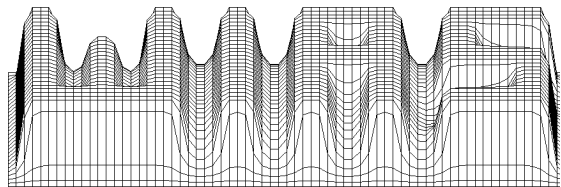


**Weierstraß–Institut
für Angewandte Analysis und Stochastik
(WIAS)**

im Forschungsverbund Berlin e. V.

Jahresforschungsbericht 1996



Berlin 1997

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

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
World Wide Web: <http://www.wias-berlin.de/>

Inhaltsverzeichnis

1	Vorwort	4
2	Wissenschaftlicher Beirat des WIAS	6
3	Aufgabenstellung und Struktur des WIAS	7
3.1	Aufgabenstellung des WIAS	7
3.2	Organisatorische Struktur des WIAS	8
3.2.1	Forschungsgruppe Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen	9
3.2.2	Forschungsgruppe Dynamische Systeme und Steuerungstheorie	9
3.2.3	Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen	10
3.2.4	Forschungsgruppe Integralgleichungen und Pseudodifferentialgleichungen	10
3.2.5	Forschungsgruppe Stochastische Systeme mit Wechselwirkung	11
3.2.6	Forschungsgruppe Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik	11
3.2.7	Forschungsgruppe Differenzierbare Dynamik und Ergodentheorie	12
3.2.8	Wissenschaftlich-technische Dienste	12
4	Forschungsergebnisse und Anwendungsprojekte	14
4.1	Forschungsgruppe Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen	14
4.1.1	Zusammenfassung	14
4.1.2	Projekte	15
	Temperaturberechnung in Halbleiterbauelementen	15
	Steuerung von Shape-Memory-Drähten	18
	Stabilität von Verdichtersystemen – Mathematische Aspekte	19
	QW Laser	20
	Untersuchung eines mathematischen Modells der Chemotaxis	24
	Reaktions-Diffusionsgleichungen mit Anwendungen in der Halbleitertechnologie	26
	Modellierung und Simulation der Oberflächenhärtung von Stahl	29
	Identifikation von Gebieten erhöhter Absorption aus zeitaufgelösten Messungen in der optischen Tomographie	30
	Phasenfeldgleichungen und Stefan-Probleme	32
	Halbleitergleichungen mit der Einteilchenenergie als einer unabhängigen Variablen	34
	Zeitliche Asymptotik der Lösung der Korteweg-de-Vries-Gleichung	35
	Adaptive Optimierung von Flugprofilen mit Gedächtnislegierungen	36
	Hysteresephänomene in Magnetoelastizität und Thermoelastoplastizität	38
	Polymerabbau	41
4.2	Forschungsgruppe Dynamische Systeme und Steuerungstheorie	43
4.2.1	Zusammenfassung	43

4.2.2	Projekte	44
	Modellierung, Analysis und Numerik von Prozessen in optischen Kommunikationssystemen	44
	Projektionsverfahren zur Simulation von Copolymerprozessen	48
	Optimale Steuerung diskontinuierlicher Destillationsprozesse	50
	Hydrodynamische Probleme	52
	Singulär gestörte Systeme mit Gleitzuständen	55
	Beulzustände in mechanischen Strukturen	57
	Stabilitätswechsel in Systemen mit mehreren Zeitskalen	58
4.3	Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen	59
4.3.1	Zusammenfassung	59
4.3.2	Projekte	60
	Numerische Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen	60
	Numerische Lösung strukturierter DAE-Systeme	63
	Elektromagnetische Simulation von Höchsthfrequenzschaltungen	64
	Visualisierung	68
	Simulation von Transportprozessen in porösen Medien	69
	Entwicklung von Algorithmen und Softwarekomponenten für die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen	71
4.4	Forschungsgruppe Integralgleichungen und Pseudodifferentialgleichungen	74
4.4.1	Zusammenfassung	74
4.4.2	Projekte	75
	Diffraktive Optik	75
	Integralgleichungsmethoden in Elastizitätstheorie und Tragflügeltheorie	78
	Numerische Lösung des fixen geodätischen Randwertproblems	81
	Inverse Probleme in Hydrologie und Seismik	83
	Multiskalen- und Randelementmethoden	86
4.5	Forschungsgruppe Stochastische Systeme mit Wechselwirkung	90
4.5.1	Zusammenfassung	90
4.5.2	Projekte	91
	Tiefenperaturphasen in Modellen mit langreichweitiger Wechselwirkung	91
	Spin-Gläser und Neurale Netze	93
	Mikroskopische Theorie der Phasentrennung	95
	Elektronentransport in ungeordneten Materialien	97
	Katalytische Verzweigungsstrukturen	98
	Stochastische Teilchensysteme	100
4.6	Forschungsgruppe Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik	102
4.6.1	Zusammenfassung	102
4.6.2	Projekte	103
	Statistische Software	103
	Dynamische stochastische Algorithmen	106
	Entscheidungstheorie für nichtparametrische Experimente	108
	Numerik stochastischer Differentialgleichungen	110
	Statistische Ökonometrie	113

4.7	Forschungsgruppe Differenzierbare Dynamik und Ergodentheorie	115
4.7.1	Zusammenfassung	115
4.7.2	Projekte	116
	Geometrie von Basismengen	116
	Einzugsbereiche hyperbolischer Attraktoren	117
	Probleme der Theorie der dynamischen Zeta-Funktionen	118
	Dimension hyperbolischer Maße - die Eckmann-Ruelle-Vermutung	121
	Starrheit multifraktaler Spektren	122
	Glattheit von invarianten Blätterungen	123
	Irreguläre Orbits	124
5	Wissenschaftlich-technische Dienste	125
5.1	Bibliothek	125
5.2	Fachinformation	126
5.2.1	Projekte	127
	Nutzung naturwissenschaftlich-technischer Datenbanken durch Forschungs-	
	einrichtungen in den neuen Bundesländern	127
5.3	Rechentechnik	128
6	Publikationen, wissenschaftliches Leben	130
6.1	Veröffentlichungen	130
6.2	Preprints, Reports	138
6.2.1	WIAS-Preprint-Serie	138
6.2.2	WIAS-Report-Serie	143
6.2.3	Preprints/Reports an anderen Einrichtungen	143
6.3	Mitherausgabe von Zeitschriften	145
6.4	Vorträge und Gastaufenthalte von Mitarbeitern	146
6.4.1	Arbeitsaufenthalte von Mitarbeitern	161
6.5	Vorlesungen und Seminare	164
6.6	Dissertationen, Habilitationen und Rufe	167
6.7	Eigene Tagungen und Veranstaltungen des WIAS	168
6.8	Gastaufenthalte am WIAS	172
6.9	Gastvorträge	179
6.10	Mitveranstaltung auswärtiger Tagungen	189
6.11	Produkte	190
6.12	Drittmittelprojekte	191

1 Vorwort

Das Weierstraß -Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS) legt hiermit Kollegen und Förderern des Instituts seinen Jahresforschungsbericht 1996 vor.

Der Bericht gibt in seinem ersten Teil Auskunft über die gemachten Fortschritte und die erzielten Resultate, gliedert nach Forschungsgebieten, Projekten und Einzelthemen. Im zweiten Teil wird ein Überblick über das wissenschaftliche Leben am WIAS gegeben.

In wissenschaftlicher Hinsicht war das Jahr 1996 wiederum erfolgreich. Es konnten wesentliche Beiträge sowohl zur Lösung konkreter Anwendungsprobleme als auch zu innermathematischen Problemstellungen geleistet werden. Dabei nahmen die interne Verflechtung innerhalb des Instituts und die Anzahl der interdisziplinär bearbeiteten Aufgabenstellungen aus Industrie, Wirtschaft und Wissenschaft weiter zu. Die positive Entwicklung spiegelt sich wider insbesondere in der Anzahl der Veröffentlichungen, Habilitationen und Berufungen, der betreuten Nachwuchswissenschaftler sowie in der Drittmittelwerbung.

Die an sich schon intensive Kooperation mit den Hochschulen im Raum Berlin wurde durch weitere personelle Verbindungen gestärkt; so wurde Prof. Gröger, stellvertretender Forschungsgruppenleiter am WIAS, im Berichtsjahr zum Ersten Vizepräsidenten der Humboldt-Universität gewählt, und zwei Forschungsgruppenleiter hielten Honorarprofessuren an der Freien Universität inne. Neben diesen rein personellen Verbindungen wurde die Zusammenarbeit mit den Hochschulen durch die vielfältigen von Mitarbeitern des WIAS abgehaltenen Lehrveranstaltungen, durch die Beteiligung an Sonderforschungsbereichen, Schwerpunktprogrammen und Graduiertenkollegs der DFG, durch die gemeinschaftliche Bearbeitung von Forschungsprojekten sowie durch die Betreuung von Diplom- und Doktorarbeiten mit Leben erfüllt.

Ein zentrales Problem für das Institut war auch im Jahre 1996 die dauerhafte Besetzung der Stelle des Leiters der Forschungsgruppe *Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen*. Der Wissenschaftliche Beirat des WIAS hat am 01.03.1996 die Empfehlung ausgesprochen, diese Stelle mit einer C4-Professur an einer der Berliner Hochschulen zu verknüpfen, um diesen strukturellen Mangel zu beheben.

Mit der konsequenten Umsetzung des neuen Forschungsprogramms für die Jahre 1997 – 1999 strebt das Institut den kontinuierlichen Ausbau seiner Stellung als führende Institution im Bereich der mathematischen Behandlung konkreter Problemstellungen aus komplexen Anwendungsfeldern an. Wichtigste strukturelle Neuerung ist dabei die Gründung der neuen Forschungsgruppe *Kontinuumsmechanik*, durch die ab dem 01.01.1997 die bisherige Forschungsgruppe *Differenzierbare Dynamik und Ergodentheorie* ersetzt wird; ferner wird der Bereich *Nichtlineare Optimierung/Optimale Steuerung* verstärkt.

Unverändert bleibt das übergeordnete Ziel des Instituts, Grundlagenforschung und anwendungsorientierte Forschung miteinander zu verbinden und durch neue wissenschaftliche Erkenntnisse zur Fortentwicklung innovativer Technologien beizutragen. Dazu sollte dem Institut eine Grundausstattung gewährt werden, die ihm eine angemessene Chance im Wettbewerb um externe Fördermittel einräumt.

Im Rahmen der Gesamtevaluierung der Institute der Wissenschaftsgemeinschaft Blaue Liste e. V. wird das WIAS am 07.03.1997 durch den Wissenschaftsrat evaluiert werden. Das Institut sieht diesem Ereignis mit Zuversicht entgegen.

Wie in den vergangenen Jahren hoffen wir, daß dieser Bericht möglichst vielen Kollegen und

Förderern aus Industrie, Wirtschaft und Wissenschaft zur Information dienen und Anregungen zur Zusammenarbeit geben möge.

Berlin, im Januar 1997

J. Srekels
Direktor

2 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)
Takustraße 7

14195 Berlin

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

10099 Berlin

Prof. Dr. K.-H. Hoffmann
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
Max-Planck-Institut
für Mathematik in den
Naturwissenschaften
Inselstraße 22–26

04103 Leipzig

3 Aufgabenstellung und Struktur des WIAS

3.1 Aufgabenstellung des WIAS

Das *Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS)* im Forschungsverbund Berlin e. V. verfolgt als Institut der Wissenschaftsgemeinschaft Blaue Liste e. V. Forschungsziele, die von gesamtstaatlichem Interesse und überregionaler Bedeutung sind. Die Gründung des Instituts geht auf eine Empfehlung des Wissenschaftsrats zurück, die in der *Stellungnahme zu den außeruniversitären Forschungseinrichtungen der ehemaligen Akademie der Wissenschaften der DDR in den Fachgebieten Mathematik, Informatik, Automatisierung und Mechanik* vom 13.03.1991 ausgesprochen worden ist.

Entsprechend den Empfehlungen des Wissenschaftsrats betreibt das WIAS *projektorientierte* Forschungen in Angewandter Mathematik, insbesondere in *Angewandter Analysis* und *Angewandter Stochastik*, mit dem Ziel, zur Lösung *komplexer Problemkreise aus Wirtschaft, Wissenschaft und Technik* beizutragen. Die Herangehensweise ist dabei ganzheitlich, d. h., am WIAS wird der gesamte Problemlösungsprozeß von der interdisziplinären Modellierung über die mathematisch-theoretische Behandlung des Modells bis hin zur konkreten numerischen Simulation betrieben.

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

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

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

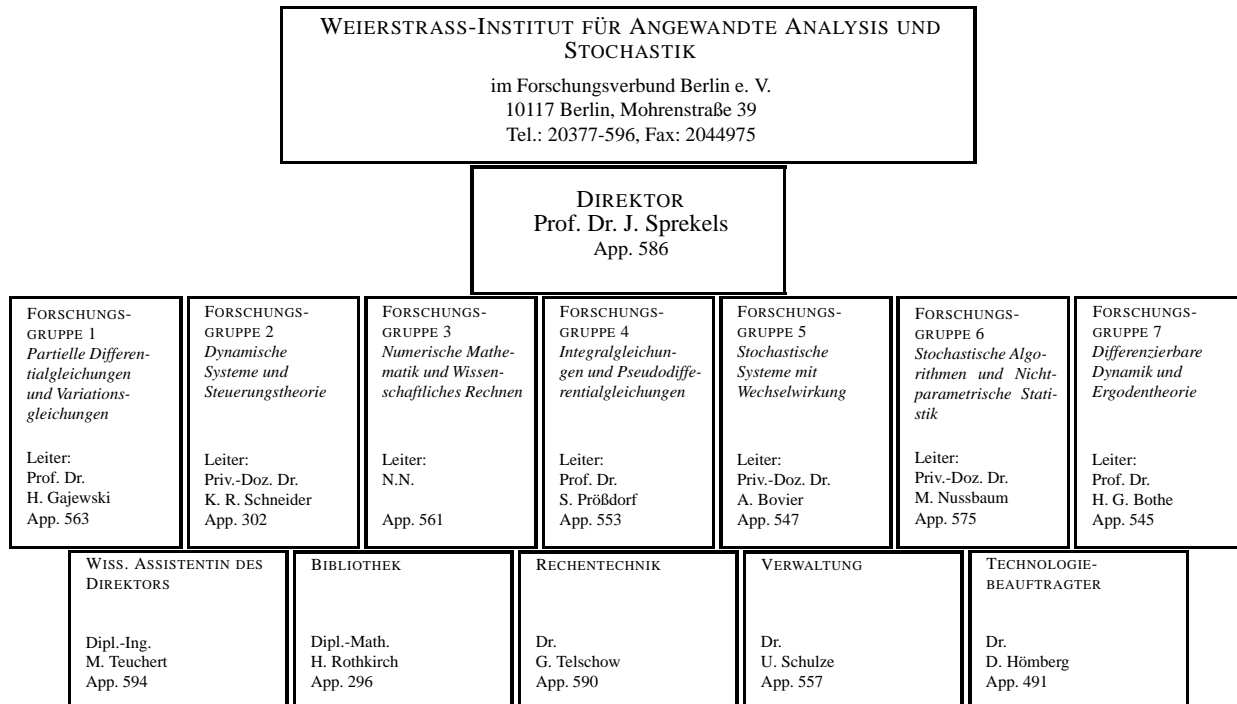
- Entwicklung von Heterobipolartransistoren,
- Modellierung von Quantum-Well-Halbleiterlasern,
- Dynamik von Mehrsektions-DFB-Lasern,
- Wärmebehandlung und Widerstandsschweißen von Stählen,
- Modellierung und Anwendung moderner Materialien (z. B. Legierungen mit Formgedächtnis, Superlegierungen, Materialien mit piezoelektrischen und magnetostriktiven Eigenschaften),
- Modellierung von Spingläsern,
- mikro-, meso- und makroskopische Modellierung von Phasenumwandlungen,
- Optimierung von Prozessen der Chemischen Verfahrenstechnik,

- Diffraktive Optik,
- Strömungen durch poröse Medien und Mechanik poröser Körper (z. B. Böden, Beton, Katalysatoren),
- Bruchmechanik und Aerodynamik,
- Statistische Clusteranalyse zur Datenreduktion und Hypothesensuche (mit Anwendung z. B. in der Biometrie),
- Stochastische Algorithmen für kinetische Gleichungen der Gasdynamik,
- Modellierung stochastischer Einflüsse in Hydrologie, Seismologie und Kommunikationstechnik,
- Statistische Ökonometrie.

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

3.2 Organisatorische Struktur des WIAS

Zur Erfüllung seiner wissenschaftlichen Aufgabenstellung war das WIAS im Berichtsjahr 1996 nach fachspezifischen Gesichtspunkten in sieben Forschungsgruppen gegliedert; hinzu kamen die wissenschaftlich-technischen Dienste. Im folgenden sind die Aufgaben dieser Abteilungen angegeben. Dabei ist zu bemerken, daß zur Lösung konkreter Anwendungsprobleme in der Regel *längerfristig kooperierende interdisziplinäre Projektgruppen* zusammen mit Anwendern gebildet werden, in die Institutsmitarbeiter aus verschiedenen Fachrichtungen ihre jeweilige mathematische Expertise einbringen. Diese Arbeitsweise nutzt die spezifischen Möglichkeiten eines außeruniversitären Instituts und trägt mit zur *horizontalen Vernetzung* innerhalb des Instituts bei. Die Verbesserung der horizontalen Vernetzung innerhalb des Instituts im Sinne eines möglichst effektiven Einsatzes der personellen Ressourcen ist eine ständige Aufgabe des Instituts.



3.2.1 Forschungsgruppe Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen

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

Die Forschungsschwerpunkte der Forschungsgruppe liegen auf den Gebieten

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

3.2.2 Forschungsgruppe Dynamische Systeme und Steuerungstheorie

Die Arbeiten dieser Forschungsgruppe befassen sich mit der qualitativen Analyse und numerischen Untersuchung parameterabhängiger Dynamischer Systeme aus den Anwendungen und ihrer Steuerung. Die betrachteten Systeme modellieren Prozesse in Natur, Wirtschaft und

Technik. Aufgrund der Komplexität der zu untersuchenden Prozesse kann ihr Verhalten nur in seltenen Fällen rein analytisch bestimmt werden. Ein zentrales Problem stellt deshalb die *Reduktion* der mathematischen Modelle unter Beibehaltung essentieller Eigenschaften dar. Derzeit liegen die Forschungsschwerpunkte der Forschungsgruppe auf den Arbeitsfeldern

- Optoelektronik,
- Chemische Verfahrenstechnik,
- Geophysik.

