1995.
183. ———, *Forced symmetry breaking of heteroclinic cycles*, ICIAM '95, Hamburg, 3. Juli 1995.
184. ———, *Bifurcations of homoclinic solutions in the FitzHugh-Nagumo-System*, ICIAM '95, Hamburg, 4. Juli 1995.
185. ———, *Numerical Computation of Homoclinic Bifurcation Points*, DFG-Kolloquium im Schwerpunkt „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“, Bad Windsheim, 10. Juli 1995.
186. ———, *A non-hyperbolic exchange lemma and an application to the FitzHugh-Nagumo-Equation*, Tagung „Problems and Methods in Singular Perturbations“, CIRM, Luminy, 20. Juli 1995.
187. ———, *Stability of multiple-pulse solutions*, Lefschetz-Center for Dynamical Systems Seminar, Brown University, Providence, 25. September 1995.
188. ———, *Fast and slow waves in the FitzHugh-Nagumo-System*, Boston University, 16. Oktober 1995.
189. ———, *Stability of multiple-pulse solutions*, Differential Equations Seminar, North Carolina State University, Raleigh, 25. Oktober 1995.
190. ———, *Stability of multiple-pulse solutions*, Colloquium, Virginia Polytechnic Institute, Blacksburg, 3. November 1995.
191. ———, *Stability of multiple-pulse solutions*, Seminar on Nonlinear Dynamics, University of Houston, 16. November 1995.
192. ———, *Stability of multiple-pulse solutions*, Applied Mathematics Seminar, University of Massachusetts, Amherst, 5. Dezember 1995.
193. ———, *Stability of multiple-pulse solutions*, Colloquium, University of Maryland, College Park, 8. Dezember 1995.

194. **J. Schmeling**, *Number theory and dynamical systems*, International Congress of Dynamical Systems, Montevideo, 29. März 1995.
195. ———, *Hyperbolic endomorphisms with singularities*, Banach-Semester, Warschau, 7. Juni 1995.
196. ———, *The Hausdorff dimension of endomorphisms with singularities*, AMS Summer Workshop on Dynamical Systems, Seattle, 26. Juni 1995.
197. ———, *Invertible and noninvertible attractors*, CNRS Luminy, Marseille, 12. Oktober 1995.
198. **I. Schmelzer**, *Grid Generation with Covariant Geometry Description*, Universität Erlangen-Nürnberg, 9. November 1995.
199. ———, *Kovariante Geometriebeschreibung*, TU Cottbus, 11. Dezember 1995.
200. **G. Schmidt**, *New classes of cubature formulas for singular integral operators and potentials*, Universität Linköping, 24. Januar 1995.
201. **K. R. Schneider**, *Sprungverhalten und Stabilitätswechsel bei singular gestörten Differentialgleichungssystemen*, Tagung „Topological and geometrical methods in ODE's“, Oberwolfach, 21. März 1995.
202. ———, *Jumping behavior in singular singularly perturbed systems*, SIAM Conference on Applications of Dynamical Systems, Snowbird (USA), 18. Mai 1995.
203. ———, *Mathematische Modellierung und Analyse biochemischer Reaktionen mit schnellen Reaktionsraten*, Moscow State University, 21. Juni 1995.
204. ———, *Stabilization of descriptor systems*, International Workshop on Singular Solutions and Perturbations in Control Systems, Pereslavl-Zalessky (Rußland), 28. Juni 1995.
205. ———, *Jumping behavior of the reaction rate of fast bimolecular reactions*, ICIAM '95, Hamburg, 4. Juli 1995.
206. ———, *Discontinuous solutions in differential algebraic systems*, Tagung „Differential Algebraic Equations and Related Fields“, Oberwolfach, 2. November 1995.
207. ———, *Dynamische Systeme mit schnellen und langsamen Variablen*, Workshop on Nonlinear Oscillations, Hannover, 1. Dezember 1995.
208. **J. Schult**, *Modelle kommutierender Operatoren*, Kolloquium Operatortheorie, TU Berlin, 4. Dezember 1995.
209. **R. Siegmund-Schultze**, *Spatial branching processes, some results on equilibria and genealogy*, Tagung Branching Processes, Oberwolfach, 21. Dezember 1995.
210. **H. Schurz**, *Stochastic stability of structures under the presence of distributed time-delay and modified control*, Euromech Colloquium No. 329 „Methods for nonlinear stochastic structural dynamics“, Innsbruck, 14. März 1995.

211. ———, *Numerical mean square analysis for stochastic dynamical systems I: Convergence, II: Stability*, 2nd International Conference on Dynamic Systems and Applications, Atlanta, 26. Mai 1995.
212. ———, *Modelling and analysis of stochastic innovation diffusion*, ICIAM '95, Hamburg, 6. Juli 1995.
213. ———, *Recent progress on numerical analysis of stochastic differential equations*, ETH (IPS) Zürich, 7. November 1995.
214. **M. Schwarz**, *Some results on a mathematical model for shape memory alloys*, ICIAM '95, Hamburg, 4. Juli 1995.
215. **V. Spokoiny**, *Model selection in econometric modelling*, Universität Paris 6, 15. Februar 1995.
216. ———, *Nonparametric hypothesis testing using wavelets*, Mathematisches Kolloquium, Universität Düsseldorf, 17. Mai 1995.
217. ———, *Adaptive hypothesis testing using wavelets*, 21st European Meeting of Statisticians. Aarhus, 25. August 1995.
218. ———, *Model selection in econometric modelling*, Konferenz „Smoothing and Resampling in Economics“, Berlin, 5. Oktober 1995.
219. **J. Sprekels**, *Singuläre Systeme partieller Differentialgleichungen und die Modellierung diffusiver Phasenübergänge*, Universität Kiel, 3. Februar 1995.
220. ———, *Adaptive Methoden zur Identifikation räumlich veränderlicher Materialparameter*, 122. PTB Seminar „Informationsgewinnung aus Meßdaten“, Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Berlin, 10. März 1995.
221. ———, *Phase field models in the theory of phase transitions*, Tagung FBP '95, Zakopane, 11. Juni 1995.
222. ———, *Modelling stress- and deformation-controlled hysteresis phenomena in shape memory alloys*, Tagung FBP '95, Zakopane, 17. Juni 1995.
223. ———, *Mathematical models of stress- and deformation-controlled experiments in shape memory alloys*, ICIAM '95, Hamburg, 4. Juli 1995.
224. ———, *Stefan problems and the Penrose-Fife model for phase transitions*, Tagung „Generalized Stefan Problems: Analysis and Numerical Methods“, Pavia, 31. August 1995.
225. ———, *Mathematical models for the hysteresis effects and phase transitions in shape memory alloys*, 2nd European Workshop on Image Processing and Mean Curvature Motion, Palma de Mallorca, 27. September 1995.
226. **H. Stephan**, *Olympiadeaufgaben mit dem PC*, Heinrich–Hertz–Gymnasium Berlin, 27. Juni 1995.

227. ———, *Inverse problems in non-equilibrium transport processes*, Seminar Mathematische Physik, Universität Paris 7, 20. Dezember 1995.
228. **W. Wagner**, *Stochastic particle systems related to the Boltzmann equation*, Universität Paris-Versailles, 12. Mai 1995.
229. ———, *Stochastic systems of weighted particles approximating the spatially inhomogeneous Boltzmann equation*, ICIAM '95, Hamburg, 5. Juli 1995.
230. **K. Zacharias**, *Ein mathematisches Modell der Emulsionspolymerisation*, Workshop Scientific Computing in der chemischen Verfahrenstechnik, Hamburg, 2. März 1995.

**5.4.1 Arbeitsaufenthalte von Mitarbeitern**

1. **H. Babovsky**, TU Ilmenau, Vertretungsprofessur, WS 1995/96.
2. **J. Borchardt**, Bayer AG Leverkusen, im Rahmen des BMBF-Projektes GA7FVB, 11. – 14. Dezember 1995.
3. **A. Bovier**, Centre d'Etudes de Saclay, im Rahmen des EU-Projektes CHRX-CT93-0411, 22. – 24. Januar 1995.
4. ———, ETH-Zürich, im Rahmen des EU-Projektes CHRX-CT93-0411, 25. – 29. Januar 1995.
5. ———, Universita Karlova Prag, im Rahmen des EU-Projektes CHRX-CT93-0411, 26. März - 1. April 1995.
6. ———, Universität Groningen, 8. – 13. Mai 1995.
7. ———, CPT Marseille, im Rahmen des EU-Projektes CHRX-CT93-0411, 6. Juni – 2. Juli 1995.
8. ———, Erwin-Schrödinger Institut Wien, 21. November – 2. Dezember 1995.
9. **N. Bubner**, Université Henri Poincaré Nancy 1, Institut Élie Cartan, 6. – 10. November 1995.
10. **K. Fleischmann**, Carleton Universität Ottawa, im Rahmen der DFG-Förderung, 13. November – 10. Dezember 1995.
11. **A. Glitzky**, Universität Bonn, SFB 256, 17. – 19. Mai 1995.
12. **F. Grund**, Bayer AG Leverkusen, im Rahmen des BMBF-Projektes GA7FVB, 12. – 14. Juli, 4. – 6. September und 9. – 11. Oktober 1995.
13. **D. Hömberg**, TU Bergakademie Freiberg, 22. – 23. Juni 1995.
14. **D. Horn**, Bayer AG Leverkusen, im Rahmen des BMBF-Projektes GA7FVB, 4. – 6. September und 11. – 14. Dezember 1995.
15. **R. Hünlich**, Universität Bonn, SFB 256, 15. – 19. Mai 1995.
16. **D. Ioffe**, Technion Tel Aviv, 7. – 17. September 1995.
17. ———, Universität Zürich, im Rahmen des EU-Projektes CHRX-CT93-0411, 1. November – 1. Dezember 1995.
18. **A. Juhl**, Clausthal-Zellerfeld, Aufenthalt am Mathematischen und Physikalischen Institut, 12. – 15. Juni 1995.
19. ———, Universität Lille 1, 2. – 8. Oktober 1995.
20. ———, Mittag-Leffler-Institut Stockholm, 13. November – 10. Dezember 1995.

21. **B. Kleemann**, Technische Hochschule Darmstadt, im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms „Randelementmethoden“, 13. – 17. März 1995.
22. **A. Kunoth**, Politecnico di Torino, 12. – 19. Februar 1995.
23. ———, Institute for Scientific Computation, Texas A&M University, 5. April – 19. Oktober 1995.
24. ———, Department of Mathematics, University of South Carolina, 5. – 8. Mai 1995.
25. ———, Institut für Geometrie und Praktische Mathematik, RWTH Aachen, 24. – 27. Oktober, 12. – 15. Dezember, 28. – 29. Dezember 1995.
26. **R. Lauterbach**, RIACA Amsterdam, Koordination eines Projektes über Computer Algebra und nichtlineare dynamische Systeme, 1. Mai – 31. Juli 1995.
27. ———, Institut Non Linéaire de Nice, Nizza, 18. – 30. September 1995.
28. **A. Liemant**, Universität München, 23. – 26. Oktober 1995.
29. **M. Nussbaum**, Australian National University, Canberra, 10. März – 13. April 1995.
30. ———, Université Catholique de Louvain, Belgien, 6. – 16. Juni 1995.
31. ———, University of British Columbia, Vancouver, 6. November - 14. Dezember 1995.
32. **S. Pröbldorf**, Universitäten Hobart und Sydney, 4. Januar – 17. Februar 1995.
33. ———, Universität Turin und Institute for Numerical Analysis, Pavia, 21. – 24. September 1995.
34. **J. Rehberg**, Karls-Universität Prag, 3. – 9. Dezember 1995.
35. **B. Sandstede**, Brown University, Providence, USA, als Feodor-Lynen-Stipendiat der Alexander-von-Humboldt-Stiftung, seit 1. September 1995 – August 1996.
36. **G. Schmidt**, Universität Linköping, 22. Januar – 4. Februar, 22. Oktober – 4. November 1995.
37. **K. R. Schneider**, Staatliche Universität Moskau, 19. – 25. Juni 1995.
38. **H. Schurz**, Morehouse College Atlanta, 22. – 29. Mai 1995.
39. ———, ETH-Zürich, 4. – 12. November 1995.
40. **V. Spokoiny**, Universität Paris 6, 5. – 16. Februar 1995.
41. **H. Stephan**, Laboratoire Physique mathématique et Géométrie, Université Paris 7, 18. – 22. Dezember 1995.
42. **W. Wagner**, Universität Paris-Versailles, 9. – 15. Mai 1995.
43. ———, Universität Rom I „La Sapienza“, 23. – 29. September 1995.



## 5.5 Vorlesungen und Seminare

1. **H. Babovsky**, *Diffusionslimites für Transportgleichungen*, Technische Universität Berlin, Sommersemester 1995.
2. ———, *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen*, Technische Universität Ilmenau, Wintersemester 1995/96.
3. ———, *Algorithmen und Programmierung*, Technische Universität Ilmenau, Wintersemester 1995/96.
4. ———, *Logik und Zahlen*, Technische Universität Ilmenau, Wintersemester 1995/96.
5. **K. Gröger**, *Analysis IV*, Humboldt–Universität zu Berlin, Sommersemester 1995.
6. ———, *Seminar Angewandte Analysis*, Humboldt–Universität zu Berlin, Sommersemester 1995 und Wintersemester 1995/96.
7. ———, *Funktionalanalysis*, Humboldt–Universität zu Berlin, Wintersemester 1995/96.
8. **R. Hünlich**, *Ausgewählte Kapitel der Höheren Mathematik*, Humboldt–Universität zu Berlin, Wintersemester 1994/95.
9. **A. Juhl**, *Forschungsseminar Harmonische Analysis*, Humboldt-Universität zu Berlin, Wintersemester 1994/95, Sommersemester 1995, Wintersemester 1995/96.
10. **R. Kornhuber**, *Seminar Freie Randwertprobleme und konvexe Analysis*, Freie Universität Berlin, Wintersemester 1994/95.
11. **R. Lauterbach**, *Äquivariante dynamische Systeme*, Freie Universität Berlin, Wintersemester 1994/95.
12. ———, *Klassische Mechanik und Hamiltonsche Systeme*, Freie Universität Berlin, Wintersemester 1995/96.
13. **P. Mathé**, *Die Brownsche Bewegung*, Freie Universität Berlin, Wintersemester 1995/96.
14. **M. Nussbaum**: *Seminar Kurvenschätzung und Resampling*, Humboldt–Universität zu Berlin, Wintersemester 1994/95 und Sommersemester 1995 (mit E. Mammen).
15. ———, *Forschungsseminar Mathematische Statistik*, Humboldt-Universität zu Berlin, Wintersemester 1994/95 und Sommersemester 1995 (mit O. Bunke, W. Härdle, E. Mammen).
16. **R. Rumpel**, *Vorlesung und Computerlabor Informatik für Wirtschaftsingenieure*, Fachhochschule für Technik und Wirtschaft Berlin, Wintersemester 1994/95.
17. ———, *Vorlesung und Computerlabor Informatik für Wirtschaftsingenieure II*, Fachhochschule für Technik und Wirtschaft Berlin, Sommersemester 1995.
18. **B. Sandstede**, *Topics in Dynamical Systems*, AM 221, Brown University, Providence / USA, Wintersemester 1995.

19. **J. Schmeling**, *Ergodentheorie glatter dynamischer Systeme – Entropie, Lyapunov-Exponenten, Dimensionen*, Freie Universität Berlin, Sommersemester 1995
20. **K. R. Schneider**, *Bifurkationstheorie*, Humboldt-Universität zu Berlin, Wintersemester 1995/96.
21. ———, Seminar *Nichtlineare Dynamik*, WIAS, Sommersemester 1995, Konrad-Zuse-Zentrum, Wintersemester 1995/96 (mit B. Fiedler/FU und K. Gatermann/ZIB).
22. **H. Schurz**, *Numerik stochastischer Differentialgleichungen II*, Humboldt-Universität zu Berlin, Wintersemester 1994/95.
23. ———, *Einführung in die numerische Analysis stochastischer Differentialgleichungen*, Technische Universität Berlin, Sommersemester 1995.
24. ———, *Analytische und numerische Methoden für stochastische Differentialgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, Wintersemester 1995/96.
25. **J. Sprekels**, *Schlecht gestellte Probleme*, Humboldt-Universität zu Berlin, Wintersemester 1994/95.
26. ———, *Mathematische Modellierung von Hysterese-Erscheinungen*, Ringvorlesung des Graduiertenkollegs „Geometrie und Nichtlineare Analysis“ der Humboldt-Universität zu Berlin, 20. und 27. Januar 1995.
27. ———, *Numerik für partielle Differentialgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, Sommersemester 1995.
28. ———, *Numerische Mathematik*, Humboldt-Universität zu Berlin, Wintersemester 1995/96.
29. **W. Wagner**, *Stochastische Verfahren in der Numerik*, Humboldt-Universität zu Berlin, Wintersemester 1995/96.

**H. Gajewski, K. Gröger, R. Hünlich, K. R. Schneider, J. Sprekels**, Mitglieder des Graduiertenkollegs *Geometrie und nichtlineare Analysis*.

## 5.6 Dissertationen, Habilitationen und Rufe

### Dissertationen

- **N. Bubner**, Dissertationsschrift: *Modellierung dehnungsgesteuerter Phasenübergänge in Formgedächtnislegierungen*, Universität–GH Essen, Betreuer: Prof. Dr. J. Sprekels, verteidigt am 29. Mai 1995.
- **K. Bühring**, Dissertationsschrift: *Quadrature methods for the Cauchy singular integral equation on curves with corner points and for the hypersingular integral equation on the interval*, Freie Universität Berlin, Betreuer: Prof. Dr. S. Pröbldorf, verteidigt am 14. November 1995.
- **N. Hofmann**, Dissertationsschrift: *Beiträge zur schwachen Approximation stochastischer Differentialgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, Betreuer: Prof. Dr. J. Küchler, verteidigt am 30. März 1995.
- **St. Seelecke**, Dissertationsschrift: *Zur Thermodynamik von Formgedächtnislegierungen*, Technische Universität Berlin, Betreuer: Prof. Dr. I. Müller, verteidigt am 3. November 1995.
- **H. Stephan**, Dissertationsschrift: *Nichtgleichgewichtsprozesse. Direkte und inverse Probleme*. Freie Universität Berlin, Betreuer: Prof. Dr. H. Gajewski, verteidigt am 29. November 1995.