3.2.3 Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen

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

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

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

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

3.2.4 Forschungsgruppe Integralgleichungen und Pseudodifferentialgleichungen

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

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

Die Schwerpunkte der Arbeiten der Forschungsgruppe liegen in den Anwendungsfeldern

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

3.2.5 Forschungsgruppe Stochastische Systeme mit Wechselwirkung

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

Die Forschungsschwerpunkte der Forschungsgruppe liegen auf den Gebieten

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

3.2.6 Forschungsgruppe Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik

Mit dem Vordringen stochastischer Modellbildungen bei der Untersuchung von Anwendungsproblemen wächst der Bedarf an effektiven statistischen Verfahren. Die Forschungsgruppe befaßt sich mit Arbeiten zur angewandten, algorithmisch orientierten Wahrscheinlichkeitstheorie und Mathematischen Statistik, die konstruktive und theoretische Aspekte statistischer und numerischer Aufgabenstellungen beinhalten und ergänzt werden durch Komplexitätsuntersuchungen. Im Vordergrund stehen dabei Anwendungen in den Wirtschafts- und Ingenieurwissenschaften. Insbesondere geht es um die Behandlung inverser und schlecht gestellter Probleme mit Methoden der nichtparametrischen Statistik, um die Numerik und Statistik stochastischer Differentialgleichungen und um die Effizienz stochastischer Algorithmen.

Die Forschungstätigkeit der Forschungsgruppe orientiert sich an den Anwendungsfeldern

- Statistische Clusteranalyse mit Anwendungen (z. B. in der Biometrie),
- Stochastische Algorithmen für kinetische Gleichungen,
- Modellierung stochastischer Einflüsse in Biologie, Hydrologie, Seismologie und Kommunikationstechnik,
- Statistische Ökonometrie.

3.2.7 Forschungsgruppe Differenzierbare Dynamik und Ergodentheorie

Die Gruppe arbeitete auf zwei Gebieten, die durch ihre Methodik miteinander verknüpft sind. Zum einen handelte es sich um Grundlagenuntersuchungen mathematischer Strukturen, die aus der Modellierung von Evolutionsprozessen hervorgingen. Sie betrafen invariante Mengen und Attraktoren dynamischer Systeme mit den zugehörigen invarianten Maßen und numerischen Invarianten. Dabei wurden Fragen der stochastischen Dynamik behandelt. In der zweiten Arbeitsrichtung wurden Ideen und Methoden der Dynamik auf klassische mathematische Probleme angewandt.

Gegenstand der Untersuchungen waren

- 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.

3.2.8 Wissenschaftlich-technische Dienste

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

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

Die *Verwaltung* erledigt die für die Arbeitsfähigkeit des Instituts notwendigen verwaltungstechnischen und organisatorischen Aufgaben. Das WIAS ist mit derzeit sieben weiteren naturwissenschaftlichen Forschungsinstituten im Forschungsverbund Berlin e. V. (FVB) rechtlich zusammengeschlossen. Administrative Aufgaben werden im FVB zwecks einer effizienten einheitlichen Verwaltungsleistung arbeitsteilig von der *Gemeinsamen Verwaltung des FVB* und den *Institutsverwaltungen* erbracht. Zentrale administrative Leistungen und Servicefunktionen sind der Gemeinsamen Verwaltung zugeordnet, während institutsspezifische Verwaltungsvorgänge und „Interface-Funktionen“ im Verhältnis zur wissenschaftlichen Arbeit direkt im Institut wahrgenommen werden. Die Zusammenarbeit zwischen Gemeinsamer Verwaltung, Geschäftsführung,

Institutsleitung und Institutsverwaltung wird durch die *Geschäftsordnung des FVB* geregelt. Dem *Geschäftsführer* des FVB obliegt danach die Führung der Verwaltungsgeschäfte. Er ist der Beauftragte des Institutshaushaltes im Sinne der haushaltsrechtlichen Bestimmungen und übt die Fachaufsicht in den administrativen Angelegenheiten unter Berücksichtigung der personalrechtlichen und sachlichen Entscheidungsbefugnisse des Institutsdirektors aus.

4 Forschungsergebnisse und Anwendungsprojekte

4.1 Forschungsgruppe Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen

4.1.1 Zusammenfassung

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

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

Die Arbeiten wurden überwiegend in interdisziplinärer Kooperation im Rahmen von Anwendungsprojekten durchgeführt. Ihr Spektrum reicht dabei von grundlegenden qualitativen Untersuchungen zur Existenz, Einzigkeit, Regularität und dem asymptotischen Verhalten von Lösungen der Gleichungen über die Begründung, Implementation und praktische Erprobung von Näherungsverfahren bis zur Installation von Lösungsalgorithmen bei den Kooperationspartnern. Eine besondere Rolle spielten vom BMBF geförderte Verbundprojekte zur Entwicklung von Quantum-Well-Halbleiterlasern und SiGe-Heterojunction-Bipolartransistoren.

4.1.2 Projekte

Temperaturberechnung in Halbleiterbauelementen

Bearbeiter: G. Albinus, J. A. Griepentrog

Kooperation: G. Wachutka, Lehrstuhl für technische Elektrophysik, TU München,
K. Gärtner, Institut für Integrierte Systeme, ETH Zürich,
B. Heinemann, Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder) GmbH,
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 ein formaler thermodynamisch motivierter Zugang zum Energiemodell mit Methoden der konvexen Analysis funktionalanalytisch begründet. Insbesondere wurde ein neuer Zugang gefunden, der dem Gummel-Schema für das Drift-Diffusionsmodell entspricht.

Die Bilanzgleichungen für die Ladungsträgerdichten n und p und für die Dichte u der inneren Energie des Systems, das aus dem Gitter und Ladungsträgern besteht, werden dabei in der Form

$$\partial_t \begin{pmatrix} n \\ p \\ u \end{pmatrix} + \nabla \cdot \left[\mathbf{D} \begin{pmatrix} \nabla \xi \\ \nabla \eta \\ \nabla \tau \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} -R \\ -R \\ \Psi \nabla \cdot (j_p - j_n) \end{pmatrix} \quad (1)$$

geschrieben. Dabei ist \mathbf{D} eine symmetrische positiv definite Matrix, deren Elemente ebenso wie die Nettorekombinationsrate R oder das elektrostatische Potential Ψ abhängige Zustandsgrößen sind. Das konjugierte thermodynamische Potential $H_-(\xi, \eta, \tau) \equiv H_-(z)$ eines entropieartigen konvexen thermodynamischen Potentials $S_-(n, p, u) \equiv S_-(\rho)$ ist ein konvexes schwach*-unterhalbstetiges Funktional auf dem affinen Banachraum $Z_\infty := z^D + H_0^1 \times H_0^1 \times (H_0^1 \cap L_\infty)$, das auf der physikalisch sinnvollen offenen Umgebung Z_∞^D von z^D der Zustandsvektoren $z = (\xi, \eta, \tau)$ mit strikt positiver reziproker Temperatur τ F -differenzierbar ist mit Werten $-(n, p, u) = H'_-(z) \in H^{-1} \times H^{-1} \times (H^{-1} + L_1) =: Z_1$. Auch die Stromterme und die Nettorekombinationsrate definieren einen parameterabhängigen strikt monotonen Potentialoperator $A(n, p, T, \Psi, \cdot)$ des affinen Banachraumes in Z_1 . Das zeitlich diskretisierte Anfangswertproblem für die Gleichung (1) ist somit eine endliche Folge von Extremalproblemen

$$\rho_{k-1} \in \partial_z [H_-(z_k) + \lambda_M a_{k-1}(z_k)] \quad (k = 1, \dots, M)$$

für schwach*-unterhalbstetige konvexe Funktionale auf Z_∞ . Für Lösungen (z_1, \dots, z_M) gelten die a priori Abschätzungen

$$S_-(\rho_k) + \lambda_M \sum_1^k \langle A_{j-1}(z_j) - A_{j-1}(z^D), z_j - z^D \rangle \leq S_-(\rho_0) - \lambda_M \sum_1^k \langle A_{j-1}(z^D), z_j - z^D \rangle$$

($k = 1, \dots, M$). Diese a priori Abschätzungen bilden zusammen mit Eigenschaften des Funktionals S_- eine aussichtsreiche Perspektive für die Untersuchung von Existenz und Eindeutigkeit sowohl des Anfangswertproblems für die Gleichung (1) auf Grund der Konvergenz der Roteschen Methode als auch für die numerische Behandlung. Analoge Resultate gelten auch für ein modifiziertes Energiemodell, in dem n , p und die Dichte \tilde{u} der Gesamtenergie bilanziert werden. Dann ist die Entropie $S(n, p, \tilde{u})$ des Systems ein konkaves Funktional. Die konjugierten Variablen bezüglich n und p weichen in diesem Falle etwas von den traditionellen Vorstellungen ab, und die Modifikation des Energiemodells besteht darin, in den Stromgleichungen die Gradienten der konjugierten Variablen zu verwenden (vgl. [4]).

Diese Untersuchungen enthalten noch eine Fülle von Problemen für partielle Differentialgleichungen. Solche Untersuchungen wurden im Berichtszeitraum ebenfalls im Rahmen des Projektes bearbeitet. Das stationäre Problem eines etwas vereinfachten Energiemodells mit den Gleichungen

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\mu_n n \nabla v) &= R, \\ -\nabla \cdot (\mu_p p \nabla w) &= R, \\ -\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \Psi) &= p - n + d, \\ -\nabla \cdot (\kappa \nabla T) &= \mu_n n |\nabla v|^2 + \mu_p p |\nabla w|^2 - (v + w)R \end{aligned}$$

für die Quasi-Fermi-niveaus $-v$ und w der Elektronen bzw. Löcher, für das elektrostatische Potential Ψ und für die Temperatur T wird untersucht. In [8] wird unter gemischten Randbedingungen und unter milden Glattheitseigenschaften der orts- und temperaturabhängigen Koeffizienten die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen in Gleichgewichtsnähe bewiesen. Die Grundlage bildet eine Anwendung des Satzes über implizite Funktionen. Die dafür erforderlichen Regularitätseigenschaften werden unter Verwendung von sog. Sobolev-Campanato-Räumen (vgl. [9]) gewährleistet; das sind Räume von Funktionen $w \in H^1$, deren partielle Ableitungen erster Ordnung zu gewissen Campanato-Räumen gehören.

Die Ergebnisse sollten über den Rahmen der Halbleitergleichungen hinaus überall dort von Interesse sein, wo die Temperatur oder eine äquivalente Zustandsgröße eine dynamische Variable ist und evtl. eine nicht-lokale Wechselwirkung wie die elektrostatische auftritt, z. B. bei Reaktions-Diffusionsprozessen, die mit starker Wärmeentwicklung verbunden sind oder unter starkem Energieverbrauch ablaufen.

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* (R. E. Bank, R. Bulirsch, H. Gajewski, and K. Mertens, eds.), Birkhäuser, Basel 1994, pp. 157–169.
2. —, *Thermodynamics of Energy Models of Semiconductor Devices*, ICIAM/GAMM 95, Hamburg, *Z. Angew. Math. Mech.*, **76** (1996), Supplement 2, pp. 289–292.

3. —, *A thermodynamically motivated formulation of the energy model of semiconductor devices*, WIAS-Preprint No. 210, Berlin 1995.
4. —, *Convex Analysis of the Energy Model of Semiconductor Devices*, WIAS-Preprint No. 285, Berlin 1996.
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 Zürich, 1994.
7. H. GAJEWSKI, K. GRÖGER, *Semiconductor Equations for Variable Mobilities Based on BOLTZMANN Statistics or FERMI-DIRAC Statistics*, Math. Nachr., **140** (1989), pp. 7–36.
8. J. A. GRIEPENTROG, *An application of the Implicit Function Theorem to an energy model of semiconductor theory*, GAMM-Tagungsband, Prag 1996, erscheint in: Z. Angew. Math. Mech.
9. L. RECKE, *Solvability properties of linear elliptic boundary value problems with non-smooth data*, Preprint No. 94–3, FB Mathematik, Humboldt-Universität zu Berlin, 1994.
10. G. WACHUTKA, *Rigorous thermodynamic treatment of heat generation and conduction in semiconductor device modelling*, IEEE Trans. CAD, **9** (1990), pp. 1141–1149.

Steuerung von Shape-Memory-Drähten

Bearbeiter: N. Bubner, J. Sprekels

Kooperation: J. Sokołowski, Institut Élie Cartan, Université de Nancy I

Die Modellierung von dehnungsgesteuerten Phasenübergängen in Formgedächtnislegierungen (shape memory alloys, SMA) mit Hilfe eines Landau-Ginzburg-Modells, die dazugehörige mathematische Untersuchung und die Numerik des Vorwärtsproblems sind bis auf kleinere Teilprobleme (s. u.) in diesem Jahr abgeschlossen worden ([1,2]). Das Interesse liegt jetzt in der Steuerung dieser Phasenübergänge.

Mit Hilfe des obengenannten Modells sind Experimente simuliert worden, die I. Müller an der TU Berlin durchgeführt hat. Es konnten erfolgreich die Evolution der Phasenübergänge in dünnen Drähten aus SMA sowie deren Hysteresis-Verhalten berechnet werden. Im Gegensatz zu den Experimenten, die isotherm ablaufen (d. h., die Drähte befinden sich in einem Wärmebad, und die latenten Wärmen der Phasenübergänge werden sofort ausgeglichen), wird im Modell die Wärmeleitung im Draht mit Hilfe des Fourier'schen Gesetzes simuliert, und es gibt nur am rechten Rand einen Austausch mit der Umgebungstemperatur.

Ziel der Steuerung von Shape-Memory-Drähten ist u. a. die Lösung eines Teilproblems im Rahmen des Projekts „Adaptive Optimierung von Flugprofilen mit Gedächtnislegierungen“; außerdem soll geklärt werden, in welchem Umfang SMA-Drähte als thermomechanische Aktuatoren zur Dämpfung mechanischer Schwingungen verwendet werden können. Für ähnliche Steuerungsprobleme sind 1996 notwendige Optimalitätsbedingungen hergeleitet worden ([2,3]). Bevor mit der Steuerung begonnen werden kann, sind noch zwei Probleme zu lösen: Der Existenzbeweis muß in der Hinsicht erweitert werden, daß auch zumindest zeitlich lokal gekühlt werden darf; ferner muß die Implementierung parallelisiert werden, da aufgrund der notwendigen kleinen Zeitschrittweite zur Lösung des Vorwärtsproblems der benötigte Rechenzeitbedarf zu groß ist. Die anschließende Lösung des Steuerungsproblems soll dann mit dem Kooperationspartner durchgeführt werden.

Literatur

1. N. BUBNER, *Landau-Ginzburg Model for a Deformation-Driven Experiment on Shape Memory Alloys*, Cont. Mech. Thermodyn., **8** (5) (1996), pp. 293–308.
2. N. BUBNER, J. SPREKELS, *Optimal Control of Martensitic Phase Transitions in a Deformation-Driven Experiment on Shape Memory Alloys*, erscheint in: Adv. Math. Sci. Appl.
3. N. BUBNER, J. SOKOŁOWSKI, J. SPREKELS, *Optimal Boundary Control Problems for Shape Memory Alloys under State Constraints for Stress and Temperature*, WIAS-Preprint No. 276, Berlin 1996.

Stabilität von Verdichtersystemen – Mathematische Aspekte

Bearbeiter: J. Förste, W. Höppner, L. Recke

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

Förderung: BMBF, „HTGT-Turbotech II“

Gegenstand der Projektarbeit ist die analytische Untersuchung der Strömungsinstabilität in Verdichtungssystemen. Ausgangspunkt sind die instationären kompressiblen reibungsbehafteten Bewegungsgleichungen für ein ideales Gas. Ziel ist die Entwicklung von Techniken zur aktiven Kontrolle von transienten Erscheinungen. Die Zusammenarbeit mit BMW Rolls Royce hat eine Erweiterung erfahren, seit wir über unsere Projektstelle verfügen; dies wirkt sich auch thematisch aus. Neben der Untersuchung der Stabilitätsphänomene „surge“ (pumpen) und „rotating stall“ (rotierende Ablösung) sollen nun u. a. auch die Einflüsse von Spitzenwirbeln studiert werden. Dies läuft mechanisch auf die Wechselwirkung zwischen einem Wirbel und einem Stoß (vortex-shock-interaction) hinaus. Mathematisch hat man es dabei mit der Wirbeltransportgleichung

$$\rho \left(\frac{\partial \omega}{\partial t} + u \operatorname{grad} \frac{\omega}{\rho} \right) = \frac{1}{\rho^2} \operatorname{grad} \rho \times \operatorname{grad} p$$

zu tun; dabei ist ω die Wirbelstärke, ρ die Dichte, p der Druck und u die Strömungsgeschwindigkeit. Dazu kommen geeignete Rand- und Anfangsbedingungen.

Kürzlich wurde dieses technisch wichtige Problem experimentell untersucht (vgl. [1]). Daneben werden Verfahren studiert, die für die Behandlung axialsymmetrischer Strömungen in Turbomaschinen geeignet sind. Eine besondere Rolle spielen dabei Rotor-Stator-Wechselwirkungen. Damit schafft man sich einen weiteren Zugang zur Behandlung der Kompressorinstabilität unter der Voraussetzung, daß die Strömung von der Winkelvariablen unabhängig ist.

Fortgesetzt wurden die Arbeiten zur numerischen Behandlung des hydraulischen Modells für kompressible Strömungen in Rohren veränderlichen Querschnitts. Dazu wurden mehrere Verfahren implementiert und zu einem Programmsystem zusammengefaßt. Hingearbeitet wird dabei u. a. auf die Berechnung zeitlich periodischer Lösungen. Die Software wurde in C geschrieben und läuft unter UNIX.