### Habilitationen

- **A. Bovier**, Habilitation am Fachbereich Mathematik der Technischen Universität Berlin, verteidigt am 15. Dezember 1995.
- **R. Kornhuber**, Habilitationsschrift: *Adaptive monotone multigrid methods for nonlinear variational problems*, Freie Universität Berlin, Betreuer: Prof. Dr. P. Deuffhard, verteidigt am 8. Februar 1995.

### Rufe

- **H. Gajewski**, Honorarprofessur an der Freien Universität Berlin.
- **R. Kornhuber**, C3-Professur an der Universität Stuttgart.

## 5.7 Eigene Tagungen und Veranstaltungen des WIAS

**27. März – 1. April 1995** Workshop „Multiscale Methods in Numerical Analysis“, Berlin  
 Organisation: RWTH Aachen, Universität Kiel, Universität Rostock, WIAS  
 Sponsoring: DFG, Universität Rostock, WIAS

Dieser Workshop, der erstmals in Deutschland Fachleute aus der Numerischen Analysis und der Wavelet-Theorie zusammenführte, war ein voller Erfolg. Dies wurde bereits durch die Teilnahme vieler international führender Spezialisten dieser beiden Gebiete aus Frankreich, den USA, Schweden, England, Italien, Holland, Rußland, Brasilien, Finnland, der Ukraine und der BRD sowie durch das große Interesse von seiten der 80 Teilnehmer (davon 32 ausländische Kollegen) garantiert. Dieser Erfolg ist nicht zuletzt ein Ergebnis der guten wissenschaftlichen Zusammenarbeit und der hohen Leistungen der einzelnen Arbeitsgruppen innerhalb Deutschlands. Von den Teilnehmern wurde mehrfach der Wunsch nach weiteren Workshops dieser Art geäußert.

Im Mittelpunkt der 8 Haupt- und 36 Kurzvorträge standen Wavelet- und Multiskalen-Methoden zur effizienten numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen und Integralgleichungen. Der Workshop lebte von den intensiven fachlichen Diskussionen zwischen erfahrenen Fachleuten und engagierten jungen Nachwuchswissenschaftlern. Die gezielte Förderung junger Kollegen auf dem hochaktuellen Gebiet der Multiskalen-Methoden war ein wichtiges Anliegen der Organisatoren. Aus diesem Teilnehmerkreis kamen viele ausgezeichnete Beiträge. Zahlreiche Anregungen für die weitere Forschung ergaben sich aus den Vorträgen zu konkurrierenden Methoden, wie z.B. Multigrid- und Panel-Clustering-Methoden. Als offene Probleme, die die Entwicklung der nächsten Jahre bestimmen werden, ergaben sich: die Entwicklung schneller, robuster Löser für parabolische Differentialgleichungen im  $\mathbb{R}^3$ ; die Schaffung adaptiver Wavelet-Methoden; die schnelle Lösung von Randwertproblemen und Randintegralgleichungen mit Singularitäten.

**12. – 13. Juni 1995** DAE-Koordinationstreffen, Berlin

Organisation: WIAS

Sponsoring: BMBF, im Rahmen eines Programms auf ausgewählten Gebieten anwendungsorientierter Mathematik, Projektträger: KFA - PFR

Das Koordinationstreffen fand im Rahmen des genannten Förderprogramms zu den Themen, die Systeme von Algebroid-Differentialgleichungen behandeln, statt. Die wissenschaftliche Leitung hatte P. Rentrop, TH Darmstadt. Es wurden Vorträge von den Projektgruppen von F. Grund (WIAS), R. Bulirsch (TU München), P. Rentrop (TH Darmstadt), K. Frischmuth (U Rostock), G. Bock (IWR Heidelberg) und I. Bremer (WIAS) gehalten. Sie befaßten sich mit der numerischen Lösung von DAE's in der chemischen Verfahrenstechnik, der Stabilitätsanalyse von DAE's in der Schaltungssimulation, dem ENO-Verfahren für den Ladungswechsel im Verbrennungsmotor, der Lösung von Differentialgleichungen und singulären Mannigfaltigkeiten bei Rad-Schiene-Systemen, der Sensitivitätsanalyse von differentiell-algebraischen Gesamtfahrzeugmodellen und mit einem DAE-System zur Simulation von Copolymerisationsprozessen. Die industriellen Verbundpartner, deren Vertreter teilweise anwesend waren, sind u.a. die Bayer AG Leverkusen, die Siemens AG München, die BMW AG München, die DLR Göttingen und die Deutsche Bahn AG.

- 25. – 29. September 1995** Seminar on Mathematical Statistics Paris–Berlin: Complex models in Nonparametrics, Schmerwitz  
 Organisation: Humboldt-Universität zu Berlin, WIAS  
 Sponsoring: DFG, WIAS

„Complex Models in Nonparametrics“ beschreibt ein Gebiet im Spannungsfeld zwischen asymptotischen Methoden der Statistik, Theorie empirischer Prozesse und Zeitreihenanalyse. Im Vordergrund steht dabei eine vertiefte mathematische Behandlung des Gegenstandes; insbesondere in der französischen Schule wird die weitgehende Integration in die mathematische Stochastik angestrebt. Die Vortragsreihe von P. Massart (Paris) über „Applications of empirical process theory to nonparametric statistics“ gab ein umfassendes Panorama der Entwicklungen in diesem Gebiet in den letzten 10 Jahren. Die Vortragsreihe von R. Dahlhaus (Heidelberg) „Smoothing and time series analysis for locally stationary processes“ setzte einen stärker anwendungsbezogenen Akzent. Die Anzahl der Teilnehmer war mit 42 (aus 7 Ländern) größer als ursprünglich vorgesehen. Beteiligt waren auf Pariser Seite Vertreter der Universitäten Paris VI und VII, Paris Sud (Orsay) und des Institut National de Recherche Agronomique (INRA), auf Berliner Seite Vertreter der Humboldt–Universität, des Weierstraß–Instituts und (im weiteren regionalen Rahmen) der Universität Potsdam. Insgesamt 11 der 19 Halbstunden-Vorträge wurden von Nachwuchswissenschaftlern gehalten.

- 4. Oktober 1995** Festkolloquium aus Anlaß des 60. Geburtstages von Prof. Dr. O. Bunke, Berlin  
 Organisation: Humboldt–Universität zu Berlin, WIAS
- 5. – 7. Oktober 1995** Conference „Smoothing and Resampling in Economics“, Berlin  
 Organisation: SFB 373 „Quantifikation und Simulation ökonomischer Prozesse“, WIAS  
 Sponsoring: DFG, WIAS

An der Tagung beteiligten sich etwa 100 Wissenschaftler aus zahlreichen Ländern, davon 36 aktiv mit einem Vortrag. Thematisch dominierend waren statistische Glättungsverfahren (smoothing) und deren ökonometrische Anwendungen; eine wichtige Rolle spielte weiterhin die Theorie der Resamplingverfahren (bootstrap). Dies entspricht dem Gegenstand des Teilprojektes B1 des SFB 373, welches den Schwerpunkt der Mitarbeit des WIAS am Sonderforschungsbereich darstellt. Die Tagung wurde daher zum Teil durch die informelle internationale „smoothing community“ geprägt; einige ihrer führenden Vertreter waren anwesend. Die Spannweite der Beiträge reichte von theoretischen Resultaten über nichtlineare Wavelet-Glätter, angewandt auf Modelle Besovscher Funktionenräume bis zur Diskussion aktueller Entwicklungen für statistische Software-Interfaces. Ergänzt wurde das Programm durch konkrete Beispiele ökonometrischer Datenanalyse anhand von Frontier-Modellen, z. B. der Innovationsfähigkeit von Firmen und der Unternehmenseffizienz im US-Bankgewerbe.

- 11. Oktober 1995** „Kolloquium zum Gedenken an Prof. Dr. Solomon G. Michlin“, Berlin  
 Organisation: WIAS (H. Gajewski, S. Prößdorf)

Der weltbekannte Mathematiker Solomon Grigoriewitsch Michlin starb am 30. August 1990 in St. Petersburg (Leningrad). Er hat als akademischer Lehrer und durch bahnbrechende Forschungen zur Analysis, zur Mathematischen Physik und zur Numerischen Mathematik

prägenden Einfluß auf russische und deutsche Mathematiker genommen, die, gemeinsam mit seinem Sohn G. S. Michlin, ihren Lehrer mit diesem Kolloquium anläßlich seines fünften Todestages ehrten.

**22. – 24. November 1995** German-Polish Workshop „Multilevel Methods in Science and Industry“, Berlin

Organisation: Universität Warschau, ZIB, WIAS

Sponsoring: ZIB, WIAS

Die schnelle Lösung großer linearer und nichtlinearer Gleichungssysteme ist für eine Vielzahl von Problemen aus den Ingenieurwissenschaften und der Industrie von entscheidender Bedeutung. Multilevel-Methoden basieren auf einer geeigneten Frequenzerlegung des Ausgangsproblems, welche im günstigsten Fall gitterunabhängige Konvergenzraten liefern. Die Suche nach einer solchen Zerlegung berührt die mathematische Grundlagenforschung ebenso wie die Informatik, z.B. bei Implementierungsfragen, und oft genug ist man bei konkreten Anwendungen auf physikalisch motivierte Heuristiken angewiesen.

Dieser Vielfalt von Fragestellungen entsprachen die Vortragsthemen des German-Polish Workshops „Multilevel Methods in Science and Industry“, zu dem bis auf wenige Ausnahmen die führenden Vertreter dieser Fachrichtung aus Polen und Deutschland anwesend waren. Schwerpunkte bildeten adaptive Verfahren, Gebietszerlegungstechniken und algebraische Mehrgittermethoden. Als höchst aktuelles Anwendungsfeld mit insgesamt 5 Vorträgen erwies sich einmal mehr die Simulation von Strömungen durch poröse Medien. Forschungen auf diesem Gebiet werden auch am WIAS mit Nachdruck betrieben.

## 5.8 Gastaufenthalte am WIAS

**Prof. Dr. Z. Andjelić** (ABB Forschungszentrum Heidelberg)

22. 5. 1995, Gast des WIAS

**Dr. P. Bastian** (Universität Stuttgart)

22. 11. 1995 – 24. 11. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. E. Bolthausen** (Universität Zürich, Schweiz)

15. 12. 1995 – 19. 12. 1995, Förderung durch EU-Projekt CHRX-CT93-0411

**Prof. Dr. D. Braess** (Ruhr-Universität Bochum)

22. 11. 1995 – 24. 11. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. M. Brokate** (Universität Kiel)

9. 11. 1995 – 11. 11. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. K. Burns** (North Western University Evanston, USA)

7. 9. 1995 – 10. 9. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. V. F. Butuzov** (Staatliche Universität Moskau, Rußland)

4. 12. 1995 – 23. 12. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. D. Chibisov** (Steklov Institut Moskau, Rußland)

6. 6. 1995 – 4. 7. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. P. Colli** (Universität Turin, Italien)

22. 11. 1995 – 2. 12. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. D. A. Dawson** (Carleton University of Ottawa, Kanada)

17. 7. 1995 – 28. 7. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. J. Dickey** (University of Minnesota, USA)

18. 12. 1995 – 22. 12. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. R. Duduchava** (Mathematical Institute Tiflis, Georgien)

17. 4. 1995 – 24. 4. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. S. M. Ermakov** (University of St. Petersburg, Rußland)

16. 11. 1995 – 16. 12. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. St. Evans** (University of California at Berkeley, USA)

1. 5. 1995 – 28. 5. 1995, Gast des WIAS

**Dr. L. Fridman** (Samara Architecture and Building Institute, Samara, Rußland)

4. 10. 1995 – 26. 10. 1995, Gast des WIAS

**Dr. V. Gayrard** (CNRS Marseille, Frankreich)

23. 10. 1995 – 22. 11. 1995, Gast des WIAS

**Dr. B. Gentz** (Universität Zürich, Schweiz)

24. 4. 1995 – 29. 4. 1995, Förderung durch EU-Projekt CHRX-CT93-0411

**Dipl.–Math. Th. Geßner** (Albert-Ludwigs-Universität Freiburg)

24. 8. 1995 – 25. 8. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. V. Girko** (Universität Kiev, Ukraine)

3. 7. 1995 – 7. 7. 1995, Gast des WIAS

**Dr. G. Golubev** (Institute for Problems of Information Transmission, Moskau, Rußland)

17. 9. 1995 – 15. 10. 1995, Gast des WIAS

**Dr. I. Grama** (Mathematisches Institut der AdW Kishinev, Moldawien)

3. 4. 1995 – 30. 6. 1995, Förderung durch die DFG

15. 7. 1995 – 15. 10. 1995, Förderung durch den DAAD

**Dr. A. Gushchin** (Steklov Institut Moskau, Rußland)

1. 9. 1995 – 30. 11. 1995, Förderung durch die DFG

1. 12. 1995 – 31. 12. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. W. Hackbusch** (Christian-Albrechts-Universität zu Kiel)

21. 11. 1995 – 24. 11. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. Yu. Ingster** (Scientific Research Institut “Granit”, St. Petersburg, Rußland)

11. 9. 1995 – 31. 12. 1995, Gast des WIAS

**Dr. D. Ioffe** (Northwestern University Evanston, USA)

5. 1. 1995 – 8. 1. 1995, Gast des WIAS

**Dr. Y. Jeon** (Ajou University, Korea)

10. 7. 1995 – 10. 8. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. E. Jolivet** (Institut National de Recherche Agronomique (INRA), Jouy-en-Josas, Frankreich)

3. 10. 1995 – 5. 10. 1995, Gast des WIAS



**Dr. A. Juditsky** (Institut de Recherche en Informatique (INRIA), Rennes, Frankreich)

29. 5. 1995 – 11. 6. 1995, Gast des WIAS

15. 11. 1995 – 30. 11. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. J. Kačur** (Komensky University, Bratislava)

14. 12. 1995 – 17. 12. 1995, Gast des WIAS

**Dipl.-Math. K. Kanthiem** (Universität Warschau, Polen)

22. 11. 1995 – 25. 11. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. Karmeshu** (Universität Neu Delhi, Indien)

27. 4. 1995 – 16. 6. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. R. Khasminski** (Universität Detroit, USA)

19. 6. 1995 – 25. 6. 1995, Gast des WIAS

**Dr. B. N. Khoromskij** (Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Rußland)

20. 3. 1995 – 31. 7. 1995, Förderung durch die DFG

**Dr. A. Khorunjii** (University of Kharkov, Ukraine)

22. 5. 1995 – 26. 5. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. P. Kloeden** (Universität Geelong, Australien)

1. 1. 1995 – 31. 1. 1995, Gast des WIAS

**Dr. M. Kœnig** (Institut Non Linéaire de Nice, Nizza, Frankreich)

7. 12. 1995 – 16. 12. 1995, Förderung durch PROCOPE (DAAD)

**Prof. Dr. A. I. Koshelev** (Universität St. Petersburg, Rußland)

1. 2. 1995 – 15. 2. 1995, Gast des WIAS

25. 9. 1995 – 11. 10. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. P. Krejčí** (Tschechische Akademie der Wissenschaften, Prag)

1. 11. 1995 – 31. 11. 1995, Gast des WIAS

**Dr. T. Krüger** (Universität Bielefeld)

13. 12. 1995 – 20. 12. 1995

**Dr. P. Krzyzanowski** (Universität Warschau, Polen)

22. 11. 1995 – 25. 11. 1995, Gast des WIAS

**Dr. Ch. Külske** (Universität Rennes)

9. 1. 1995 – 20. 1. 1995, Förderung durch EU-Projekt CHRX-CT93-0411

**Dr. Ch. Külske** (Ruhr Universität Bochum)

15. 9. 1995 – 31. 3. 1996, Förderung durch DFG-Stipendium

**Dipl.-Ing. M. Kuhn** (Johannes Kepler Universität Linz, Österreich)

22. 11. 1995 – 24. 11. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. P. Laure** (Institut Non Linéaire de Nice, Nizza, Frankreich)

4. 12. 1995 – 7. 12. 1995, Förderung durch PROCOPE (DAAD)

**Dr. S. Leonov** (Institute for System Analysis, Moskau, Rußland)

27. 10. 1995 – 26. 11. 1995, Gast des WIAS

**Dr. M. Löwe** (Universität Bielefeld)

11. 12. 1995 – 16. 12. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. A. K. Lopatin** (Academy of Science of Ukraine, Kiew, Ukraine)

13. 11. 1995 – 25. 11. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. M. Low** (Universität Philadelphia, USA)

7. 5. 1995 – 14. 5. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. St. Luckhaus** (Universität Bonn)

6. 6. 1995 – 9. 6. 1995, finanziert über HCM-Projekt

**Dr. V. Malinovskii** (Steklov Institut Moskau, Rußland)

24. 11. 1995 – 23. 12. 1995, Gast des WIAS

**Dr. G. Mazurkevich** (Universität Stuttgart)

13. 7. 1995 – 15. 7. 1995, Gast des WIAS

**Dr. G. S. Michlin** (Universität Haifa, Israel)

8. 10. 1995 – 15. 10. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. St. Molchanov** (University of North Carolina, USA)

8. 7. 1995 – 22. 7. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. N. Morozov** (Universität St. Petersburg, Rußland)

9. 11. 1995 – 12. 11. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. D. Natroshvili** (Universität Tiflis, Georgien)

4. 12. 1995 – 7. 12. 1995, Gast des WIAS

**Dr. N. Nefedov** (Staatliche Universität Moskau, Rußland)

8. 7. 1995 – 15. 7. 1995, Gast des WIAS

**Dr. S. Nepomnyaschikh** (Russische Akademie der Wissenschaften, Novosibirsk, Rußland)

8. 7. 1995 – 28. 7. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. H. B. Nersessian** (Institut für Mathematik, Jerewan, Armenien)