Literatur

1. I. M. KALKHORAN, M. K. SMART, A. BETTI, *Interaction of super-sonic wing-tip vortices with a normal shock*, AIAA Journal, **34**, 9, Sept. 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 der HU Berlin,
H. Wenzel, Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik, Berlin,
P. Kleinert, Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik, Berlin

Förderung: BMBF, „Anwendungsorientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik“

Bei der Entwicklung von Halbleiterlasern (Laserdioden) geht die Tendenz in Richtung immer höherer Ausgangsleistungen, höherer Arbeitstemperaturen, schnellerer Modulierbarkeit und kürzerer Wellenlängen. Um diese Ziele zu erreichen, werden als laseraktive Schicht durchweg nur noch einzelne oder mehrere, in der Regel verspannte, Quantum-Wells (QWs) eingesetzt. Darüber hinaus wird intensiv an der Einführung von sogenannten Quantum-Wires (QWRs) und Quantum-Dots (QDs) gearbeitet. Ähnliches gilt auch für andere Bauelemente der Optoelektronik, wie optische Halbleiterverstärker oder Elektromodulatoren basierend auf dem Quantum-Confined-Stark-Effekt (QCSE).

In diesen Strukturen spielen ein-, zwei- oder dreidimensionale räumliche Quanteneffekte eine entscheidende Rolle. Um die Funktionsweise derartiger Bauelemente simulieren zu können, ist deshalb die Lösung der Schrödingergleichung im Ortsbereich und deren Einbettung in die klassischen Halbleitertransportgleichungen unumgänglich. Wegen der Kompliziertheit des Problems und der Vielfalt der möglichen Bauelementstrukturen ist dabei eine enge Kooperation zwischen Mathematikern, Physikern und Technologen notwendig.

Dieses Projekt ist mit mathematischen und numerischen Verfahren zur Lösung des Schrödinger-Poisson-Systems befaßt. Über eine selbstkonsistente Ankopplung des Schrödinger-Poisson-Systems an den makroskopischen Ladungstransport sind diese Verfahren in den am WIAS bestehenden Simulator ToSCA (Two Dimensional SemiConductor Analysis Package) integriert und stehen in dieser Form dem breiten Anwenderkreis von ToSCA als Simulationswerkzeug für die Entwicklung nanoelektronischer Bauelemente zur Verfügung.

Das Schrödinger-Poisson-System ist von seiner mathematischen Struktur her ein System partieller Differentialgleichungen für das elektrostatische Potential und die Enveloppen der Wellenfunktionen, die die quantenmechanischen Ladungsträgerdichten in einer Nanostruktur definieren. Dieses muß in Hinblick auf die Einbindung des Schrödinger-Poisson-Systems in das System der van Roosbroeck-Gleichungen mit im allgemeinen recht komplexen Randbedingungen untersucht werden (siehe z. B. [3, 4]). Die Dimension des Simulationsgebietes ist $d = 1, 2, 3$, je nachdem ob ein QW, QWR oder QD modelliert wird.

Mathematisch wurde das Schrödinger-Poisson-System bisher für die folgenden Fälle untersucht:

- eine Teilchensorte, homogene Dirichletsche Randbedingungen für alle beteiligten Funktionen, ohne Austausch-Korrelations-Potential [1,2,4, 11, 12];
- mit Austausch-Korrelations-Potential, mit gemischten Randbedingungen, mehrere Teilchensorten, die ausschließlich über die Poissongleichung gekoppelt sind [6,8, 13].

Im Fall ohne Austausch-Korrelations-Potential ist das Schrödinger-Poisson-System eine nichtlineare Poisson-Gleichung im Dual eines durch die Randbedingungen bestimmten Sobolevraumes. Der zugehörige nichtlineare Poissonoperator ist stark monoton und beschränkt Lipschitz-stetig und damit die Gleichung eindeutig lösbar. Es lassen sich eine Reihe von Abstiegsverfahren zur näherungsweise Lösung der Schrödinger-Poisson-Gleichung begründen. Für das Gradientenverfahren gewinnt man die gleichmäßige Konvergenz der elektrostatischen Potentiale über dem Simulationsgebiet und daraus Konvergenzaussagen für die Eigenwerte des Schrödingeroperators [7]. Wesentlich für den Beweis der genannten Eigenschaften des Schrödinger-Poisson-Systems ist der Nachweis der strikten Monotonie und beschränkten Lipschitz-Stetigkeit für die beteiligten Teilchendichteoperatoren in Abhängigkeit vom Potential in der jeweiligen Schrödingergleichung. Im Fall gemischter Randbedingungen [6] sind dafür eine Reihe tiefliegender Techniken der Operatortheorie, wie z. B. Formabschätzungen der Schrödingeroperatoren, grundlegend.

Die analytischen Eigenschaften des Schrödinger-Poisson-Systems vererben sich auf das diskretisierte System [1] und ermöglichen so eine sinnvolle Implementation der vorgenannten Näherungsverfahren, etwa, wie in ToSCA geschehen, mit einer finiten Boxmethode.

Die Untersuchung des Schrödinger-Poisson-Systems mit Austausch-Korrelations Potential (auch und im folgenden Kohn-Sham-System genannt) stützt sich auf die Ergebnisse für das System ohne Austausch-Korrelations Potential. Zunächst läßt sich zeigen, daß die Lösung des Schrödinger-Poisson-Systems beschränkt Lipschitz-stetig vom Confinement-Potential, also dem gegebenen Referenzpotential im Schrödingeroperator, abhängt. Mit Hilfe dieser Abbildung konstruiert man eine Fixpunktabbildung für den Vektor der quantenmechanischen Teilchendichten, die den Voraussetzungen des Schauderschen Fixpunktsatzes genügt. Das Kohn-Sham-System besitzt somit mindestens eine Lösung und bei hinreichender Kleinheit des Austausch-Korrelations Potentials ist diese auch eindeutig bestimmt [6]. Zudem ist es möglich, Eigenschaften der Lösung, wie z. B. Schranken für ihre Werte und ihr Oszillationsverhalten, in Termen der Daten des Problems anzugeben.

Beim Schrödinger-Poisson- und Kohn-Sham-System wirkt das elektrostatische Potential im Gesamtpotential der separaten skalaren Schrödingergleichungen für Elektronen und Löcher. Die Elektronen- und Löcherdichten wirken als Ladungen nur in der Poisson-Gleichung zusammen. Betrachtet man mehrere Bänder, z. B. schweres, leichtes und Split-Off-Lochband, so ist es unerlässlich, eine zusätzliche Kopplung zwischen den einzelnen Bändern zu berücksichtigen. Dies führt im Rahmen sogenannter Mehrband-kp-Modelle auf eine Hierarchie von Matrix-Schrödingeroperatoren wie z. B. den Kane- oder den Luttinger-Kohn-Hamiltonoperator. Die Auswirkungen dieser Kopplungen zwischen den Teilchendichteoperatoren der Einzelbänder auf die Mathematik des Schrödinger-Poisson- und Kohn-Sham-Systems sind bisher nicht bekannt und sollen ein Gegenstand künftiger Untersuchungen sein. Ein weiterer ist der Einfluß eines konstanten transversalen Magnetfeldes.

Die selbstkonsistente Einbindung des Schrödinger-Poisson- und Kohn-Sham-Systems in das System der van Roosbroeck-Gleichungen, die klassisch das elektronische Verhalten von Halbleiterbauelementen beschreiben, ist eine auf der Ebene der Modellbildung viel diskutierte Frage (vgl. z. B. [3, 9, 10]), welche jedoch mathematisch noch offen ist [5]. Insbesondere kommt es hierbei auf Übergangsbedingungen an der gemeinsamen Grenze der Simulationsgebiete des Schrödinger-Poisson-Systems und der van Roosbroeck-Gleichungen an. Die Kopplung von Schrödinger-Poisson- und van Roosbroeck-Gleichungen ist ein Schwerpunkt unserer laufenden Forschungen zu diesen Gleichungssystemen.

Einige Ergebnisse die ToSCA-Simulation einer bei 980nm emittierenden QW-Laserdiode betreffend sind in den folgenden Abbildungen vergleichend zwischen Drift-Diffusions Näherung und selbstkonsistenter Lösung des Schrödinger-Poisson-Systems dargestellt (vgl. [14]).

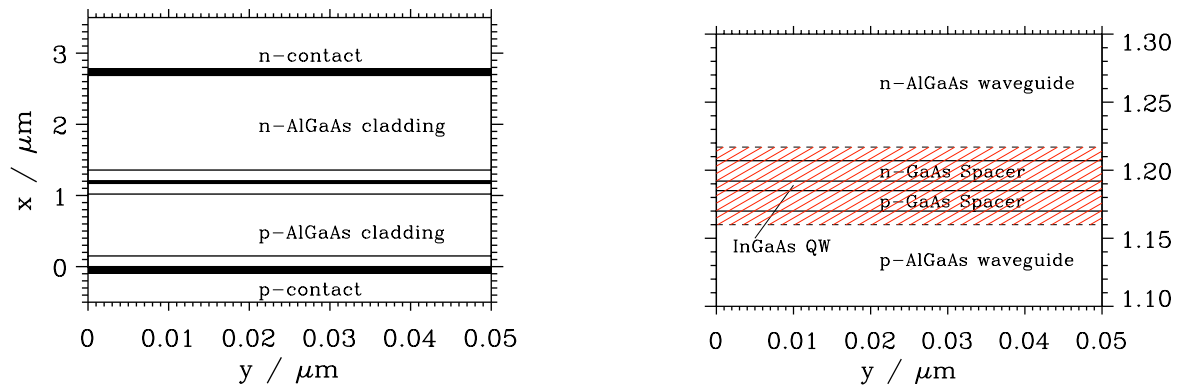


Abb. 1: Struktur der mit ToSCA simulierten InGaAs/(Al)GaAs QW-Laserdiode mit QW (r.).

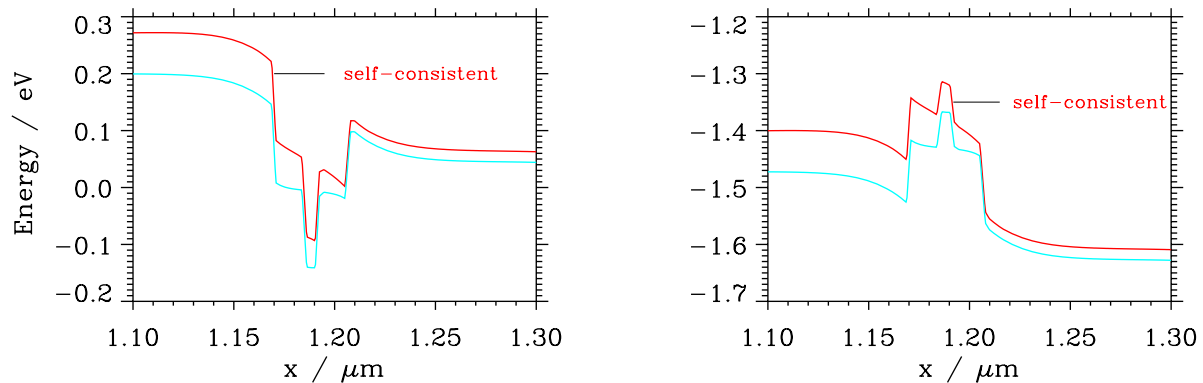


Abb. 2: Leitungs- und Valenzbandkante im QW aus ToSCA-Simulationsrechnungen.

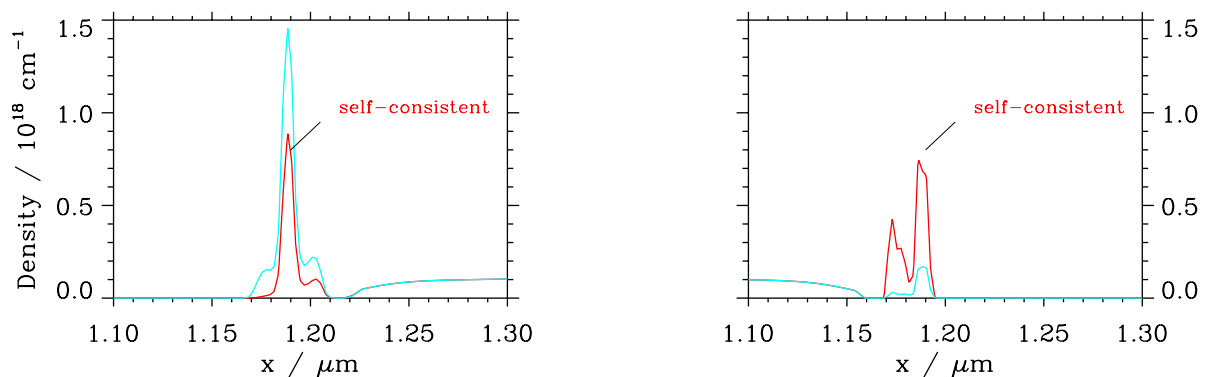


Abb. 3: Elektronen- und Löcherdichte im QW aus ToSCA-Simulationsrechnungen.

Literatur

1. G. ALBINUS, H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, *On stationary Schrödinger-Poisson equations*, IAAS-Preprint No. 66, Berlin 1993.
2. PH. CAUSSIGNAC, B. ZIMMERMANN, R. FERRO, *Finite element approximation of electrostatic potential in one dimensional multilayer structures with quantized electronic charge*, *Computing*, **45** (1990), pp. 251–264.
3. W. R. FRENSELY, *Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium*, *Rev. Modern Phys.*, **62** (3) (1990), pp. 745–791.
4. H. GAJEWSKI, *Analysis und Numerik des Ladungsträgertransports in Halbleitern*, *GAMM-Mitteilungen*, **16** (1993), pp. 35–57.
5. I. M. GAMBA, C. S. MORAWETZ, *A viscous approximation for a 2-d steady semiconductor or transonic gas dynamic flow: Existence theorem for potential flow*, *Comm. Pure Appl. Math.*, **XLIX** (1996), pp. 999–1049.
6. H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, *About a stationary Schrödinger-Poisson system with Kohn-Sham potential in nanoelectronics*, in Vorbereitung.
7. —, *On stationary Schrödinger-Poisson equations modelling an electron gas with reduced dimension*, erscheint in: *Math. Methods Appl. Sci.*
8. —, *Simulation of nanoelectronic devices with ToSCA including the stationary Schrödinger-Poisson system with a Kohn-Sham potential*, Deutsche Mathematiker-Vereinigung, Jahrestagung 1996, Jena 15.–21. Sept. 1996.
9. T. KERKHOVEN, *Mathematical modelling of quantum wires in periodic heterojunction structures*, in: *Semiconductors Part II*, volume 59, IMA Volumes in Mathematics and its Applications, Springer-Verlag, New York, 1994, pp. 237–253.
10. —, *Numerical nanostructure modeling*, Proceedings of The Third International Congress on Industrial and Applied Mathematics, ICIAM 95, Hamburg, Germany, July 3–7, 1995; *Z. Angew. Math. Mech.*, **76** (1996), Suppl. 2, pp. 297–300.
11. F. NIER, *A stationary Schrödinger-Poisson system arising from the modeling of electronic devices*, *Forum Math.*, **2** (1990), pp. 489–510.
12. —, *A variational formulation of Schrödinger-Poisson systems in dimensions $d \leq 3$* , *Comm. Partial Differential Equations*, **18** (1993), pp. 1125–1147.
13. J. REHBERG, H.-CHR. KAISER, *Analysis and numerical treatment of the Schrödinger-Poisson system with exchange-correlation potential in a bounded domain*, Workshop „Transport Quantique“, Villeneuve d’Ascq, France, 21 et 22 Mars 1996.
14. H. WENZEL, H.-CHR. KAISER, R. NÜRNBERG, H. GAJEWSKI, H.-J. WÜNSCHE, *Towards 2d simulation of QW-lasers including the self-consistent solution of the Schrödinger equation*, The 1996 Semiconductor Laser and Amplifier Workshop, Lillehammer, Norway, 19–21 September 1996.

Untersuchung eines mathematischen Modells der Chemotaxis

Bearbeiter: H. Gajewski, K. Zacharias

Für die Chemotaxis als orientierte Wanderung von Organismen unter dem Einfluß chemischer Substanzen ist von Keller und Segel ein mathematisches Modell vorgeschlagen worden, das im einfachsten Falle auf ein Reaktions-Diffusionssystem der folgenden Bauart führt:

Sei U die Populationsdichte, V die Dichte des chemotaktischen Agens, dann gilt für $U = U(t, x)$, $V = V(t, x)$ (t die Zeit, x der Ortsvektor)

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \Delta U - \chi \nabla \cdot (U \nabla V), \quad \frac{\partial V}{\partial t} = \alpha \Delta V - \beta V + \delta U \quad (1)$$

in $\mathbb{R}_+ \times \Omega$, wobei Ω ein beschränktes, stückweise glatt berandetes Gebiet der Ebene ist. Auf dem Rand Γ von Ω werden homogene Neumann-Bedingungen vorgeschrieben, für $t = 0$ seien Anfangswerte $U_0 = U(0, x)$, $V_0 = V(0, x)$ vorgegeben; α , β , δ , χ sind positive Konstanten. Mathematische Schwierigkeiten ergeben sich dadurch, daß in dem System neben der i. a. stabilisierenden Diffusion eine Driftbewegung entgegen einem Konzentrationsgradienten, d. h. eine Art negativer (destabilisierender) Diffusion wirkt. In der Tat kann man Anfangswerte konstruieren, für die das System „blow-up“ zeigt. Zeitlich globale Lösungen für das Chemotaxissystem sind also nur unter speziellen Bedingungen zu erwarten.