24. 10. 1995 – 31. 10. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. G. Papanicolaou** (Stanford University, USA)

1. 10. 1995 – 28. 10. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. S. Pergamenschchikov** (Universität Tomsk, Rußland)

14. 11. 1995 – 15. 12. 1995, Gast des WIAS

**Dr. R. Pettersson** (Chalmers University of Göteborg, Schweden)

2. 5. 1995 – 7. 5. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. P. Picco** (CNRS Marseille, Frankreich)

28. 1. 1995 – 28. 1. 1995, Gast des WIAS

14. 8. 1995 – 25. 8. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. B. A. Plamenevskij** (Universität St. Petersburg, Rußland)

1. 10. 1995 – 30. 10. 1995, Gast des WIAS

**Dr. A. Pukhalskii** (Institute for Problems of Information Transmission, Moskau, Rußland)

1. 12. 1995 – 31. 12. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. V. V. Pukhnachov** (Russische Akademie der Wissenschaften, Novosibirsk, Rußland)

7. 5. 1995 – 11. 5. 1995, Gast des WIAS

**Dr. L. D. Pustyl'nikov** (Universität Bielefeld)

8. 3. 1995 – 17. 3. 1995, Gast des WIAS

14. 8. 1995 – 18. 8. 1995, Gast des WIAS

**Dipl.-Math. E. Reissner** (Universität Augsburg)

23. 4. 1995 – 29. 4. 1995, Gast des WIAS

**Dr. A. Reusken** (Technische Universität Eindhoven, Niederlande)

28. 11. 1995 – 1. 12. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. J.-F. Rodrigues** (Universität Lissabon, Portugal)

7. 7. – 11. 7. 1995, Gast des WIAS

**Dr. D. Rodriguez** (Universität Tübingen)

6. 2. 1995 – 9. 2. 1995, Gast des WIAS

**Dr. L. Ryashko** (Universität Ekaterinburg, Rußland)

29. 9. 1995 – 28. 12. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. K. Sabelfeld** (Computing Center Novosibirsk, Rußland)

22. 11. 1995 – 22. 12. 1995, Gast des WIAS

**Dr. Y. Saito** (Laboratory of Information Processing, Shotoku College, Nagoya, Japan)

8. 7. 1995 – 11. 7. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. A. M. Samoilenko** (Academy of Science of Ukraine, Kiew, Ukraine)

13. 11. 1995 – 25. 11. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. R. Schäfer** (Universität Bremen)

12. 1. 1995 – 13. 1. 1995, Gast des WIAS

**Dr. A. Schmidt** (Albert-Ludwigs-Universität Freiburg)

29. 6. 1995 – 30. 6. 1995, Gast des WIAS

**Dr. G. Schneider** (Universität Hannover)

23. 1. 1995 – 24. 1. 1995, Gast des WIAS

**Dr. V. Schulz** (Universität Heidelberg)

22. 10. 1995 – 25. 10. 1995, Gast des WIAS

**Dr. A. Schuppert** (Hoechst AG, Frankfurt/M.)

30. 5. 1995 – 31. 5. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. E. Scoppola** (Università Roma I „La Sapienza“, Italien)

20. 2. 1995 – 26. 2. 1995, Förderung durch EU-Projekt CHRX-CT93-0411

**Prof. Dr. D. Scott** (Universität Houston, USA)

25. 9. 1995 – 4. 10. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. I. H. Sloan** (University of New South Wales, Australien)

31. 5. 1995 – 15. 7. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. E. Stephan** (Universität Hannover)

12. 1. 1995 – 14. 1. 1995, Gast des WIAS

**Dr. B. Stoth** (Universität Bonn)

10. 9. 1995 – 15. 9. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. V. V. Strygin** (Voronezh State University, Voronezh, Rußland)

4. 10. 1995 – 26. 10. 1995, Gast des WIAS

**Dr. M. Sulimov** (Universität St. Petersburg, Rußland)

31. 5. 1995 – 28. 6. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. N. X. Tan** (Institute of Mathematics, Hanoi, Vietnam)

1. 4. 1995 – 30. 4. 1995, Gast des WIAS

**Dr. S. Troubetzkoy** (Universität Bielefeld)

31. 8. 1995 – 10. 9. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. M. Yamamoto** (Universität Tokio, Japan)

10. 3. 1995 – 7. 4. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. S. Vaienti** (CNRS Marseille)

16. 1. 1995 – 20. 1. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. M. Vajtersić** (Universität Wien, Österreich)

14. 6. 1995 – 15. 6. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. A. B. Vasil'eva** (Staatliche Universität Moskau, Rußland)

26. 5. 1995 – 19. 6. 1995, Gast des WIAS

**Dr. V. A. Vatoutine** (Steklov Mathematical Institute, Moskau, Rußland)

11. 12. 1995 – 17. 12. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. M. I. Vishik** (Institut für Probleme der Informationsübermittlung, Moskau, Rußland)

1. 7. 1995 – 7. 7. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. A. Wakolbinger** (Universität Frankfurt/M.)

3. 4. 1995 – 6. 4. 1995, Gast des WIAS

**Dr. D. Weiß** (Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg)

8. 8. 1995 – 9. 8. 1995, Gast des WIAS

**Dr. M. Wierse** (Albert-Ludwigs-Universität Freiburg)

8. 6. 1995 – 9. 6. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. M. Zahradnik** (Universita Karlova Prag, Tschechien)

25. 11. 1995 – 23. 12. 1995, Gast des WIAS

**Prof. Dr. S. Zheng** (Fudan-Universität Shanghai, China)

15. 8. 1995 – 31. 8. 1995, Gast des WIAS

## 5.9 Gastvorträge

4. 1. 1995 Dr. P. Contucci (Rom): *Mean field solutions for disordered Ising model. The fully frustrated case.*
6. 1. 1995 Dr. D. Ioffe (Evanston): *Exact large deviation results for the 2D Ising model in the phase transition regime.*
8. 2. 1995 Prof. Dr. A. I. Koshelev (St. Petersburg): *Regular solutions of Navier-Stokes systems.*
10. 1. 1995 Prof. Dr. D. Kröner (Freiburg): *Finite Volumenverfahren für konvektionsdominante Probleme.*
10. 1. 1995 Prof. Dr. H. von Weizsäcker (Kaiserslautern): *Ein bedingter zentraler Grenzwertsatz.*
11. 1. 1995 Prof. Dr. M. Hallin (Brüssel): *Rank based methods in times series analysis: A survey.*
12. 1. 1995 Dr. Ch. Külske (Rennes): *Oberflächen in ungeordneten Medien - das hierarchische Hochzeitskuchen-Modell.*
12. 1. 1995 Prof. Dr. R. Schäfer (Bremen): *Konzepte zur Modellierung in der Hydrogeologie.*
13. 1. 1995 Prof. Dr. E. Stephan (Hannover): *Schnelle Löser für Integralgleichungen 1. Art.*
17. 1. 1995 Prof. Dr. P. E. Kloeden (Geelong): *Discretization of a random dynamical system near a hyperbolic point.*
17. 1. 1995 Prof. Dr. S. Müller (Dortmund): *Rotierende Erregungswellen.*
18. 1. 1995 Prof. Dr. A. Kneip (Louvain-la-Neuve): *Nonparametric and semiparametric approach for samples of curves.*
24. 1. 1995 Dr. G. Schneider (Hannover): *Mathematische Rechtfertigung von Modulationsgleichungen.*
24. 1. 1995 Prof. Dr. O. Zeitoni (Haifa): *Random walk in a random environment.*
31. 1. 1995 Prof. Dr. P. E. Kloeden (Geelong): *Bi-shadowing in semi-hyperbolic dynamical systems.*
31. 1. 1995 Dr. A. Schied (Berlin): *Große Abweichungen für die Super-Brownsche Bewegung.*
1. 2. 1995 Prof. Dr. Y. Kabanov (Moskau): *Introduction to financial mathematics*
1. 2. 1995 Dipl.-Math. E. Tawadze (Dnepropetrowsk): *Projektions-Iterationsmethoden zur Lösung von Aufgaben der Elastizitätstheorie.*
7. 2. 1995 Prof. L. Arnold (Bremen): *Die multiplikativen Ergodensätze für dynamische Systeme.*