Das Schlüsselergebnis unserer Untersuchungen ist die Erkenntnis, daß das System (1) die Lyapunov-Funktion

$$F(U, V) = \int_{\Omega} \left\{ \frac{\chi}{2\delta} (\alpha |\nabla V|^2 + \beta V^2) + U (\log U - \chi V) \right\} dx$$

besitzt. Diese Funktion fällt entlang Lösungen mit wachsender Zeit und bleibt nach unten beschränkt, sofern die Bedingung

$$\frac{\delta \chi \|U_0\|_{L_1}}{4\alpha\Theta} < 1$$

erfüllt ist, wobei Θ der minimale Innenwinkel zwischen den Γ bildenden glatten Randkurven ist. (Numerische Experimente deuten darauf hin, daß die angegebene Schranke scharf ist.) In diesem Falle existieren globale Lösungen, und ihr asymptotisches Verhalten kann wie folgt charakterisiert werden:

Mit den

$$\bar{U}(t) = \bar{U}_0, \quad \frac{d\bar{V}}{dt} + \beta\bar{V} = \delta\bar{U}_0, \quad \bar{V}(0) = \bar{V}_0,$$

genügenden räumlichen Mittelwerten

$$\bar{U}(t) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} U(t, x) dx, \quad |\Omega| = \text{meas}(\Omega), \quad (\text{entsprechend } \bar{V}(t))$$

bilde man

$$u(t, x) = \frac{U(t, x)}{\bar{U}_0}, \quad v(t, x) = \chi(V(t, x) - \bar{V}(t)).$$

Dann existiert eine Folge $t_k \rightarrow \infty$ und Funktionen u^*, v^* , so daß

$$u(t_k) \rightarrow u^* \text{ in } L_2(\Omega), \quad v(t_k) \rightarrow v^* \text{ in } H^1(\Omega),$$

und der asymptotische Zustand (u^*, v^*) genügt mit $\gamma = \chi \delta \overline{U_0}$

$$-\alpha \Delta v^* + \beta v^* = \gamma(u^* - 1) \text{ in } \Omega, \quad \frac{\partial v^*}{\partial n} = 0 \text{ auf } \Gamma, \quad u^* = \frac{|\Omega| \exp(v^*)}{\int_{\Omega} \exp(v^*) dx}. \quad (2)$$

Offenbar hat die nichtlineare Gleichung (2) die triviale Lösung $(u^*, v^*) = (1, 0)$. Man kann jedoch Anfangsbedingungen U_0, V_0 angeben, für die der zugehörige asymptotische Zustand nichttrivial ist.

Literatur

1. H. GAJEWSKI, K. ZACHARIAS, *Global behaviour of a reaction-diffusion system modeling chemotaxis*, WIAS-Preprint No. 232, Berlin 1996; erscheint in: Math. Nachr.

Reaktions-Diffusionsgleichungen mit Anwendungen in der Halbleitertechnologie

Bearbeiter: R. Hünlich, A. Glitzky

Kooperation: W. Röpke, Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder) GmbH,
N. Strecker, Institut für Integrierte Systeme, ETH Zürich

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

Innerhalb dieses Projektes werden Probleme der Modellierung und Simulation aus der Halbleitertechnologie sowie deren analytische und numerische Hinterfragung und Begründung behandelt. Einige dafür typische Fragestellungen, die bei der Entwicklung von speziellen Halbleiterbauelementen, den SiGe-Heterojunction-Bipolartransistoren, auftreten, schildern und diskutieren wir in den Beiträgen [1] und [6]. Als problematisch erweist sich zum Beispiel die Beschreibung der Umverteilung von Fremdatomen, wenn Profile elektrisch geladener Dotanden mit sehr hohen Konzentrationen sehr eng benachbart sind. Zur Klärung auftretender kooperativer Effekte – etwa einer ambipolaren Diffusion – wurden am Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder) gezielt Experimente durchgeführt. Simulationen und vergleichende Untersuchungen der elektrischen Wechselwirkung von Arsen, Bor und Phosphor in Silizium zu diesen Messungen haben wir im Forschungsbericht [7] dokumentiert. Auf die analytische Behandlung derartiger Fragestellungen soll im folgenden ausführlicher eingegangen werden.

Die Einbeziehung der elektrischen Wechselwirkung durch das innere elektrische Feld in die Modellierung der Diffusion von Fremdatomen in Halbleiterstrukturen führt auf Elektro-Reaktions-Diffusionsgleichungen mit nichtglaten Daten, die hier in einem allgemeineren Kontext untersucht werden. Wir bezeichnen mit u_i , ζ_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 linearen Poissongleichung für das elektrostatische Potential v_0 :

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} - \nabla \cdot (D_i u_i \nabla \zeta_i) + R_i = 0, \quad \text{in } \mathbb{R}_+ \times \Omega, \quad (1)$$

$$v \cdot (D_i u_i \nabla \zeta_i) + R_i^\Gamma = 0, \quad \text{auf } \mathbb{R}_+ \times \Gamma, \quad u_i(0) = U_i \quad \text{in } \Omega; \quad (2)$$

$$-\nabla \cdot (\varepsilon \nabla v_0) = f + \sum_{i=1}^m q_i u_i \quad \text{in } \mathbb{R}_+ \times \Omega, \quad (3)$$

Randbedingungen für die Poissongleichung werden später spezifiziert. Dabei sind R_i bzw. R_i^Γ 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 α und β die stöchiometrischen Vektoren der entsprechenden Reaktionen. Für den Zusammenhang zwischen Konzentrationen und Potentialen wird im betrachteten Modell die Boltzmann-Statistik angenommen. Die Diffusionskoeffizienten D_i , die

Dielektrizitätskonstante ε und die Reaktionskonstanten $k_{\alpha\beta}$ sind wegen der Heterostruktur in nichtglatter Weise ortsabhängig, die kinetischen Koeffizienten werden in der Regel noch vom Zustand selbst abhängen.

Zunächst wurden im räumlich zweidimensionalen Fall und bei Randbedingungen dritter Art für die Poissongleichung die thermodynamische Korrektheit des Modells, insbesondere aber auch eine Abschätzung der freien Energie durch die Energiedissipationsrate und das exponentielle Fallen der freien Energie entlang von Trajektorien des Systems gezeigt (siehe [2], [4]). Für Reaktionen der maximalen Ordnung 2 im Volumen bzw. 1 auf dem Rand erhält man außerdem die eindeutige Lösbarkeit und globale a priori-Abschätzungen (vgl. [3]).

Die Tatsache, daß die Poissongleichung für viele relevante Probleme aus der Halbleitertechnologie singular gestört ist, erfordert jedoch Vorsicht bei der Auswahl der Randbedingungen für v_0 . Unsere Testsimulationen zeigten dabei deutlich, daß die teilweise Einbeziehung von Dirichlet'schen Randbedingungen nötig ist, um Grenzschichtphänomene zu vermeiden. Insbesondere steht die Aufgabe, das Differentialgleichungssystem (1) – (3) auch unter gemischten Randbedingungen für die Poissongleichung zu behandeln.

Die vorgestellte Aufgabe kann in vielen Anwendungen zumindest näherungsweise vereinfacht werden, wenn die Temperatur wie bei der Halbleitertechnologie-Modellierung hoch ist. Dann sind die kinetischen Koeffizienten der freien Ladungsträger im Vergleich zu denen anderer Spezies so groß, daß man die Elektronen-Löcher-Generation-Rekombination als im Gleichgewicht befindlich betrachten, ihre Dichten aus dem Statistikansatz, das elektrostatische Potential aus der dann nichtlinearen Poissongleichung berechnen und die Kontinuitätsgleichungen für Elektronen und Löcher weglassen kann. Damit für solch ein Modell die globale Ladung erhalten bleibt, muß die Poissongleichung dann einen zusätzlichen nichtlokalen Term $\pi(v_0)$ enthalten.

Wir beschreiben nun kurz neue Resultate, die wir für das Differentialgleichungssystem (1), (2) mit der jetzt möglicherweise nichtlinearen, nichtlokalen Poissongleichung mit gemischten Randbedingungen

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\varepsilon \nabla v_0) + e_0(v_0) &= f + \sum_{i=1}^m q_i u_i \quad \text{in } \mathbb{R}_+ \times \Omega, \\ v \cdot (\varepsilon \nabla v_0) + \tau v_0 &= \tau \pi(v_0) + f^\Gamma \quad \text{auf } \mathbb{R}_+ \times \Gamma_N, \quad v_0 = \tilde{v}_0 \quad \text{auf } \mathbb{R}_+ \times \Gamma_D \end{aligned} \quad (4)$$

gewonnen haben (vgl. [5]). Für eine geeignete schwache Formulierung (P) von (1), (2), 4 existiert innerhalb einer Kompatibilitätsklasse, die durch den Anfangswert festgelegt wird, genau ein stationärer Zustand. Unter der Voraussetzung, daß $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ und daß Volumen- bzw. Randquellterme in den Kontinuitätsgleichungen maximal zweiter bzw. erster Ordnung sind, besitzt das instationäre Problem genau eine Lösung. Entlang dieser fällt die freie Energie

$$F(u) = \int_{\Omega} \left(\frac{\varepsilon}{2} |\nabla v_0|^2 + e_0(v_0) v_0 - \int_0^{v_0} e_0(y) dy + \sum_{i=1}^m \left(u_i \left(\ln \frac{u_i}{\bar{u}_i} - 1 \right) + \bar{u}_i \right) \right) dx + \int_{\Gamma_N} \frac{\tau}{2} (v_0 - \pi(v_0))^2 d\Gamma$$

monoton. Aussagen zur Beschränktheit und Regularität von Lösungen elliptischer Gleichungen mit gemischten Randbedingungen liefern bei geeigneten Annahmen über Ω und Γ globale L^∞ -Schranken für v_0 und eine höhere Integrierbarkeit für ∇v_0 . Die Lösbarkeit von (P) folgt aus Existenzaussagen für ein regularisiertes Problem auf endlichen Zeitintervallen, die über Zeitdiskretisierung und einen Auswahlssatz gewonnen werden. Wir finden Schranken für die Lösungen der regularisierten Aufgabe, die nicht vom Regularisierungslevel abhängen, so daß

diese Lösungen bei hinreichend großem Abschneidelevel gleichzeitig Lösungen von (P) sind. Diese a priori-Schranken erhält man nach gewissen Anlaufschritten über Moseriteration. Die Abschätzungen nach oben sind unabhängig von der Länge des Zeitintervalls und übertragen sich daher global auf die Lösungen von (P). Um globale positive untere Schranken für die Konzentrationen zu erhalten, zeigen wir zunächst ähnlich dem Vorgehen in [2], [4], daß sich unter gewissen Voraussetzungen an das Reaktionssystem, die für die Probleme aus der Halbleitertechnologie auch erfüllt sind, die freie Energie nach oben durch die Dissipationsrate abschätzen läßt. Folglich fällt die freie Energie entlang der Lösung exponentiell auf ihren Gleichgewichtswert, und die Größen $v_0 - v_0^*$ und $u_i/u_i^* - 1$ sind über $\mathbb{R}_+ \times \Omega$ und $\mathbb{R}_+ \times \Gamma$ integrierbar, wobei u_i^* und v_0^* Komponenten der stationären Lösung sind. Man findet so eine globale Schranke für die L^1 -Norm der chemischen Potentiale, die mittels Moseriteration auf eine positive untere Schranke für die Konzentrationen führt (siehe [5]). Die globalen Abschätzungen für die Lösung von (P) und das exponentielle Fallen der freien Energie ergeben die stärkeren asymptotischen Aussagen, daß sich die Konzentrationen und chemischen Potentiale in jeder L^p -Norm exponentiell ihren Gleichgewichten nähern.

Literatur

1. H. GAJEWSKI, A. GLITZKY, J. GRIEPENTROG, R. HÜNLICH, H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, H. STEPHAN, W. RÖPKE, H. WENZEL, *Modellierung und Simulation von Bauelementen der Nano- und Optoelektronik*, WIAS-Preprint No. 224, Berlin 1996.
2. A. GLITZKY, K. GRÖGER, R. HÜNLICH, *Free energy and dissipation rate for reaction diffusion processes of electrically charged species*, Appl. Anal., **60** (1996), pp. 201–217.
3. A. GLITZKY, R. HÜNLICH, *Electro-reaction-diffusion systems for heterostructures*, erscheint in: *Free boundary problems and applications* (M. Niezgodka, P. Strezelecki, eds.), Addison Wesley Longman.
4. ———, *Energetic estimates and asymptotics for electro-reaction-diffusion systems*, erscheint in: *Z. Angew. Math. Mech.*
5. ———, *Global estimates and asymptotics for electro-reaction-diffusion systems in heterostructures*, in Vorbereitung.
6. R. HÜNLICH, A. GLITZKY, J. GRIEPENTROG, W. RÖPKE, *Zu einigen Fragen der Modellierung und Simulation bei der Entwicklung von SiGe-Heterojunction-Bipolartransistoren*, in: *Mathematik – Schlüsseltechnologie für die Zukunft* (K.-H. Hoffmann, W. Jäger, Th. Lohmann, H. Schunck, eds.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, pp. 303–313.
7. R. HÜNLICH, A. GLITZKY, W. RÖPKE, *Elektrische Wechselwirkung von As, B und P in Si. Teil 1*, WIAS, interner Forschungsbericht, Berlin, 1996.

Modellierung und Simulation der Oberflächenhärtung von Stahl

Bearbeiter: D. Hömberg, J. Fuhrmann (FG 3)

Die Arbeiten zur Modellierung, Analyse und Simulation von Wärmebehandlungen wurden fortgesetzt. Schwerpunkt waren die Betrachtung von zwei Technologien zum Oberflächenhärten, das Induktions- und das Laserhärten.

Für die Simulation des Induktionshärtens, bei dem die Erwärmung auf Grund des Joule'schen Effektes durch im Werkstück induzierte Wirbelströme erzeugt wird, wurde ein numerisches Verfahren entwickelt und mit Hilfe von Komponenten der PDELIB implementiert. Wegen der hohen Stromfrequenzen mußten dabei unterschiedliche Zeitschrittweiten für Maxwell-Gleichung und Energiebilanz gewählt werden.

Für Induktionswärmebehandlungen im dreidimensionalen Fall wird in [1] ein mathematisches Modell formuliert und die Existenz einer schwachen Lösung gezeigt.

Beim Laserhärten ist es von großer Bedeutung, die Beschädigung der Oberfläche durch Anschmelzen zu verhindern. Daher wurde in [2] das entsprechende Kontrollproblem unter Berücksichtigung von Zustandsbeschränkungen untersucht.

Die numerischen Algorithmen und Ergebnisse der Simulationsrechnungen für das Induktions- und Laserhärten von Stahl wurden in [3] dokumentiert.

Literatur

1. D. HÖMBERG, J. F. RODRIGUES, *A mathematical model for induction heat treatments*, in Vorbereitung.
2. D. HÖMBERG, J. SOKOLOWSKI, *Optimal control of laser hardening*, in Vorbereitung.
3. D. HÖMBERG, J. FUHRMANN, *Numerical simulation of surface heat treatments*, in Vorbereitung.

Identifikation von Gebieten erhöhter Absorption aus zeitaufgelösten Messungen in der optischen Tomographie

Bearbeiter: R. Hünlich

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

Förderung: Unterauftrag zum BMBF-Projekt „Mathematische Behandlung der Streulichttomographie von dicken Gewebeschichten und von Phantomen“ an der PTB

Ziel der Untersuchungen in [4] war es, die im Rahmen eines BMBF-Projektes entwickelten Verfahren zur Bildrekonstruktion in der optischen Tomographie, die auf zeitaufgelösten Messungen beruhen (siehe [3]), an dem Standarddatensatz der Universität von Pennsylvania [1] zu testen. Dieser Datensatz bezieht sich auf ein (nahezu) unendlich ausgedehntes Medium mit konstanter Lichtgeschwindigkeit c und konstantem Streu- bzw. Absorptionskoeffizienten μ'_s bzw. μ_a^0 , in das eine kleine Kugel mit erhöhtem Absorptionskoeffizienten $\mu_a^{abs} = f \mu_a^0$, $f = 1.5, 2.0, \dots, 40.0$, eingebettet ist. Verwendet werden 12 Lichtquellen mit jeweils 10 Detektoren, die in einer Ebene kreisförmig angeordnet sind (vgl. Abb. 1). Aus den an den Detektoren festgestellten Laufzeitverteilungen ist die Lage und Größe des Absorbers zu rekonstruieren. Dieses inverse Problem beruht auf dem Diffusionsmodell der Streulichtausbreitung [2] und führt hier auf folgende Gleichungen für die Photonendichte Φ :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t}(x, t) = \operatorname{div}(D(x) \operatorname{grad} \Phi(x, t)) - c \mu_a(x) \Phi(x, t),$$

$$|\operatorname{grad} \Phi(x, t)| \rightarrow 0 \text{ für } |x| \rightarrow \infty, \quad \Phi(x, 0) = Q \delta(x - x_{source}),$$

wobei $D(x) = c/(3\mu_a(x) + 3\mu'_s)$ ist. Zunächst wird diese Aufgabe mit einem 2D-FEM-Code gelöst. Da für ein homogenes Medium ($\mu_a(x) = \mu_a^0$) die Lösung $\Phi^{2D,0}$ analytisch gegeben ist, wird

$$\Phi^{2D} = \Phi^{2D,0} + \Psi$$

gesetzt und die entsprechende Aufgabe für Ψ auf einem endlichen, aber so großen Gebiet, daß auf seinem Rand $\Psi = 0$ gesetzt werden kann, numerisch gelöst. Durch diesen Störungsansatz kann Φ^{2D} schnell und mit hoher Genauigkeit berechnet werden. Versuche, damit den Absorber zu rekonstruieren, führten wegen der vorliegenden 3D-Situation zu keinem befriedigenden Ergebnis. Als einfache Näherung der 3D-Lösung wurde dann der Ausdruck

$$\Phi^{3D} \approx \frac{1}{2\sqrt{\pi D^0 t}} \Phi^{2D} = \Phi^{3D,0} + \frac{1}{2\sqrt{\pi D^0 t}} \Psi$$

gewählt. Es zeigte sich, daß damit die Lage des Absorbers (bei allen Absorberwerten $f \geq 2.0$) gut wiedergefunden werden konnte, während beim Radius und beim Absorptionskoeffizienten deutlichere Abweichungen auftraten. Die Abb. 2 zeigt einen Vergleich der vorgegebenen Daten mit den nach der Identifikation simulierten Laufzeitverteilungen. Tabelle 1 gibt einen Überblick über einige Ergebnisse, die zugleich zeigen, daß für eine erfolgreiche Rekonstruktion der Lage des Absorbers auch ein Teil des vollständigen Datensatzes (nur 2, 3, 4, 6 Quellen) ausreicht. Zur Zeit wird untersucht, ob diese Aussage gültig bleibt, wenn die Daten mit einem größeren Rauschen behaftet sind.

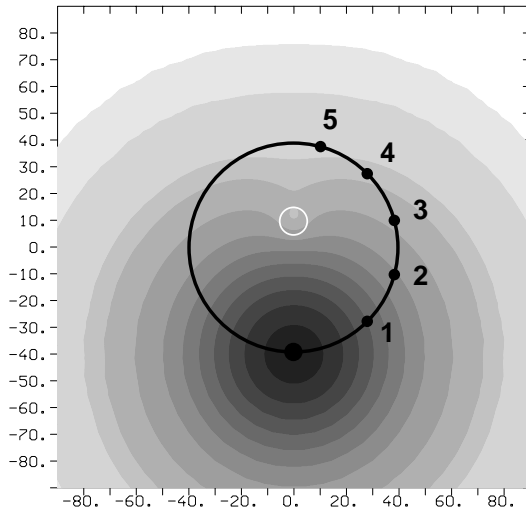


Abb. 1. Lage der Quelle (unten), der Detektoren 1 bis 5 und des Absorbers. Photonendichte Φ^{2D} nach $t = 5.6$ ns für $f = 10.0$.

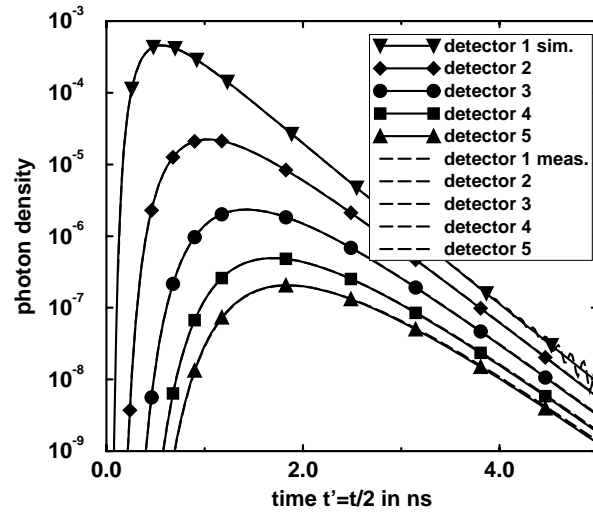


Abb. 2. Entsprechende Photonendichten an den Detektoren: Vergleich der Werte aus dem Standarddatensatz mit den nach der Identifikation simulierten Werten Φ^{3D} für $f = 10.0$.

Tab. 1. Rekonstruktionsergebnisse für $f = 2.0$ unter Benutzung von 2, 3, 4, 6, 12 Quellen und jeweils 10 Detektoren (*dist* bezeichnet den Abstand zwischen den Mittelpunkten des realen bzw. wiedergefundenen Absorbers).

		Soll	12 Quellen	6 Quellen	4 Quellen	3 Quellen	2 Quellen
x^{abs}	mm	0.00	-0.20	-0.08	-0.12	-0.10	-0.07
y^{abs}	mm	10.00	12.88	13.12	13.26	13.24	13.51
r^{abs}	mm	5.00	1.05	1.47	1.95	1.53	1.66
f		2.0	9.6	5.2	3.4	5.2	4.8
<i>dist</i>	mm	0.00	2.89	3.12	3.26	3.14	3.51

Literatur

1. D. BOAS, *Time-domain standard data series*, University of Pennsylvania, URL http://www.lrsm.upenn.edu/pmi/DATA/stand_data.html.
2. A. ISHIMARU, *Wave propagation in random scattering media*, Academic Press, New York, 1978.
3. R. MODEL, R. HÜNLICH, *Optical imaging of highly scattering media*, Z. Angew. Math. Mech., **76** (1996), Suppl. 1, pp. 483–484.
4. R. MODEL, R. HÜNLICH, M. ORLT, M. WALZEL, *NIR imaging in random media using time domain data*, Proc. SPIE, **2925** (1996), pp. 77–88.

Phasensfeldgleichungen und Stefan-Probleme

Bearbeiter: O. Klein, J. Sprekels

Kooperation: P. Colli, Universität Turin,
M. Grasselli, Polytechnikum Mailand

In Fortführung der Untersuchungen vom Vorjahr wurden Phasensfeldgleichungen vom Penrose-Fife-Typ und Stefan-Probleme untersucht, mit denen diffusive Phasenübergänge modelliert werden. Neben der numerischen Implementation der im Vorjahr (siehe [5]) hergeleiteten Semidiskretisierung der Phasensfeldgleichungen wurden neue Existenzresultate bewiesen. So konnte unter anderem gezeigt werden (siehe [6]), daß eine Anfangsrandwertaufgabe für ein Penrose-Fife-System der Form

$$c_0 \theta_t + L\chi_t + \kappa \Delta \frac{1}{\theta} = g, \quad (1)$$

$$(\delta + \eta)\chi_t - \varepsilon \Delta \chi + \beta(\chi) - \rho \chi \ni L \left(\frac{1}{\theta_C} - \frac{1}{\theta} \right) - \frac{\rho}{2}, \quad (2)$$

wobei η eine vom Ort abhängige Funktion ist, eine Lösung hat, die mit Hilfe der Semidiskretisierung approximiert werden kann. Das System (1), (2), vervollständigt mit geeigneten Anfangs- und Randbedingungen, stellt ein vereinfachtes Modell zum anisotropen Kristallwachstum dar.

Die numerische Implementation der Semidiskretisierung baut auf KASKADE, einer am ZIB entwickelten Toolbox für adaptive Multilevelmethoden, auf. Die Semidiskretisierung in [5] führt in jedem Zeitschritt auf ein System nichtlinearer elliptischer Gleichungen. Zur näherungsweise Lösung dieses Systems wurde, siehe [6], ein Ansatz übertragen, der für bestimmte nichtlineare skalare elliptische Gleichungen von Kornhuber in [7, 8] beschrieben wurde. Mit einer geeigneten Wahl für die Funktion η konnte dendritisches Wachstum simuliert werden (siehe Abbildung 1). Mit Unterstützung von G. Reinhardt (Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen) wurden die numerischen Resultate in Form eines Videos visualisiert.

Weiterhin wurden Stefan-Probleme (siehe [1]) und Phasensfeldgleichungen untersucht, die sich für Materialien mit thermischer Erinnerung ergeben. So konnte in [2] gezeigt werden, daß Anfangsrandwertaufgaben für Penrose-Fife-Systeme der Form

$$\partial_t (c_0 \theta + \lambda(\chi)) - \kappa \Delta (k * \theta) + \delta \Delta \left(\frac{1}{\theta} \right) = g, \quad (3)$$

$$\delta \chi_t - \varepsilon \Delta \chi + \beta(\chi) \ni -\sigma'(\chi) - \frac{\lambda'(\chi)}{\theta} \quad (4)$$

unter schwachen Voraussetzungen an λ, σ, β und den Memory-Kern k eine eindeutig bestimmte (schwache) Lösung besitzen. Durch dieses Resultat sind erstmalig diffusive Phasenübergänge in einer weiten Klasse von Materialien mit thermischer Erinnerung der mathematischen Behandlung zugänglich gemacht worden.

Das Thema wurde im Rahmen des EU-Projektes „Phase Transitions and Surface Tension“ bearbeitet.

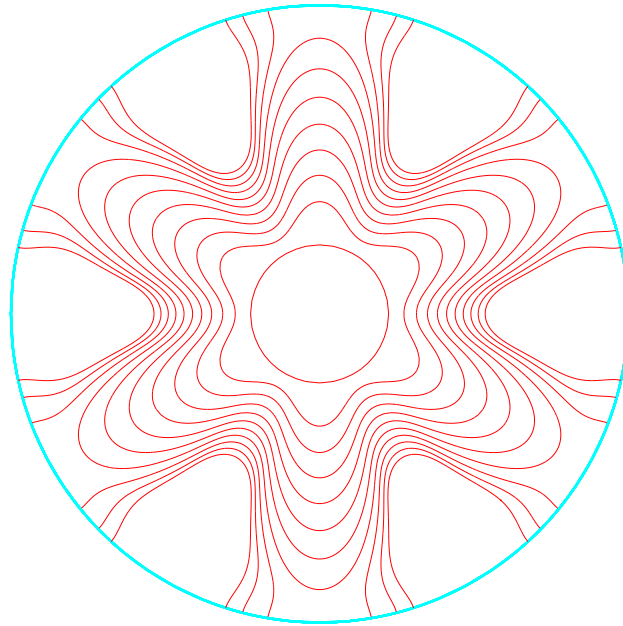


Abb. 1: Zeitliche Entwicklung der $\frac{1}{2}$ -Niveaulinie des Ordnungsparameters in einer unterkühlten Schmelze.

Literatur

1. P. COLLI, M. GRASSELLI, J. SPREKELS, *Automatic control via thermostats of a hyperbolic Stefan problem with memory*, WIAS-Preprint No. 282, Berlin 1996, eingereicht.
2. P. COLLI, J. SPREKELS, *Weak solution to some Penrose–Fife phase-field systems with temperature-dependent memory*, WIAS-Preprint No. 290, Berlin 1996, eingereicht.
3. ———, *On a Penrose-Fife model with zero interfacial energy leading to a phase-field system of relaxed Stefan type*, Ann. Mat. Pura Appl. , CLXIX (1995), pp. 269–289.
4. ———, *Stefan problems and the Penrose-Fife phase field model*, WIAS-Preprint No. 127, Berlin 1994, erscheint in: Adv. Math. Sci. Appl.
5. O. KLEIN, *A semidiscrete scheme for a Penrose-Fife system and some Stefan problems in \mathbb{R}^3* , Adv. Math. Sci. Appl., Vol. 7, No. 1 (1997), pp. 489–521.
6. ———, *Some approximation results for phase-field systems of Penrose-Fife type and Stefan problems*, Dissertation, in Vorbereitung.
7. R. KORNUBER, *Adaptive monotone multigrid methods for some non-smooth optimization problems*, WIAS-Preprint No. 156, Berlin 1995.
8. ———, *Adaptive monotone multigrid methods for nonlinear variational problems*, erscheint 1997 in: Advances in Numerical Mathematics, John Wiley & Sons and B. G. Teubner.
9. 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.

Halbleitergleichungen mit der Einteilchenenergie als einer unabhängigen Variablen

Bearbeiter: U. Krause

Kooperation: K. Gärtner, Institut für Integrierte Systeme, ETH Zürich

Förderung: DFG-Sachbeihilfe

Kinetische Gleichungen sind von Streukoeffizienten abhängig, die die Wechselwirkung der betrachteten Teilchen mit anderen, nicht von den Gleichungen selbst beschriebenen Teilchen und Strukturen enthalten. In die Streukoeffizienten geht die Wellenfunktion des Elektrons im Halbleiterkristall ein. Es war daher erforderlich, die Wellenfunktion eines Teilchens im periodischen Potential genauer zu untersuchen. Es wurde gezeigt, daß sich jeder Idealkristall in \mathbb{R}^n in natürlicher Weise als *hauptpolarisierte Abelsche Varietät* über \mathbb{C}^n darstellen läßt. Es existiert demzufolge auf $\Lambda \times \Lambda$ eine ganzzahlige schiefsymmetrische Matrix $E : \Lambda \times \Lambda \rightarrow \mathbb{Z}$, deren Elementarteiler sämtlich gleich 1 sind, wobei Λ das Translationsgitter des Idealkristalls im Phasenraum $V \cong \mathbb{R}^n \oplus \mathbb{R}^n$ ist. Bezüglich derartiger Gitter kann die Gitterdarstellung der Heisenberggruppe definiert werden. Die Gitterdarstellung ist äquivalent sowohl zur Orts- als auch zur Impulsdarstellung der Quantenmechanik. Die Eigenfunktionen des Impulsoperators in der Gitterdarstellung sind

$$\Psi_{(1)v}(x_{(1)}, x_{(2)}) = \exp\left(\pi i {}^t(2 \mathbb{B}_v(x_{(1)}) - x_{(1)}) x_{(2)}\right), \quad v \in \mathbb{N},$$

wobei $\mathbb{B}_v(x_{(1)})$ eine Funktion ist, die $x_{(1)}$ auf den bezüglich des Impulsgitters kongruenten Punkt in der v -ten Brillouinzone des Impulsraumes abbildet. Analog sind die Eigenfunktionen des Ortsoperators $\left\{ \Psi_{(2)v}(x_{(2)}, x_{(1)}) \right\}_{v=1}^{\infty}$ aufgebaut, wobei statt der Brillouinzone des Impulsraumes die Wigner-Seitz-Zellen des Ortsgitters im Ortsraum zu verwenden sind und der gesamte Exponent negatives Vorzeichen besitzt.

Die o. g. Eigenfunktionen des Impulsoperators führen zu einer deutlichen Verbesserung des Galerkinverfahrens für die Berechnung der Bandstruktur und der Wellenfunktionen des Kristallelektrons. Mit den Impulseigenfunktionen kann man *prototypische* Streukoeffizienten berechnen, die die Abhängigkeit vom Kristallgitter richtig berücksichtigen, aber die Abhängigkeit vom realen Kristallpotential ignorieren.

Literatur

1. D. MUMFORD, M. NORI, P. NORMAN, *Tata Lectures on Theta III*, Birkhäuser Verlag, Boston 1991.
2. U. KRAUSE, *Idealkristalle als Abelsche Varietäten*, WIAS-Preprint No. 258, Berlin 1996.

Zeitliche Asymptotik der Lösung der Korteweg-de-Vries-Gleichung

Bearbeiter: H. Stephan

Kooperation: E. Ya. Khruslov, V. A. Marchenko, Institut für tiefe Temperaturen, Charkow

Die hier vorgestellten Ergebnisse sind eine Fortsetzung der Arbeiten zu den von V. A. Marchenko in [1] entwickelten Operator-algebraischen Methoden zur Lösung nichtlinearer partieller Differentialgleichungen. Aufbauend auf Ideen von E. Ya. Khruslov (siehe [2]) wurden die zeitlichen Asymptotiken (für $t \rightarrow \infty$ und $t \rightarrow -\infty$) der Lösung der Korteweg-de-Vries-Gleichung (KdVE) $u_t(x,t) + 6u(x,t)u_x(x,t) + u_{xxx}(x,t) = 0$ für spezielle nichtabklingende Anfangswerte $u(x,0)$ untersucht. Mit Operator-algebraischen Methoden läßt sich zeigen, daß sich die Lösung $u(x,t)$ als Funktional der Lösung einer Schar (mit den Scharparametern x und t) von Integralgleichungen darstellen läßt. Es wurde ein Approximationsverfahren entwickelt, das die Lösung dieser Gleichungen gleichmäßig für große x und t bzw. für große x und $-t$ approximiert. So konnte nachgewiesen werden, daß die Lösung der KdVE an der Wellenfront (für große x) für $t \rightarrow \infty$ in schnelle, hohe und für $t \rightarrow -\infty$ in langsame, flache asymptotische Solitonen zerfällt, die sich explizit berechnen lassen (siehe auch WIAS-Preprint Nr. 287). Das gefundene Approximationsverfahren erwies sich auch als effizient zur numerischen Berechnung der Lösung.

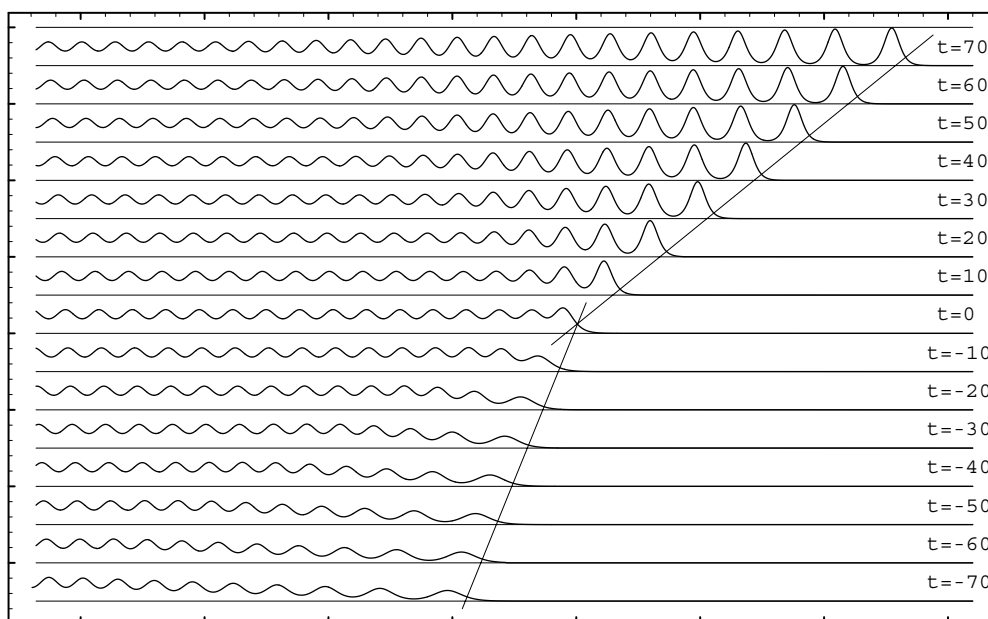


Abb. 1: Lösung der KdVE mit speziellem Anfangswert für verschiedene Zeiten

Literatur

1. V. A. MARCHENKO, *Nonlinear Equations and Operator Algebras*, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, 1988.
2. E. YA. KHRUSLOV, V. P. KOTLYAROV, *Soliton Asymptotics of Nondecreasing Solutions Of Nonlinear Completely Integrable Evolution Equations*, Adv. Soviet Math., **9** (1994).

Adaptive Optimierung von Flugprofilen mit Gedächtnislegierungen

Bearbeiter: J. Sprekels

Kooperation: I. Müller, St. Seelecke, 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.

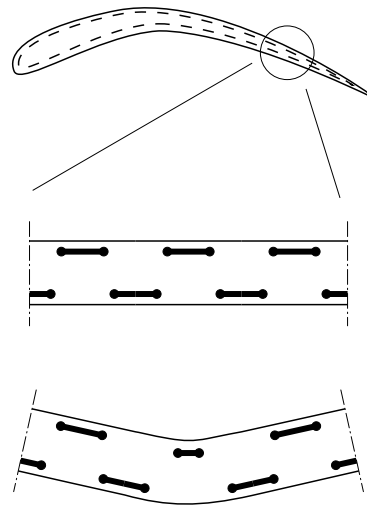


Abb. 1: Profileinstellung aufgrund der durch die Verkürzung eines beheizten Drahtsegmentes hervorgerufenen Biegung

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 zugrundeliegenden 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_∞ , p_∞ , T_∞ charakterisieren die Anströmbedingungen.