7. 2. 1995 Prof. Dr. T. Lyons (London): *Continuity of certain functional on path spaces.*
7. 2. 1995 Dr. D. Rodriguez (Tübingen): *Bifurcation in spherical convection with applications to the earth mantle.*
8. 2. 1995 Prof. Dr. A. I. Koshelev (St. Petersburg): *Regular solutions of Navier Stokes systems.*
8. 2. 1995 Prof. Dr. A. Tsybakov (Paris): *Asymptotically efficient estimation of analytic functions.*
14. 2. 1995 Dr. A. Knauf (Berlin): *Zahlentheorie und Spinketten.*
15. 2. 1995 Prof. Dr. P. Bassaerts (Niederlande): *Time series analysis of inefficient financial markets.*
16. 2. 1995 Dr. M. Löwe (Bielefeld): *Konvergenzverhalten genetischer Algorithmen.*
21. 2. 1995 Prof. Dr. E. Scoppola (Rom): *Markow chains with exponentially small transition probabilities: first exit problem from a general domain.*
22. 2. 1995 Prof. Dr. Gourieroux (Paris): *A comparison of kernel estimator based goodness of fit test.*
27. 2. 1995 Dr. D. N. Hao (Siegen): *A mollification method for ill-posed problems.*
6. 3. 1995 Dipl.-Phys. B. Broß (Stuttgart): *Pattern formation in spherical shells: Bénard convection in binary mixtures.*
8. 3. 1995 Dipl.-Phys. V. Dröge (Kassel): *Materialfehler in elastischen Medien als inverses Streuproblem.*
17. 3. 1995 Prof. Dr. L. D. Pustyl'nikov (Moskau): *On a ground state in the Frenkel-Kontova model and metric properties of mappings of standard type.*
20. 3. 1995 Prof. Dr. R. Gorenflo (Berlin): *Singulärwerte gebrochener Integraloperatoren.*
22. 3. 1995 Prof. Dr. M. Yamamoto (Tokio): *Inverse hyperbolic problems by controllability method.*
23. 3. 1995 Dipl.-Phys. H.-Ch. Hege (ZIB): *Simulation und Visualisierung in der Hyperthermieplanung.*
12. 4. 1995 Dr. R. Model (Berlin): *Inverse Probleme der optischen Tomographie.*
18. 4. 1995 Prof. Dr. E. Behrends (Berlin): *Anosov's Katze, Teil II.*
19. 4. 1995 Prof. Dr. R. Duduchava (Tiflis): *Boundary integral equations on curves with cusps.*
19. 4. 1995 Prof. Dr. Ch. Pommerenke (Berlin): *Verzweigungsprozesse und Kompositionsfolgen.*

19. 4. 1995 Prof. Dr. H. White (San Diego): *Consistent specification testing via nonparametric series regression.*
21. 4. 1995 Dr. M. Gundlach (Bremen): *Zufällige symbolische Dynamik.*
24. 4. 1995 Dr. B. N. Khoromskij (Dubna): *On matrix compression and multilevel preconditioning for boundary reductions of elliptic problems.*
25. 4. 1995 Prof. Dr. A. M. Anile (Catania): *Hydrodynamical models for semiconductors.*
25. 4. 1995 Prof. Dr. N. X. Tan (Hanoi): *Hopf bifurcation from eigenvalues with multiplicity.*
26. 4. 1995 Prof. Dr. D. Bosq (Paris): *Exotic asymptotic behaviour of the kernel density estimate for continuous time processes.*
2. 5. 1995 Dr. Ch. Borgs (Berlin): *Staggered order in the extended Hubbard model.*
2. 5. 1995 Prof. Dr. G. Leonov (St. Petersburg): *Classical ideas of Perron about irregular systems and chaos in the neighborhood of attractors.*
3. 5. 1995 Prof. Dr. J. Chayes (Los Angeles): *Scaling relations for correlation lengths in the Potts model.*
3. 5. 1995 Prof. Dr. H.-J. Diersch (Berlin): *Parameteridentifikation für Grundwasserprobleme.*
3. 5. 1995 Dr. S. Zwanzig (Hamburg): *Eine nichtparametrische Schätzung im funktionalen Fehler-in-Variablen Modell*
4. 5. 1995 Dr. R. Pettersson (Göteborg): *Properties of solutions to the linear Boltzmann equation with diffuse boundary.*
8. 5. 1995 Dr. N. Strecker (Zürich): *Punktdefektgestützte Diffusion in Silizium.*
9. 5. 1995 Prof. Dr. V. V. Pukhnachov (Novosibirsk): *Free boundary problems for the Navier-Stokes equations.*
10. 5. 1995 Prof. Dr. M. Low (Philadelphia): *On adaptive estimation in function estimation problems.*
16. 5. 1995 Dipl.-Math. A. Noack (Dresden): *Abschätzung der topologischen Entropie für den Fluß gewöhnlicher Differentialgleichungen.*
17. 5. 1995 Prof. Dr. J. Fan (Chapel Hill): *Generalized partially linear single-index models.*
23. 5. 1995 Dipl.-Math. C. Wulff (Berlin): *Verzweigung von Spiralwellen in Reaktions-Diffusions-Systemen.*
24. 5. 1995 Dr. B. N. Khoromskij (Dubna): *On multilevel interface solvers for the Laplacian in presence of mesh refinement.*



- 24. 5. 1995** Dr. A. M. Khorunjii (Kharkov): *Spectral properties of sums of random rank-one operators.*
- 24. 5. 1995** Prof. Dr. D. Müller (Heidelberg): *Regression mit approximativen Modellen.*
- 30. 5. 1995** Dr. A. Schuppert (Frankfurt/M.): *Datenorientierte Modellierung mit schwachen Nebenbedingungen.*
- 31. 5. 1995** Dr. A. Juditsky (Rennes): *Adaptive algorithms for the pursuit of randomly varying parameters.*
- 1. 6. 1995** Dipl.-Math. J. Lügger (ZIB): *Neue Wege der mathematischen Informationsversorgung im Rahmen des verteilten Informationssystems für die Mathematik.*
- 2. 6. 1995** Dr. J. Grigull (Göttingen): *Große Abweichungen für Gleichgewichtsmaße parabolischer rationaler Abbildungen.*
- 7. 6. 1995** Dr. E. Herrmann (Darmstadt): *Lokal angepaßte Kernschätzung im nichtparametrischen Regressionsmodell.*
- 7. 6. 1995** Prof. Dr. S. Luckhaus (Bonn): *Implizite Zeitdiskretisierungen für Evolutionsgleichungen mit Oberflächenspannung.*
- 8. 6. 1995** Prof. Dr. M. A. Krasnoselskij (Moskau): *Reguläre Lösungen von Aufgaben mit un stetigen Nichtlinearitäten.*
- 8. 6. 1995** Dr. M. Wierse (Freiburg): *Upwind Finite Volumen Verfahren höherer Ordnung.*
- 13. 6. 1995** Prof. Dr. R. Heinrich (Berlin): *Mathematische Modelle enzymatischer Reaktionssysteme.*
- 14. 6. 1995** Prof. Dr. H. Bierens (Dallas): *Asymptotic theory of integrated conditional moment tests, Asymptotic power of the integrated conditional moment tests against large local alternatives.*
- 14. 6. 1995** Prof. Dr. I. H. Sloan (Sydney): *Guaranteed error bounds in the finite element method.*
- 15. 6. 1995** Prof. Dr. M. Vajteršic (Wien): *Some examples of parallel algorithms for massively SIMD and MIMD machines.*
- 15. 6. 1995** Prof. A. Vasil'eva (Moskau): *New results on transition layers of step-type.*
- 21. 6. 1995** Prof. Dr. R. Khasminski (Detroit): *A parameter estimation problem to indirect observations.*
- 23. 6. 1995** Prof. Dr. B. Hasselblatt (Boston): *Regularität glatter Blätterungen für hyperbolische Systeme.*
- 26. 6. 1995** Prof. Dr. B. A. Plamenevskij (St. Petersburg): *Pseudodifferential operators with discontinuous symbols.*

28. 6. 1995 Dr. C. Müller (Berlin): *Der Einfluß des Versuchsplanes auf den Bruchpunkt von Schätzungen.*
29. 6. 1995 Dr. A. Schmidt (Freiburg): *Eine Finite Elemente Methode zur Simulation von krümmungsabhängiger Erstarrung und Dendritenwachstum.*
5. 7. 1995 Prof. Dr. M. Maljutov (Moskau): *On sequential testing homogeneity.*
6. 7. 1995 Prof. Dr. J. J. Dongarra (Tennessee): *Software standards and tools for concurrent computing.*
11. 7. 1995 Dr. S. Nepomnyaschikh (Novosibirsk): *Preconditioning operators on unstructured grids.*
11. 7. 1995 Prof. Dr. J.-F. Rodrigues (Lissabon): *On a quasi-variational inequality arising in a semiconductor model.*
12. 7. 1995 Prof. Dr. V. A. Kondratev (Moskau): *On the asymptotics of solutions of nonlinear second order equations in cylindrical domains.*
12. 7. 1995 Prof. Dr. R. Liu (Cornell University): *Minimax estimations for nonparametric linear functionals with/without censoring.*
12. 7. 1995 Prof. Dr. S. A. Molchanov (North Carolina): *Percolation theory ideas and localization.*
13. 7. 1995 Dr. G. Mazurkevich (Stuttgart): *Frequency filtering for interface problems with Lagrange multipliers.*
18. 7. 1995 Prof. Dr. S. A. Molchanov (North Carolina): *Localization: Proofs and applications.*
26. 7. 1995 Prof. Dr. D. A. Dawson (Ottawa): *Infinite family structures in branching and stepping stone system.*
26. 7. 1995 Dr. Y. Jeon (Suwon, Korea): *Mesh grading method for Cauchy singular integral equations on intervals.*
9. 8. 1995 Dr. D. Weiß (Magdeburg): *Modellierung und numerische Simulation des Engspaltschweißens bei senkrechter Plattenposition.*
24. 8. 1995 Dipl.-Math. Th. Geßner (Freiburg): *Visualisierung zeitabhängiger Strömungen in 2D und 3D mit GRAPE.*
25. 8. 1995 Prof. Dr. S. Zheng (Shanghai): *On the coupled Cahn-Hilliard equations.*
9. 9. 1995 Prof. Dr. K. Burns (Evanston): *Constructing ergodic geodesic flows on spheres.*
9. 9. 1995 Prof. Dr. S. Troubetzkoy (Bielefeld): *Polygonal billiards.*
13. 9. 1995 Dr. B. Stoth (Bonn): *Asymptotisches Verhalten der Lösungen einer vektorwertigen Reaktions-Diffusionsgleichung.*