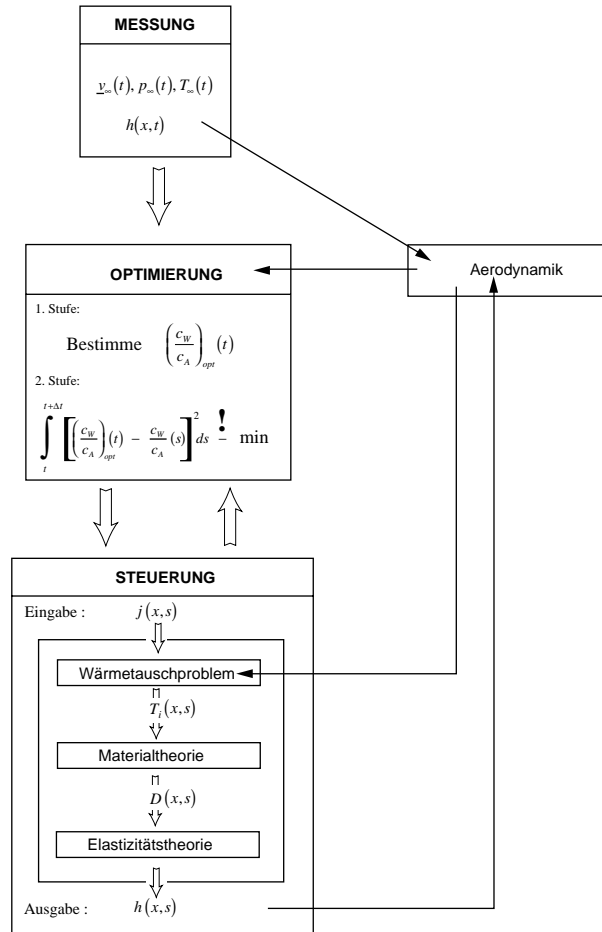


Abb. 2: Ablaufplan des Echtzeitproblems

Im Berichtszeitraum ist es gelungen, die folgenden Teilaspekte der Gesamtproblematik erfolgreich zu behandeln:

- Für eine vereinfachte Aerodynamik (2D, potentialtheoretischer Ansatz) wurde das Problem der effektiven Bestimmung des optimalen Profils aus den Anströmbedingungen für den Fall gelöst, daß der Widerstandsbeiwert C_W bei festgehaltenem Auftriebswert C_A minimal werden soll.
- Das Vorwärtsproblem der Steuerung wurde gelöst für den einfachsten Fall nur eines Drahtsegmentes, wobei lineare Elastizität und nichtlinearer Wärmeaustausch angenommen und das Materialverhalten des Memorydrahtes nach Achenbach [1,2] durch ein implizites System nichtlinearer Algebra-Differentialgleichungen für die Phasenfraktionen von Austenit und Martensitvarianten modelliert wurden.

Ferner wurde im Labor des Instituts für Thermodynamik und Reaktionskinetik der TU Berlin mit den Arbeiten zur Herstellung eines Prototyps begonnen.

Literatur

1. M. ACHENBACH, *Simulation des Spannungs-Dehnungs-Temperaturverhaltens*, Dissertation, TU Berlin 1987.
2. I. MÜLLER, S. SEELECKE, *Thermodynamic aspects of shape memory alloys*, Preprint, TU Berlin 1996.

Hysteresephänomene in Magnetoelastizität und Thermoelastoplastizität

Bearbeiter: M. Siegfanz, J. Sprekels

Kooperation: M. Brokate, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel,
P. Krejčí, Tschechische Akademie der Wissenschaften, Prag

Ziel dieses Projektes ist es, realistische Modelle für die Evolution von Systemen herzuleiten, in denen Nichtlinearitäten vom Hysterese-Typ auftreten. Von besonderem Interesse für die Anwendungen sind dabei Fragen der elastischen Verformung von Ferromagneten in magnetischen Feldern (Magnetostriktion) und der Temperaturabhängigkeit elastoplastischer Hysteresen in Stählen oder Legierungen mit Formgedächtnis.

Zum erstgenannten Thema wurde ein eindimensionales Modell entwickelt, das in vereinfachter Form auf die Feldgleichungen

$$b_t - h_{xx} + (bu_t)_x = 0, \quad (1)$$

$$u_{tt} - u_{xx} - \eta u_{xxt} + h_x b = g, \quad (2)$$

$$b = h + m, \quad m = \mathcal{P}[h], \quad (3)$$

mit geeigneten Anfangs- und Randbedingungen führt; dabei wird die ferromagnetische Hysterese zwischen der Magnetisierung m und dem magnetischen Feld h in Form einer Operatorgleichung $m = \mathcal{P}[h]$ mit einem Hysterese-Operator vom *Preisach-Typ* (vgl. [1]) modelliert.

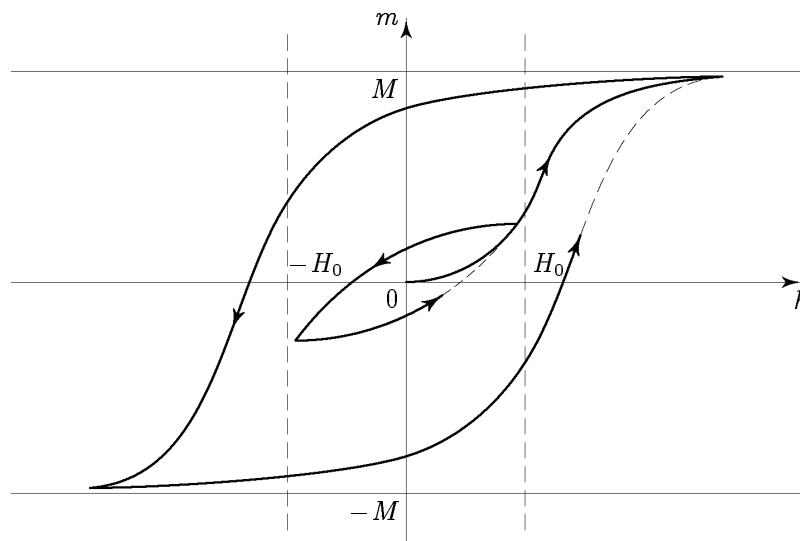


Abb. 1: Hysteresis-Diagramm $m = \mathcal{P}[h]$.

Es gelang, globale Existenz von (schwachen) Lösungen sowohl für den viskosen ($\eta > 0$) als auch für den nichtviskosen ($\eta = 0$) Fall nachzuweisen (im letzteren Fall allerdings nur für kleine Daten). In Zukunft sollen mehrdimensionale Situationen untersucht werden, die für den Effekt der Magnetostriktion relevant sind.

Mathematische Modelle der Elastoplastizität im isothermen Fall beruhen meistens entweder auf der Verwendung von Variationsungleichungen oder der wesentlich allgemeineren Hysterese-Operatoren vom PRANDTL-ISHLINSKII-Typ (vgl. [1]). Die Einbeziehung der Temperatur als

zusätzlicher Zustandsvariable bereitet im Fall der Hysterisis-Operatoren grundsätzliche Schwierigkeiten, da nicht klar ist, wie dann die thermodynamischen Potentiale *freie Energie*, *innere Energie* und *Entropie* definiert und der Erste und Zweite Hauptsatz der Thermodynamik angewendet werden können.

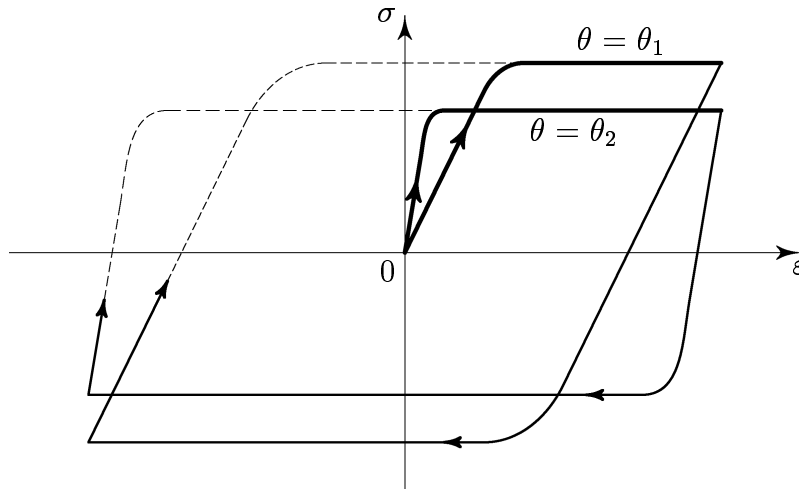


Abb. 2: Hysterisis-Diagramm $\sigma = \mathcal{P}[\varepsilon, \theta]$ für verschiedene Temperaturen θ (schematisch).

In [2] ist es nunmehr erstmalig gelungen, für temperaturabhängige PRANDTL-ISHLINSKII-Operatoren der Form

$$\sigma = \mathcal{P}[\varepsilon, \theta] = \int_0^\infty \varphi(r, \theta) s_r[\varepsilon] dr, \quad (4)$$

($\sigma =$ Spannung, $\varepsilon =$ Verzerrung, $\theta =$ absolute Temperatur, $\varphi =$ Dichtefunktion, $s_r =$ elastisch-plastisches Element zur Schwelle $r \geq 0$) eine thermodynamisch konsistente Theorie der Thermoplastoelastizität zu entwickeln. Die grundlegende Idee beruht darauf, die in [1] ausgeführte Theorie der *Hysterisis-Potentiale* zu verallgemeinern. Freie Energie, innere Energie und Entropie ergeben sich dann als *Operatoren*, nicht länger als *Funktionen*, und man erhält eine Thermodynamik von Operatoren. Weiterentwicklungen dieses Konzeptes wurden in den Arbeiten [3,4] vorgenommen.

Für den einfachsten eindimensionalen Fall erhält man Zustandsgleichungen der Form (Massendichte $\rho = 1$ gesetzt)

$$u_{tt} - \sigma_x + \gamma u_{xxxx} = f(x, t), \quad (5)$$

$$(C_V \theta + \mathcal{V}[u_x, \theta])_t - \kappa \theta_{xx} = g(x, t) + \sigma u_{xt}, \quad (6)$$

wobei σ durch (4) und \mathcal{V} durch

$$\mathcal{V}[u_x, \theta] = \frac{1}{2} \int_0^\infty (\varphi(r, \theta) - \theta \varphi_\theta(r, \theta)) s_r^2[u_x] dr \quad (7)$$

gegeben sind. In [2] wurde die Existenz einer (schwachen) Lösung (u, θ) für eine Anfangs-Randwertaufgabe für dieses System gezeigt, in [3, 4] wurden diese Resultate verallgemeinert. Aufgrund der erzielten Ergebnisse steht nun erstmalig ein sehr allgemeiner thermodynamisch konsistenter Ansatz zur mathematischen Modellierung von Problemen der Thermoelastoplastizität zur Verfügung. Die Arbeit an dieser Problemstellung soll im kommenden Jahr intensiviert werden.

Literatur

1. M. BROKATE, J. SPREKELS, *Hysteresis and Phase Transitions*, Applied Mathematical Sciences Vol. **121**, Springer-Verlag, New York 1996.
2. P. KREJČÍ, J. SPREKELS, *On a system of nonlinear PDE's with temperature-dependent hysteresis in one-dimensional thermoplasticity*, WIAS-Preprint No. 219, Berlin 1996; erscheint in: J. Math. Anal. Appl.
3. P. KREJČÍ, J. SPREKELS, *Towards a thermodynamic theory of hysteresis operators: One-dimensional thermoplasticity*, in Vorbereitung.
4. P. KREJČÍ, J. SPREKELS, *One-dimensional thermovisco-elastoplasticity with hysteresis*, in Vorbereitung.
5. P. KREJČÍ, J. SPREKELS, *Global solutions to a coupled parabolic-hyperbolic system with hysteresis in 1-d magnetoelasticity*, WIAS-Preprint No. 237, Berlin 1996; erscheint in: Nonlin. Anal. TMA.

Polymerabbau

Bearbeiter: K. Zacharias

Kooperation: G. Rafler, M. Pickard, Fraunhofer-Institut für Angewandte Polymerforschung, Teltow-Seehof

Es wird ein Reaktions-Diffusionsmodell des hydrolytischen Abbaus spezieller Polymere betrachtet. Derartige Modelle spielen eine Rolle bei Untersuchungen zur kontrollierten Freisetzung von Pharmaka, die in biologisch abbaubare Polymermatrizen eingebracht sind. Die betrachteten Polymere sind Polylactide, d. h. Polyester auf Milchsäurebasis. Bei der mathematischen Modellierung des Abbauvorganges werden Reaktionskinetik, Transport durch Diffusion und osmotische Vorgänge berücksichtigt. Das mathematische Modell besteht demgemäß aus einer Kombination von Reaktionsgleichungen mit Diffusions-Reaktionsgleichungen. Die experimentellen Gegebenheiten gestatten es, ein räumlich eindimensionales Modell zu betrachten.

Die beteiligten Substanzen (bzw. deren Konzentrationen) seien W – Wasser, S_1 – Milchsäure, S_2 – Lactoylmilchsäure, L – Lactid, E – Estergruppen des Polymers, S – Säuregruppen des Polymers.

Die niedermolekularen diffusionsfähigen Substanzen W, S_1, S_2 genügen den Diffusions-Reaktionsgleichungen (mit den Diffusionskonstanten D_0, D_1, D_2)

$$\frac{\partial W}{\partial t} - D_0 \frac{\partial W}{\partial x} = R_0, \quad \frac{\partial S_1}{\partial t} - D_1 \frac{\partial S_1}{\partial x} = R_1, \quad \frac{\partial S_2}{\partial t} - D_2 \frac{\partial S_2}{\partial x} = R_2. \quad (1)$$

Die höhermolekularen Anteile genügen Reaktionsgleichungen

$$\frac{dL}{dt} = R_3, \quad \frac{dE}{dt} = R_4, \quad \frac{dS}{dt} = R_5, \quad (2)$$

wobei die rechten Seiten den durch die Reaktionskinetik bestimmten Quell- und Senkenmechanismus der beteiligten Konzentrationen enthalten. Es sind in den Konzentrationen polynomiale Terme der Form

$$\begin{aligned} R_0 &= -[k_1 + k_2 S + k_3(S_1 + S_2)]WL - [k_5 + k_6 S + k_7(S_1 + S_2)]W(E + S_2), \\ R_1 &= 2[k_5 + k_6 S + k_7(S_1 + S_2)]W(S + S_2) - k_4 S_1, \\ R_2 &= [k_1 + k_2 S + k_3(S_1 + S_2)]WL + [k_5 + k_6 S + k_7(S_1 + S_2)]W(2S - S_2) - k_4 S_2, \\ R_3 &= -[k_1 + k_2 S + k_3(S_1 + S_2)]WL, \\ R_4 &= -[k_5 + k_6 S + k_7(S_1 + S_2)]WE, \\ R_5 &= [k_5 + k_6 S + k_7(S_1 + S_2)]W(E - 4S) \end{aligned}$$

mit Reaktionskonstanten $k_1, k_2, k_3, k_5, k_6, k_7$ und einer osmotische Effekte beschreibenden Konstanten k_4 .

Wir betrachten das System (1), (2) auf $Q = \{(t, x) | t > 0, 0 < x < a\}$ unter Anfangsbedingungen zur Zeit $t = 0$ für alle beteiligten Konzentrationen, wobei nach den experimentellen Gegebenheiten $W(0, x) = S_1(0, x) = S_2(0, x) = 0$ ist. Für die Diffusionsgleichungen werden bei $x = 0$ homogene Neumann-Randbedingungen

$$\frac{\partial W(t, 0)}{\partial x} = \frac{\partial S_1(t, 0)}{\partial x} = \frac{\partial S_2(t, 0)}{\partial x} = 0 \quad \text{für } t > 0$$

vorgeschrieben, bei $x = a$ sind Dirichlet-Randwerte

$$W(t, a) = w(t), S_1(t, a) = S_2(t, a) = 0$$

gegeben. Der Randwert w der Wasserkonzentration wird durch die empirische Formel

$$w(t) = C + A \exp(-M(t)/B)$$

gegeben, wobei $M = M(t)$ eine mittlere Molmasse ist, definiert durch $M(t) = c_1 P(t) + c_2$ mit $P = P(t)$ als mittlerem Polymerisationsgrad. Hierbei sind A, B, C, c_1, c_2 gegebene Konstanten und P ist ein (geeignet gewichtetes) Ortsmittel des lokalen Polymerisationsgrades $p(t, x) = 1 + [E(t, x)/S(t, x)]$.

Die Modellgleichungen lassen sich nach Standardmethoden numerisch lösen. Wesentliche Größe für den Vergleich zwischen Messung und Rechnung ist der Zeitverlauf $M = M(t)$ des mittleren Molekulargewichtes. In Zusammenarbeit mit dem Kooperationspartner wurden zahlreiche Modellvarianten untersucht.

4.2 Forschungsgruppe Dynamische Systeme und Steuerungstheorie

4.2.1 Zusammenfassung

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

Das 1995 begonnene Projekt zur Dynamik von Mehrsektionslasern und zur optischen Nachrichtenübermittlung stellt das zentrale Projekt der Forschungsgruppe dar. Für das Synchronisationsverhalten von DFB-Halbleiterlasern wurde eine analytische Theorie entwickelt. Ferner wurden markante Fortschritte in Richtung eines Dreisektionslasers in enger Wechselwirkung mit den Experimentatoren erzielt. Bezüglich der Übertragung von Pulspaketen über lange Strecken in optischen Fasern wurden grundlegende Resultate zur Stabilität von N-Pulsen erzielt. Die positiven Auswirkungen einer engen Zusammenarbeit mit dem Kooperationspartner gelten auch für das Projekt zur optimalen Steuerung diskontinuierlicher Destillationsprozesse. Es konnten die Robustheit des Simulators entscheidend verbessert und somit praxisrelevante Resultate zur optimalen Steuerung von Batch-Destillationsprozessen unter Einschluß von Recycling erzielt werden. Für Differentialgleichungssysteme mit mehreren Zeitskalen wurden für den Fall des Stabilitätswechsels Kriterien für einen unmittelbaren bzw. einen verzögerten Stabilitätsaustausch abgeleitet, die für Modellreduktionen in der Reaktionskinetik und das Auftreten von Relaxationsschwingungen von Bedeutung sind. Hinsichtlich der Theorie des Orientierungswechsels des Erdmagnetfeldes wurden weitere Fortschritte erzielt, die auf Untersuchungen heterokliner Zyklen basieren. Hervorzuheben sind noch die Resultate zur Verzweigungstheorie von Gleichungen mit nicht kompakten Gruppen und deren Bedeutung für die Dynamik von Spiralwellen.

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.

4.2.2 Projekte

Modellierung, Analysis und Numerik von Prozessen in optischen Kommunikationssystemen

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

Kooperation: J. C. Alexander, M. N. Grillakis (Department of Mathematics, University of Maryland, USA), C. K. R. T. Jones (Division of Applied Mathematics, Brown University, USA), E. Patzak, B. Sartorius (Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin), H.-J. Wünsche (Institut für Physik der Humboldt-Universität zu Berlin)

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

Feodor-Lynen Stipendium der Alexander von Humboldt-Stiftung

In optischen Kommunikationssystemen werden optische Fasern benutzt, um Bit-Pakete schnell und zuverlässig über lange Distanzen hinweg übertragen zu können. Der Einsatz optischer Fasern in transatlantischen Kommunikationssystemen hängt wesentlich davon ab, ob der auftretenden Dämpfung entgegengewirkt werden kann und Signale somit ungestört übermittelt werden. Zugleich sollten die einzelnen Informationsbits im Signal möglichst dicht aufeinanderfolgen. Um optische Fasern optimal ausnutzen zu können, sollten die Bit-Pakete im Empfänger mit optischen anstatt mit elektronischen Komponenten regeneriert werden. Dazu müssen unter anderem Modulations- und Trägerfrequenzen des Signals zurückgewonnen und anschließend die Frequenz der optischen Empfänger-Komponente synchronisiert werden.

1. Übertragung von Pulspaketen in optischen Fasern mit Phasen-sensitiven Verstärkern

In [4] wurde vorgeschlagen, phasensensitive Verstärker zu benutzen, um eine ungestörte Übertragung von Signalen in optischen Fasern zu garantieren. Weiterhin wurde in [4] formal eine Modellgleichung zur Beschreibung optischer Fasern unter dem Einfluß derartiger Verstärker hergeleitet und die Existenz eines stabilen 1-Pulses für sehr kleine Verstärkerdistanzen gezeigt. Der 1-Puls entspricht der Übertragung eines einzelnen Informationsbits.

Wir haben zunächst in [1] gezeigt, daß der 1-Puls tatsächlich stabil über einen großen Parameterbereich hinweg ist. Interessant sind dann Existenz und Stabilität von N -Pulsen, die der Übertragung mehrerer Informationsbits entsprechen. Motiviert durch dieses Problem wurde in [8] erstmals die Stabilität derartiger Lösungen untersucht, und es wurden allgemeine Kriterien entwickelt, die Stabilität garantieren. Anschließend haben wir in [9] für die Modellgleichung die Existenz von stabilen N -Pulsen für jedes N nachgewiesen. Dazu haben wir sogenannte reversible Orbit-flip Verzweigungen in einem abstrakten Kontext untersucht und das Resultat dann konkret auf die Modellgleichung angewendet. Sämtliche Voraussetzungen konnten analytisch für die Modellgleichung nachgewiesen werden. Stabilität der N -Pulse wurde mit der in [8] entwickelten Methode gezeigt. Zuletzt wurde die Modellgleichung mit numerischen Simulationen außerhalb des Parameterbereiches untersucht, in dem unsere analytischen Resultate gültig sind.

2. Regeneration von optischen Signalen mit Hilfe von Halbleiterlasern

Die Regeneration eines optischen Signales bedarf eines Entscheiderbauelementes, das den Takt des Signales erkennt und im richtigen Moment die Information abfragt. Eine optoelektronische Lösung dieser Aufgabenstellung wurde von Sartorius et al. am Heinrich-Hertz-Institut vorgeschlagen. Sie beruht auf den Selbstpulsationen, die kürzlich in Mehrsektions-DFB-Halbleiterlasern gefunden wurden. Wir untersuchen mathematische Modelle (Randwertprobleme

für hyperbolische Systeme erster Ordnung; gewöhnliche Differentialgleichungen, deren rechte Seiten implizit durch Sturm-Liouville Eigenwertprobleme gegeben sind), die das dynamische Verhalten von gerade diesen Mehrsektions-DFB-Halbleiterlasern beschreiben. Aus Sicht der Mathematik führt das Problem der Rückgewinnung der Signale auf Locking-Phänomene und erzwungene Symmetriebrechungen von rotierenden oder modulierten Wellen.

Im Laufe des letzten Jahres wurde die betrachtete Modellklasse durch Hinzunahme einer zusätzlichen Phasensteuersektion und die Berücksichtigung thermischer Effekte erweitert.

Dabei wurden folgende Themen bearbeitet:

Selbstpulsationen. Selbstpulsationen sind modulierte Wellen, die durch Hopf-Bifurkationen aus rotierenden Wellen entstehen. Wesentliche Charakteristika dieser Lösungen wurden beschrieben, so zum Beispiel der Bereich der Laserparameter, in dem die Selbstpulsationen auftreten, ihre Träger- und Repetitionsfrequenz, sowie ihre Amplitude und Stabilität. Vergleiche zwischen experimentellen und numerischen Ergebnissen, die von den Kooperationspartnern angestellt wurden, ergaben eine sehr gute Übereinstimmung.

Taktrückgewinnung. Aus mathematischer Sicht geht es hierbei um die Synchronisation der modulierten Welle unter Einwirkung einer externen, die Symmetrie und die Autonomie brechenden Störung vom gleichen Typ. Wir haben die Locking-Bereiche im Raum der Laser- und Signalparameter, sowie die Anzahl und die Stabilität der synchronisierten Lösungen analytisch beschrieben. Eine numerische Realisierung der entsprechenden Algorithmen ist derzeit in Arbeit.

Erzeugung von Laserpulsationen durch Injektion optischer Signale mit zeitlich konstanter Intensität. Die rotierenden Wellen werden durch externe Signale gleichen Typs gestört, die die Symmetrie, aber nicht die Autonomie des Systems brechen. Dabei entstehen synchronisierte rotierende bzw. modulierte Wellen. Zu diesem Thema wurden sowohl analytische Untersuchungen als auch numerische Simulationen durchgeführt.

Singularitäten. Die bisher bekannten Selbstpulsationen treten offenbar nur in der Nähe von komplizierten Singularitäten auf. Physikalisch gesehen handelt es sich um die Überlagerung zweier „erster Laserschwellen“ mit gleichen optischen Frequenzen. In den mathematischen Modellen treten diese Überlagerungen als Singularitäten der Kodimension drei (S^1 -äquivalente Hopf-Bifurkation mit zweifachem, nicht halbeinfachem Eigenwertpaar) auf. Deshalb ist zu erwarten, daß solche Selbstpulsationen nur bei Bauelementen mit mindestens drei einstellbaren Parametern stabil ansteuerbar sind. Diese qualitative Erkenntnis wurde durch die Experimente am Heinrich-Hertz-Institut bestätigt. Dort wurde eine zusätzliche „Phasensteuersektion“ in einem Zweisektions-DFB-Laser integriert, um durch Feinabstimmung des Stromes in der zusätzlichen Sektion eine Reproduzierbarkeit der Selbstpulsationen zu erreichen.

Normalform und versale Deformation der Kodimension drei Singularität wurden aufgestellt. Derzeit wird an der physikalischen Identifikation der Parameter und an der vollständigen Beschreibung der Dynamik nahe der Singularität gearbeitet.

Approximationen mit zeitabhängigen Moden. Ziel dieser Betrachtungen ist die Reduktion der partiellen Differentialgleichung auf eine gewöhnliche Differentialgleichung. Die rechte Seite der ODE wird allerdings implizit durch Sturm-Liouvillesche Randwertprobleme definiert. Dabei wird benutzt, daß die gekoppelten Wellengleichungen lineare Gleichungen für die komplexen Feldamplituden sind, deren Koeffizienten von den Ladungsträgerdichten abhängen. Folglich bietet sich eine Entwicklung der komplexen Feldamplituden nach entsprechenden Eigenfunktionen und beigeordneten Eigenfunktionen an. Diese hängen allerdings von den

Ladungsträgerdichten und damit parametrisch von der Zeit ab.

Auf dieser Grundlage wurde das Programmpaket AUTO mit einem Programm zur Berechnung der implizit gegebenen rechten Seiten verknüpft und auf Zwei- und Dreisektionslaser angewendet. Die genannten Arbeiten vertiefen das Verständnis der komplexen internen Dynamik dieser Bauelemente. Dadurch können wir unsere Modelle den sich abzeichnenden neuen Anwendungen (schnelles Schalten, schnelle elektrisch-optische Signalwandlung, Solitonenerzeugung) anpassen und neue Aufgabenfelder erschließen. Sowohl das ursprüngliche Ziel der Datenregeneration, wie auch diese neuen Probleme bedürfen intensiver zukünftiger Arbeit.

Literatur

1. J. C. ALEXANDER, M. N. GRILLAKIS, C. K. R. T. JONES, B. SANDSTEDTE, *Stability of pulses on optical fibers with phase-sensitive amplifiers*, erscheint in: Z. Angew. Math. Phys.
2. U. BANDELOW, H. J. WÜNSCHE, B. SARTORIUS, M. MÖHRLE, *Dispersive self-Q-switching in DFB Lasers - Theory versus Experiment*, erscheint in: Proceedings of 15th IEEE Int. Semiconductor Laser Conference, eingereicht bei: IEEE Journal of Quantum Electronics.
3. U. BANDELOW, H.-J. WÜNSCHE, R. SCHATZ, *A correct single-mode photon rate equation for multi-section lasers*, IEEE Photon. Technol. Lett., Vol. **8** (1996), pp. 614–617.
4. J. N. KUTZ, C. V. HILE, W. L. KATH, R.-D. LI, P. KUMAR, *Pulse propagation in nonlinear optical fiber-lines that employ phase-sensitive parametric amplifiers*, J. Opt. Soc. Am. B **11** (1994), pp. 2112–2123.
5. D. PETERHOF, L. RECKE, B. SANDSTEDTE, *On frequency locking of self-pulsating two-section DFB lasers*, in “Self-Organization in Activator-Inhibitor-Systems: Semiconductors, Gas-Discharge and Chemical Active Media”, Contributions to the 157th WE-Heraeus-Seminar, H. Engel, F.-J. Niedernostheide, H.-G. Purwins, and E. Schöll, (Hrsg.), pp. 218–222, Wissenschaft & Technik Verlag, Berlin, 1996.
6. L. RECKE, D. PETERHOF, *Abstract forced symmetry breaking*, WIAS-Preprint No. 256, Berlin 1996.
7. L. RECKE, D. PETERHOF, *Forced frequency locking in S^1 -equivariant differential equations*, WIAS-Preprint No. 257, Berlin 1996.
8. B. SANDSTEDTE, *Stability of multiple-pulse solutions*, erscheint in: Trans. Amer. Math. Soc.
9. B. SANDSTEDTE, C. K. R. T. JONES, J. C. ALEXANDER, *Existence and stability of N-pulses on optical fibers with phase-sensitive amplifiers*, erscheint in: Physica D.
10. B. SARTORIUS, M. MÖHRLE, S. REICHENBACHER, H. PREIER, H. J. WÜNSCHE, U. BANDELOW, *Dispersive self-Q-switching in DFB Lasers*, erscheint in: IEEE Journal of Quantum Electronics.

11. H. WENZEL, U. BANDELOW, H.-J. WÜNSCHE, J. REHBERG, *Mechanisms of fast self pulsations in two-section DFB lasers*, IEEE Journal of Quantum Electronics QE-32, No.1 (1996), pp. 69-79.

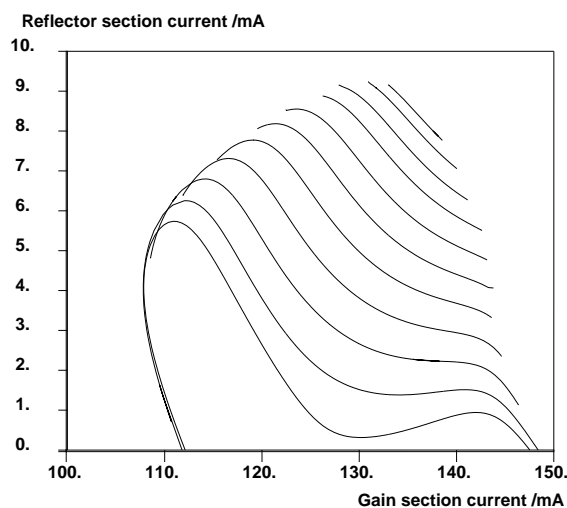


Abb. 1: 3-Sektions DFB Laser: Linien gleicher Pulsationsperiode in der Ebene der DFB-Injektionsströme. Der Strom in der Phasensteuersektion wurde auf 40 mA festgehalten.

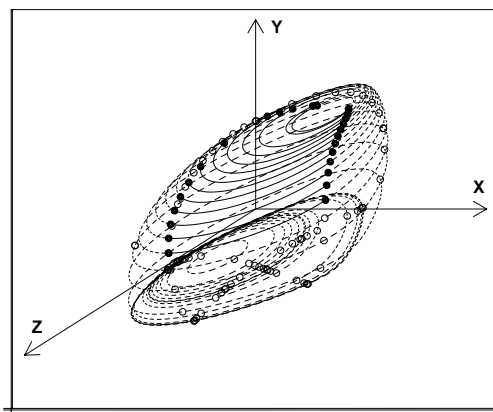


Abb. 2: Familie der periodischen Orbits der Selbstpulsationen (parametrisiert durch den an der hoch gepumpten DFB-Sektion anliegenden Strom) mit einer subkritischen und einer superkritischen Hopf-Bifurkation und einer dynamischen Sattel-Knoten-Bifurkation.

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 Polymerisationsprozessen mit mehreren unterschiedlichen Monomeren im Semibatch-Betrieb. Diese Simulationen werden beim Projektpartner verwendet, um aus Massen- bzw. Molekulargewichtsverteilungen von eingebauten Monomeren Aussagen über die zu erwartende Qualität des Produktes abzuleiten.

Niedrige Dimension durch Ansatz für differentielle Verteilungen. Für den Semibatch-Betrieb ist kennzeichnend, daß die Verteilungen der zeitlichen Ableitungen der Molekulargewichte eine wesentlich geringere Komplexität als die Verteilungen der Molekulargewichte aufweisen. Deswegen kommt die endlichdimensionale Approximation der „differentiellen“ Verteilungen mit wesentlich weniger Gleichungen aus als eine direkte Approximation der gesuchten Verteilungen. Das macht den Ansatz in [3] als Ausgangspunkt wieder interessant. Wir verwenden

$$P_i(t) = P_i(0) + \int_0^t \lambda(s)^i \sum_{v=0}^k \alpha_v(s) i^v ds$$

zur Approximation des Molekulargewichts des Polymers der Kettenlänge i zum Zeitpunkt t . λ , k und $\alpha_0, \dots, \alpha_k$ sind zu bestimmen.

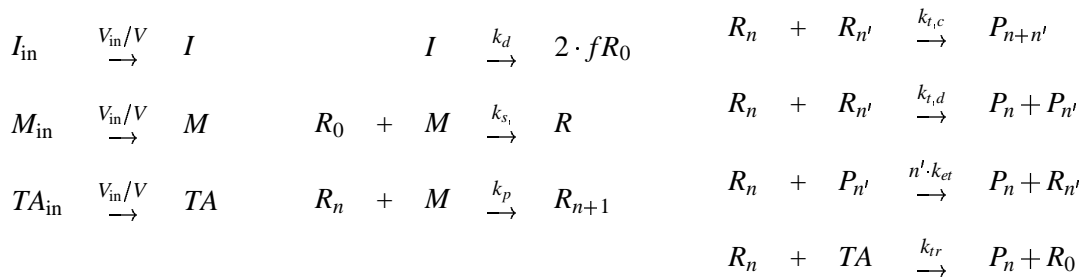
Mehrdimensionaler Ansatz. Bei mehreren beteiligten Monomerspezies sind räumlich mehrdimensionale (diskrete) Verteilungen zu approximieren. Wir summieren zunächst die Molekulargewichtskonzentrationen für gleiche Kettenlängen auf und benutzen für die so erhaltene Verteilung den obigen eindimensionalen Ansatz. Den mehrdimensionalen Ansatz bekommen wir dann aus dem Produkt des eindimensionalen Ansatzes mit einer geeigneten mehrdimensionalen Verteilung:

$$P_{i_1, \dots, i_m} = P_{i_1 + \dots + i_m} \beta_{i_1, \dots, i_m}.$$

Bestimmung der Koeffizienten. In [1] wurde dargelegt, wie u. a. mit Hilfe des Galerkinansatzes und der Momentenmethode λ , k und die Koeffizienten $\alpha_0, \dots, \alpha_k$ bestimmt werden. Die zur Berechnung notwendigen Gleichungen werden nicht unmittelbar gelöst, sondern als Kontrollproblem formuliert und während der Simulation mitgeführt.

Die Gleichungen für das Momentensystem werden von einem chemischen Compiler aus der Reaktionskinetik abgeleitet. Es wurde eine Sprache entwickelt, die eine kompakte Notation der Reaktionskinetik unabhängig von der Zahl der beteiligten Monomere ermöglicht. Die Ausgabe erfolgt entsprechend der vorhandenen Simulationsumgebung, z. B. als Fortrancode. Über eine plattformunabhängige graphische Oberfläche ist die Benutzerführung von der Eingabe der Reaktionskinetik bis zur Simulation und Visualisierung der Ergebnisse möglich.

Ergebnisse. Abbildung 1 zeigt die Zugabestrategie und die Approximation der Masseverteilung bei einem Semi-Batch-Prozeß über 200000 s für unterschiedliche k . Dabei wurde das folgende Reaktionsschema verwendet.