18. 9. 1995 Dr. Q. Zheng (München): *Neue Resultate zur Schaltkreissimulation.*
20. 9. 1995 Prof. Dr. Yu. Ingster (St. Petersburg): *Asymptotic minimax hypothesis testing and convex extremal problems.*
27. 9. 1995 Prof. Dr. M. Krbeč (Prag): *Limiting imbeddings and some applications.*
5. 10. 1995 Dr. S. Nepomnyaschikh (Novosibirsk): *Preconditioning operators for elliptic problems with parameters.*
10. 10. 1995 Prof. Dr. L. Fridman (Samara): *Separation of motions in singularly perturbed systems with relay control.*
11. 10. 1995 Dr. G. S. Michlin (Haifa), Prof. Dr. A. I. Koshelev (St. Petersburg): *Solomon G. Michlin (1908 – 1990).*
11. 10. 1995 Prof. Dr. A. I. Koshelev (St. Petersburg): *Sharp coercivity estimates for the Stokes system.*
17. 10. 1995 Prof. Dr. V. Strygin (Voronezh): *Higher order approximations for boundary value problems of singularly perturbed systems.*
17. 10. 1995 Dipl.-Math. Ch. Leis (Berlin): *Hopf-Verzweigung in Systemen mit sphärischer Symmetrie: Invariante Tori und verbindende Orbits.*
18. 10. 1995 Dr. B. Seifert (Zürich): *Vergleich von Schätzverfahren in der nichtparametrischen Regression.*
24. 10. 1995 Dr. V. Schulz (Heidelberg): *Large Scale Optimierungsverfahren mit Mehrgittermethoden und Anwendung auf die Optimierung von Turbinenschaufeln.*
25. 10. 1995 Prof. Dr. F. den Hollander (Nijmegen): *Ergodic properties of Markov random fields.*
25. 10. 1995 Dr. A. Gushchin (Moskau): *An information type inequality for the Hellinger process.*
30. 10. 1995 Prof. Dr. H. B. Nersessian (Jerewan): *High order algorithms for the solution of differential and integral equations.*
1. 11. 1995 Prof. Dr. G. Ben Arous (Paris): *Metastability of the 3d Ising model at very low temperatures.*
1. 11. 1995 Dr. S. Leonov (Moskau): *On the solution of one extreme problem and its application in nonparametrics.*
6. 11. 1995 Dipl.-Math. K. Bühring (Berlin): *Wavelets in der Bildverarbeitung.*
7. 11. 1995 Dr. S. Reich (Berlin): *Symplektische Integratoren in der Mehrkörpermechanik.*
8. 11. 1995 Dr. Ch. Külske (Berlin): *Instability of interfaces in random media.*

8. 11. 1995 Dr. F. Leblanc (Paris): *Wavelet density estimation for a class of continuous time processes.*
8. 11. 1995 Prof. Dr. B. A. Plamenevskij (St. Petersburg): *On the spectral asymptotics for the Neumann problem in singular degenerating domains.*
9. 11. 1995 Prof. Dr. F. Kirillova (Minsk): *The synthesis problem in optimal control.*
9. 11. 1995 Prof. Dr. A. Vasil'eva (Moskau): *Stability of dissipative structures.*
10. 11. 1995 Prof. Dr. N. Morozov (St. Petersburg): *About one problem in wave dynamics.*
13. 11. 1995 Prof. Dr. B. A. Plamenevskij (St. Petersburg): *Pseudodifferential operators with singularities (Teil 1).*
14. 11. 1995 Prof. Dr. K. Lopatin (Kiew): *Nonlinear oscillations and dynamical systems: Normalization and averaging.*
15. 11. 1995 Prof. Dr. J. Frehse (Bonn): *Regularitätsfragen bei stationären mehrdimensionalen Navier-Stokes-Gleichungen.*
15. 11. 1995 Prof. Dr. P. Krejčí (Prag): *Effects of hysteresis in hyperbolic PDE's.*
15. 11. 1995 Prof. Dr. J. Magnus (Tilburg): *The pathology of pre-test estimators.*
15. 11. 1995 Dr. L. Overbeck (Bonn): *Nichtlineare Superprozesse.*
15. 11. 1995 Prof. Dr. B. A. Plamenevskij (St. Petersburg): *Boundary value problems in domains with piece-wise smooth boundaries (Teil 1).*
20. 11. 1995 Prof. Dr. B. A. Plamenevskij (St. Petersburg): *Pseudodifferential operators with singularities (Teil 2).*
21. 11. 1995 Prof. Dr. A. Samoilenko (Kiew): *Perturbation theory of smooth invariant tori of dynamical systems.*
22. 11. 1995 Prof. Dr. P. Bjørstad (Bergen): *Additive Schwarz methods and discontinuous coefficient problems.*
22. 11. 1995 Prof. Dr. D. Braess (Bochum): *Towards algebraic multigrid.*
22. 11. 1995 Dr. A. Juditsky (Rennes): *Optimal adaptive control: Parametric and non-parametric case.*
22. 11. 1995 Dipl.-Math. N. Neuss (Heidelberg): *Homogenization and multigrid.*
22. 11. 1995 Prof. Dr. B. A. Plamenevskij (St. Petersburg): *Boundary value problems in domains with piece-wise smooth boundaries (Teil 2).*
22. 11. 1995 Prof. Dr. G. Wittum (Stuttgart): *Frequenz filtering for heterogeneous problems from groundwater flow.*

- 23. 11. 1995** Dr. P. Bastian (Stuttgart): *Parallel adaptive multigrid methods.*
- 23. 11. 1995** Prof. Dr. R. H. W. Hoppe (Augsburg): *Adaptive multilevel techniques for mixed hybridization on hexahedral triangulations.*
- 23. 11. 1995** Dr. P. Krzyzanowski (Warschau): *FEM for micropolar fluids.*
- 23. 11. 1995** Dipl.-Ing. M. Kuhn (Linz): *Parallel multilevel solvers for boundary and finite element equations in solid mechanics.*
- 23. 11. 1995** Prof. Dr. A. Meyer (Chemnitz-Zwickau): *Comparisons of multi-level-preconditioners used in parallel on MIMD.*
- 23. 11. 1995** Dr. S. Sauter (Kiel): *Composite finite elements for the approximation of PDEs on domains with complicated micro-structures.*
- 23. 11. 1995** Prof. Dr. V. Shaidurov (Krasnojarsk): *Realization and convergence proof of cascadic iterative methods in domains with curvilinear boundary.*
- 23. 11. 1995** Dr. Th. Störtkuhl (Warschau): *An adaptive numerical solver for the biharmonic equation on sparse grids.*
- 23. 11. 1995** Dr. G. W. Zumbusch (ZIB): *Adaptive h-p approximation procedures – The example of numerical quadrature.*
- 24. 11. 1995** Prof. Dr. M. Dryja (Warschau): *Additive Schwarz Mortar method for finite element elliptic problems.*
- 24. 11. 1995** Dr. M. Griebel (München): *Algebraic multigrid methods for the solution of the Navier-Stokes equations in complicated geometries.*
- 24. 11. 1995** Prof. Dr. W. Hackbusch (Kiel): *On the nonlinear domain decomposition method.*
- 24. 11. 1995** Dr. M. Mróz (Warschau): *Hybrid methods with strip substructures.*
- 27. 11. 1995** Prof. Dr. B. A. Plamenevskij (St. Petersburg): *Pseudodifferential operators with singularities (Teil 3).*
- 28. 11. 1995** Prof. Dr. K. Sakamoto (Hiroshima): *Infinite dimensional systems describing an exothermic reaction-diffusion process.*
- 29. 11. 1995** Prof. Dr. P. Colli (Turin): *The standard phase-field model with memory.*
- 29. 11. 1995** Prof. Dr. S. Pergamenschikov (Tomsk): *On guaranteed estimation of the mean of an autoregressive process.*
- 29. 11. 1995** Prof. Dr. B. A. Plamenevskij (St. Petersburg): *Boundary value problems in domains with piece-wise smooth boundaries (Teil 3).*
- 30. 11. 1995** Prof. Dr. F. Alabau (Bordeaux): *Asymptotic estimates for the solution of the drift-diffusion model.*

30. 11. 1995 Dr. A. Reusken (Eindhoven): *A multigrid method based on incomplete Gaussian elimination.*
5. 12. 1995 Prof. Dr. K. P. Hadeler (Tübingen): *Reaktionstelegraphensysteme.*
5. 12. 1995 Prof. Dr. P. Laure (Nizza): *Self sustained magnetic flows in spherical symmetry.*
6. 12. 1995 Prof. Dr. K. P. Hadeler (Tübingen): *Der Chemostat: Quasimonotone Systeme und singuläre Störungen.*
6. 12. 1995 Prof. Dr. D. Natroshvili (Tiflis): *Steady state oscillation problems of the thermoelasticity theory of anisotropic bodies.*
6. 12. 1995 Prof. Dr. L. C. G. Rogers (Bath): *The potential approach to term structure of interest rates and foreign exchange rates.*
8. 12. 1995 Prof. Dr. S. M. Ermakov (St. Petersburg): *Comparative complexity of the Monte Carlo method for solving systems of linear algebraic equations.*
8. 12. 1995 Dr. M. Koenig (Nizza): *Linearization at equilibria and hyperbolicity for vector fields on the orbit space of the action of a compact Lie group.*
8. 12. 1995 Prof. Dr. K. K. Sabelfeld (Novosibirsk): *Stochastic models of turbulence and applications to particle transport.*
12. 12. 1995 Prof. Dr. V. Butuzov (Moskau): *Singulär gestörte Systeme und Differentialgleichungen.*
13. 12. 1995 Prof. Dr. G. Bol (Karlsruhe): *Auswertung von Qualitätsregelkarten mit künstlichen neuronalen Netzen.*
13. 12. 1995 Prof. Dr. I. V. Pavlov (Rostov am Don): *Martingale spaces with mixed norm and their applications.*
13. 12. 1995 Prof. Dr. V. Vatoutine (Moskau): *Random walk and maxima of critical branching processes.*
15. 12. 1995 Prof. Dr. J. Kačur (Bratislava): *Relaxation schemes for degenerate parabolic systems.*
19. 12. 1995 Dr. M. Shaskov (Novgorod): *On bifurcations of the heteroclinic contours with two saddle equilibrium points.*
20. 12. 1995 Prof. Dr. J. Dickey (Minnesota): *Filtered-variate prior distributions for histogram smoothing.*
- Prof. Dr. George Papanicolaou von der Stanford University hielt im Zeitraum vom 10. 10. – 27. 10. 1995 eine Gastvortragsreihe (9 Vorlesungen) zum Thema *Convection and diffusion in random media.***

## 5.10 Mitveranstaltung auswärtiger Tagungen

### H. Babovsky

3. – 7. 7. 1995 Minisymposium *Nonlinear modelling of innovation diffusion*,  
ICIAM '95, Hamburg

### H. Gajewski

7. – 10. 5. 1995 7<sup>th</sup> *European Symposium on Semiconductor Detectors*,  
Schloß Elmau, Deutschland
3. – 7. 7. 1995 Minisymposium *Semiconductor Device Simulation*,  
ICIAM '95, Hamburg

### R. Lauterbach

3. 7. 1995 Minisymposium *Equivariant dynamical systems*,  
ICIAM '95, Hamburg

### R. Lauterbach

19. – 21. 6. 1995 Workshop *Nonlinear Dynamical Systems and Computer Algebra*,  
RIACA Amsterdam

### M. Nussbaum

21. – 24. 8. 1995 Session *Inverse Problems*,  
21st European Meeting of Statisticians, Aarhus, Dänemark

### S. Prößdorf

25. – 29. 9. 1995 Tagung *Recent approximation theory results in the numerical solution of differential and integral equations*,  
Cortona, Italien

### K. R. Schneider

26. – 30. 6. 1995 *International Workshop on Singular Solutions and Perturbations in Control Systems*,  
Pereslavl-Zalessky (Rußland)

### J. Sprekels

18. – 22. 9. 1995 Sektion *Mathematische Modelle in den Anwendungen*,  
DMV-Jahrestagung, Ulm
3. – 7. 7. 1995 Minisymposium *Diffusive Phase Transitions*,  
ICIAM '95, Hamburg

## 5.11 Produkte

### ClusCorr unter EXCEL

Die seit 1992 eingesetzte PC-Software *ClusCorr* zur Clusteranalyse, Klassifikation und multivariaten Grafik unter dem Betriebssystem DOS wurde völlig neu unter MS EXCEL als sogenanntes AddIn programmiert. Die Höherentwicklung von *ClusCorr* wird insbesondere durch die Ausgabe hochauflösender Grafiken sowie durch Verknüpfungen von Daten, Ergebnissen und Grafiken (sogenannte Datenlinks) dokumentiert. Die Möglichkeit zur statistischen Datenanalyse und multivariaten grafischen Darstellung sehr umfangreicher und hochdimensionaler Datenmengen stellt eine neue Qualität von *ClusCorr* dar. Neuentwickelte adaptive Klassifikationsmethoden wurden zusätzlich in *ClusCorr* verfügbar gemacht. Mit *ClusCorr* können die Ergebnisse validiert werden. *ClusCorr* läuft auf PC und Workstation.

### IBG

IBG (Intersection-Based Grid Generation and Geometry Description Package) besteht aus einem universell einsetzbaren Gittergenerator und einem Paket zur Erzeugung von Geometriebeschreibungen.

Der Gittergenerator erlaubt die vollautomatische Erzeugung von Delaunay-Gittern in 1D, 2D und 3D. Er erlaubt es, die Gitterdichte lokal und richtungsabhängig zu steuern.

Das Geometriebeschreibungspaket erlaubt eine einfache Erzeugung und Veränderung auch sehr komplizierter Geometrien.

### ToSCA

ToSCA ist ein vielfach genutztes Programmsystem zur numerischen Simulation von Ladungstransportvorgängen in Halbleiterstrukturen. Es basiert auf dem Drift-Diffusionsmodell, berücksichtigt aber eine Vielzahl zusätzlicher physikalischer Effekte. ToSCA kann weitgehend beliebige räumlich zweidimensionale Strukturen behandeln und ist für verschiedene Betriebssysteme verfügbar.

### XClust

Die interaktive Statistiksprache *XploRe* (Programmiersprache C++; entwickelt für PC unter der Leitung von W. Härdle an der Humboldt-Universität zu Berlin) ist nun auch unter UNIX verfügbar. Die vom WIAS eingefügten Clusteranalysemethoden sind in der sogenannten *XClust*-Library zusammengefaßt. Die Ergebnisse der adaptiven Clusteranalysemethoden von *XClust* können mit der dynamischen Grafik von *XploRe* wirkungsvoll präsentiert werden. *XClust* kann zusammen mit *XploRe* bezogen werden.



## 5.12 Drittmittelprojekte

### Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (BMBF)

- **Anwendungsorientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik**
  - Teilprojekt 1: „Reaktions-Diffusionsgleichungen in Mehrphasensystemen mit Anwendungen in der Halbleitertechnologie“
  - Teilprojekt 2: „Modellierung und 2D-Simulation von Quantum-Well-Halbleiterlasern unter Einbindung des Schrödinger-Poisson-Systems“
  - Teilprojekt 3: „Numerische Verfahren zur Lösung großer strukturierter Systeme von Algebra-Differentialgleichungen der chemischen Verfahrenstechnik“
  - Teilprojekt 4: „Projektionsverfahren zur Simulation von Copolymerprozessen“
- Verbundvorhaben „Nutzung wissenschaftlich-technischer Datenbanken durch außeruniversitäre Forschungseinrichtungen in den neuen Bundesländern“

### DAAD,

- PROCOPE
- Wissenschaftleraustausch mit Rußland

### Deutsche Forschungsgemeinschaft, Bonn

- „Multiskalen-Methoden für die numerische Behandlung von Operatorgleichungen“
- „Regularisierung von Randintegralgleichungen erster Art durch direkte Diskretisierung“
- Schwerpunktprogramm: „Randelementmethoden“
- Schwerpunktprogramm: „Strukturbildung in dissipativen kontinuierlichen Systemen“
- Schwerpunktprogramm: „Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung“
- Schwerpunktprogramm: „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“
- Sonderforschungsbereich 256, Bonn  
„Nichtlineare partielle Differentialgleichungen“
- Sonderforschungsbereich 359, Heidelberg  
„Reaktive Strömungen, Diffusion und Transport“
- Sonderforschungsbereich 373, Berlin  
„Quantifikation und Simulation ökonomischer Prozesse“
- Wissenschaftleraustausch mit Rußland und Moldawien

**Europäische Union**

- (HCM) „Stochastic modelling of large disordered systems“
- (HCM) „Phase transitions and surface tension“ (Koordinator: J. Sprekels)
- (HCM) „Nonlinear boundary value problems“
- (HCM) „Statistics of stochastic processes“
- (INTAS) „Nonlinear and singular partial differential equations and their applications“ (Koordinator: J. Sprekels)

**Gesellschaft für wasserwirtschaftliche Planung und Systemforschung mbH, Berlin**

- „Integration des Gittergenerators IBG in das 3D-Grundwassersimulationssystem FEFLOW“

**Physikalisch-Technische Bundesanstalt**

- „Numerische Simulation der Streulichtausbreitung in optisch dicken Gewebeschichten“

**5.13 Auszeichnungen**

- Dr. Jörg Schmeling: Förderpreis der LEOPOLDINA für Junge Naturwissenschaftler.