Die Kettenlänge wurde für die Darstellung logarithmisch skaliert.

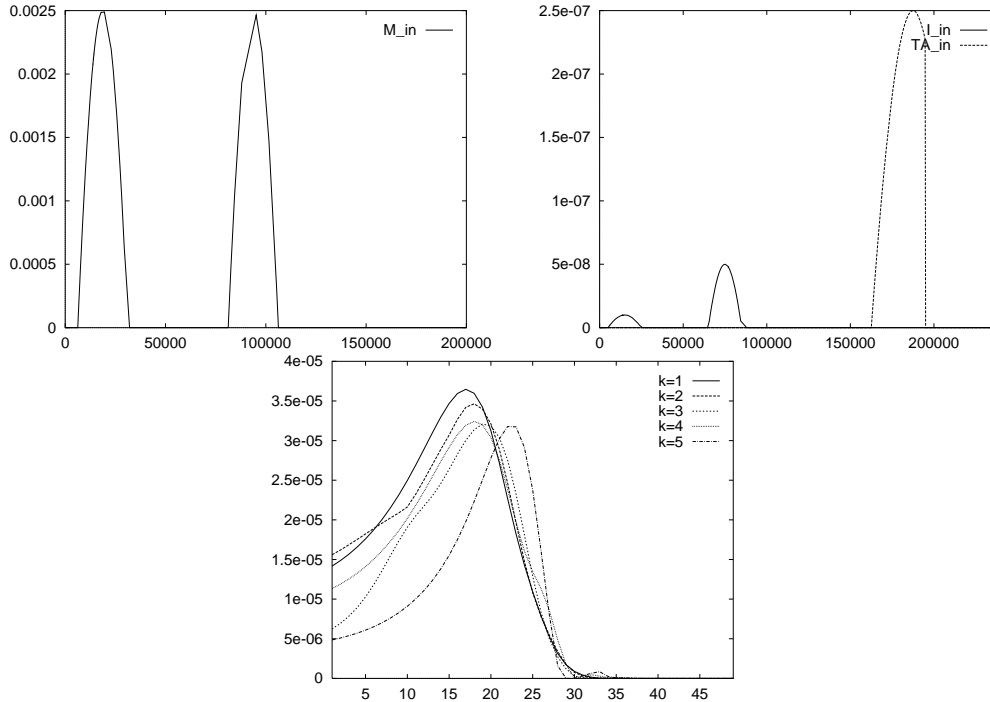


Abb. 1: Zugabestrategie für Monomer (M_{in}), Initiator (I_{in}) und Regler (R_{in}) für einen Semi-Batch-Prozeß und Masseverteilung am Ende des Prozesses für verschiedene Approximationsansätze.

Literatur

1. I. BREMER, *Banach spaces for modelling polymerization processes*, in Proceedings of the 3rd Workshop on Modelling of Chemical Reaction Systems, Heidelberg, 24–26 August 1996, DKFZ und IWR Heidelberg, Springer.
2. I. BREMER, R. ANTONOVA, *Projektionsverfahren zur Simulation von Copolymerisationsprozessen*, in: *Mathematik – Schlüsseltechnologie für die Zukunft* (K.-H. Hoffmann, W. Jäger, Th. Lohmann, H. Schunck, eds.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1997), pp. 75–82.
3. P. DEUFLHARD, M. WULKOW, *Computational treatment of polyreaction kinetics by orthogonal polynomials of a discrete variable*, *Impact*, **1** (1989).

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)

Die ökonomische Relevanz des Projekts und das zu seiner Bearbeitung entwickelte Konzept wurden im Jahresforschungsbericht 1995 erläutert.

Das mathematische Modell für die zu steuernden Destillationsprozesse stellt ein großes nichtlineares Algebro-Differentialgleichungssystem vom Typ

$$\begin{aligned} \frac{dx^{(1)}}{dt} &= f_1(x^{(1)}, x^{(2)}, u), \\ 0 &= f_2(x^{(1)}, x^{(2)}, u) \end{aligned} \quad (1)$$

dar, wobei $x = \text{col}(x^{(1)}, x^{(2)})$ den Vektor der Prozeßzustandsgrößen (Stoffmengen, Konzentrationen, Drucke, Temperaturen etc.) und u den Vektor der Steuergrößen bezeichnet, durch die von außen auf den Prozeßverlauf Einfluß genommen werden kann. Diese Steuergrößen können zeitlich konstante Parameter, $u_i = p_i$, oder zeitlich veränderliche Steuerfunktionen, $u_i = u_i(t)$, $t_0 \leq t \leq t_e$, sein. Bei realen Destillationsprozessen kann das System (1) aus Tausenden von Gleichungen bestehen. Die Steuergrößen sind so zu wählen, daß die Lösungen noch gewisse Zusatzbedingungen erfüllen. Typisch sind hierbei u. a. Bedingungen der Gestalt

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} x_j(t) dt \geq a_j, \quad j \in J \quad (2)$$

(Massenbedingungen) oder

$$\frac{\int_{t_i}^{t_{i+1}} x_j(t) x_k(t) dt}{\int_{t_i}^{t_{i+1}} x_j(t) dt} \geq b_{jk}, \quad j \in J, k \in K \quad (3)$$

(Reinheitsbedingungen) für diejenigen Teilabschnitte des Prozeßablaufs, die Nutzfraktionen darstellen. Die Zeitpunkte t_i, t_{i+1} sind Umschaltzeiten und somit ebenfalls Steuergrößen.

Das Optimalsteuerungsproblem läßt sich dann in der Form $F(x, u) = \min_u$ unter den Nebenbedingungen (1), (2), (3) und $u \in \mathcal{U}$ schreiben. Dabei ist F ein vorgegebenes Zielfunktional (z. B. größte Ausbeute bei vorgegebener Prozeßlaufzeit oder kleinste Prozeßlaufzeit bei vorgeschriebener Ausbeute oder „Profit“ = Ausbeute/Prozeßlaufzeit), und \mathcal{U} bezeichnet die Menge der zulässigen Steuerungen. Die Steuerungen werden durch Elemente eines geeigneten Funktionensystems (z. B. stückweise lineare Funktionen oder Splines) approximiert. Auf diese Weise wird das Optimalsteuerungsproblem in ein endlich- (aber i. a. sehr hoch-) dimensionales nichtlineares Optimierungsproblem überführt.

Im Berichtszeitraum wurden folgende Probleme bearbeitet.

Weiterentwicklung des Simulators. Bei der Gewinnung zuverlässiger Lösungen für den Optimierungsprozeß muß der Simulator auch unter extremen Bedingungen (ungünstige Fahrweisen der Destillationsanlage) arbeiten. In enger Zusammenarbeit mit dem Kooperationspartner konnte die Robustheit des Simulators entscheidend verbessert werden.

Black-box-Optimierung produktionsrelevanter Batchprozesse. Unter Verwendung produktionsrelevanter Daten des Kooperationspartners wurden durch direkte Kombination des Simulators mit einem SQP-Optimierungsalgorithmus Vorschläge zur Verbesserung der Prozeßsteuerung erarbeitet (siehe Abb. 1). Gleichzeitig ergaben sich Hinweise zur Verbesserung des Simulators.

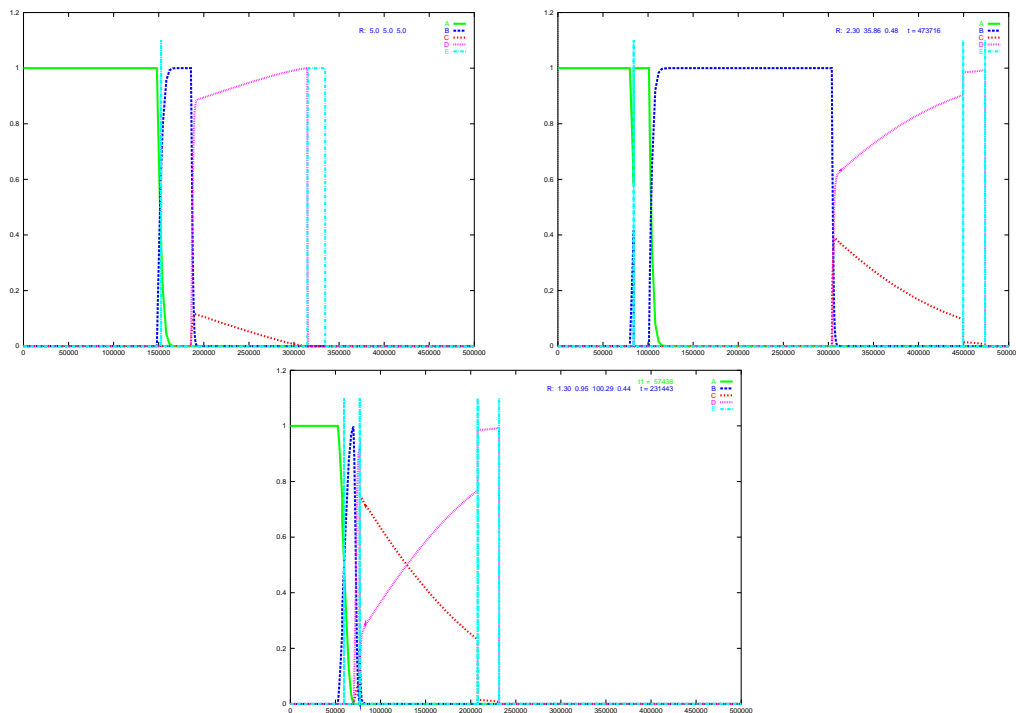


Abb. 1: Separation der Komponenten A und D aus einem 5-Komponenten-Gemisch, Konzentrationsprofile am Kolonnenkopf.

- Original-Szenario, Reinheitsbedingung für D nicht erfüllbar;
- Original-Szenario mit optimierten Umschaltzeiten und Rücklaufverhältnissen, Mengen- und Reinheitsbedingungen für A und D erfüllt;
- vorgeschlagene Modifikation des Szenarios, optimiert, bringt Reduzierung der Gesamt-Destillationszeit auf weniger als 49% im Vergleich zu b)

Optimierung von Batch-Destillation mit Recycling. Falls die Abfallprodukte einer Batch-Destillation dem Rohmaterial der folgenden Charge hinzugefügt werden, spricht man von Recycling. Unter Verwendung der Black-Box-Optimierung konnten für eine optimale Fahrweise von unstetiger Destillation mit Recycling erste Resultate gewonnen werden.

Interne Differentiation. Bisher wurden die benötigten Gradienten für die Optimierung numerisch approximiert. Dadurch wird die Leistungsfähigkeit der SQP-Verfahren begrenzt. Zur analytischen Berechnung der Gradienten des diskretisierten Systems wird zu (1) das entsprechende lineare Variationssystem bezüglich der Steuerung u hinzugefügt und synchron behandelt (Verfahren der internen Differentiation).

$$\begin{aligned} \frac{dx_u^{(1)}}{dt} &= \frac{\partial f_1}{\partial x^{(1)}}(x^{(1)}, x^{(2)}, u)x_u^{(1)} + \frac{\partial f_1}{\partial x^{(2)}}(x^{(1)}, x^{(2)}, u)x_u^{(2)} + \frac{\partial f_1}{\partial u}(x^{(1)}, x^{(2)}, u), \\ 0 &= \frac{\partial f_2}{\partial x^{(1)}}(x^{(1)}, x^{(2)}, u)x_u^{(1)} + \frac{\partial f_2}{\partial x^{(2)}}(x^{(1)}, x^{(2)}, u)x_u^{(2)} + \frac{\partial f_2}{\partial u}(x^{(1)}, x^{(2)}, u). \end{aligned}$$

Hydrodynamische Probleme

Bearbeiter: F. Guyard, R. Lauterbach, D. Peterhof, B. Sandstede

Kooperation: P. Chossat (INLN, Nizza), B. Fiedler, A. Scheel, C. Wulff (FU Berlin)

Förderung: DFG-Schwerpunktprogramm „Strukturbildung in dissipativen Systemen: Experiment und Theorie im quantitativen Vergleich“

DFG-Schwerpunktprogramm „Dynamik: Analysis, effiziente Simulation und Ergodentheorie“

Feodor-Lynen Stipendium der Alexander von Humboldt-Stiftung

DAAD: Procopé

Fragestellungen in Meteorologie, Geophysik und in vielen anderen Bereichen führen auf hydrodynamische Probleme. Aus der Sicht der Theorie dynamischer Systeme lassen sich diese erfolgreich behandeln, wenn eine Reduktion auf einfachere Gleichungen die wesentlichen Informationen über das Systemverhalten erhält. Die erzielten Ergebnisse sind dann auf große Klassen von Problemstellungen anzuwenden. Für diese Form der Untersuchungen spielen spezielle Strukturen in der Gleichung oft eine wichtige Rolle, nicht zuletzt stellen Symmetrieüberlegungen oft eine ganze Bandbreite mathematischer Methoden zur Verfügung.

1.) Polumkehr

Aus der Magnetisierung von Gesteinsproben kann man schließen, daß das Erdmagnetfeld in Zeitskalen von 10^4 Jahren seine Orientierung ändert. Nach einer langen Zeit stabiler Orientierung gibt es eine vergleichsweise kurze Phase mit sehr komplizierten Strukturen, auf die dann wieder eine lange Phase konstanter Orientierung folgt, allerdings mit vertauschten Polen. Ein Zugang erklärt den sogenannten Geodynamo mit einer Konvektionsbewegung geladener Flüssigkeiten in einer Schicht des Erdkernes. Eine mathematische Beschreibung erfolgt mit den Magnetohydrodynamischen Gleichungen. Ein mathematisches Objekt, das qualitativ in der Lage ist, die obengenannten Orientierungswechsel des Erdmagnetfeldes zu beschreiben, sind sogenannte heterokline Zyklen, deren Existenz (oft) zur Folge hat, daß es Anfangswerte gibt, für die die Lösung wieder in eine Umgebung des Ausgangspunktes zurückkehrt. Solche sogenannten rekurrenten Strukturen sind typisch für das Auftreten komplizierten dynamischen Verhaltens. Daraus ergibt sich die natürliche Frage, ob es in dem System, das die Bewegung der Flüssigkeit modelliert, solche heteroklinen Zyklen gibt. In diesem Fall führen die genannten Reduktionen auf gewöhnliche Differentialgleichungen in Darstellungsräumen der Gruppe $O(3)$. Für solche Gleichungen ist bekannt, daß zumindest in der Nähe der Instabilität der reinen Wärmeleitungslösung für Räume mit irreduziblen Darstellungen keine heteroklinen Zyklen existieren [6]. Solche Räume mit irreduziblen Darstellungen wären aber die natürlichen Räume für diese Untersuchungen. Jedoch führen die Parameterwerte, die man für das Beispiel der Erde für gegeben ansieht, auf eine Darstellung einer Interaktion der $\ell = 1$ und $\ell = 2$ -Moden (Kugelflächenfunktionen erster und zweiter Ordnung). Im nichtrotierenden Fall haben Chossat und Armbruster [4] die Existenz heterokliner Zyklen in dieser Darstellung für gewisse Parameterwerte nachgewiesen. Dieser Zyklus ist allerdings nicht stabil gegenüber Störungen, die die Symmetrie des Problems brechen (Rotation). Methoden zur Untersuchung solcher Probleme mit erzwungener Symmetriebrechung gehen auf [9] zurück. Die dort begonnenen Arbeiten wurden innermathematisch in [7, 8] ausgebaut. Diese Klassifizierung zeigt, daß der aus [9] bekannte Weg, heterokline Zyklen im Fall gebrochener Symmetrien zu konstruieren, für eine Erklärung des Verhaltens des Erdmagnetfeldes nicht geeignet ist. Ideen, die eine Fortentwicklung der

Arbeiten von Chossat und Armbruster und von Lauterbach und Roberts sind, erlauben (unter vereinfachenden Annahmen) in der $\ell = 1 - \ell = 2$ -Modeninteraktion mit Rotation die Existenz stabiler heterokliner Zykel zu zeigen [5].

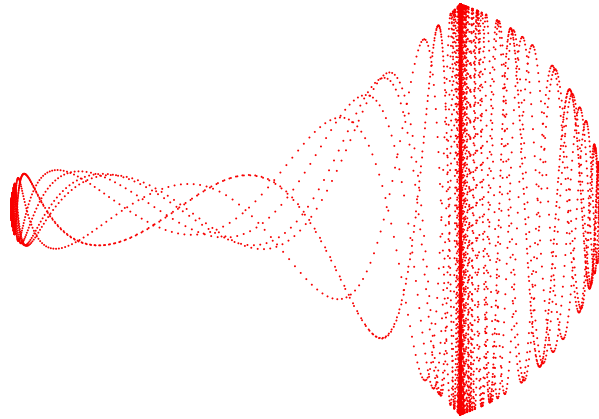


Abb. 1: Das Bild zeigt die zweidimensionale Projektion einer Trajektorie in der Nähe des heteroklinen Zyklus für die rotierende Kugelschale. Die meiste Zeit verbringt die Lösung nahe den Punkten links und rechts. Das komplizierte Verhalten entspricht sehr kurzen Zeiträumen.

Physikalisch bedeutungsvoll wären solche Zykel vor allem dann, wenn die im Zyklus enthaltenen (relativen) Ruhelagen rein einmodig ($\ell = 1$) wären. In unseren bisherigen Untersuchungen konnten wir heterokline Zykel und deren Stabilität nur nachweisen, wenn einmodige $\ell = 2$ -Gleichgewichtslagen auftreten. Unsere Untersuchungen deuten auf die Existenz von Zyklen mit einmodigen $\ell = 1$ Gleichgewichten hin. Allerdings konnten dafür noch nicht alle Beweisschritte durchgeführt werden. Die Probleme liegen in der hohen Dimension des Parameterraumes und der damit verbundenen Degeneriertheit des relevanten Verzweigungsproblems. Wir vermuten jedoch, daß diese Zykel in der Nähe der von uns beschriebenen Zykel gefunden werden können.

2.) Sphärisches Bénardproblem

In den bisher genannten Untersuchungen spielten Betrachtungen eines Strömungsfeldes in einer Kugelschale eine große Rolle. Im Fall der Polumkehr interessieren wir uns allerdings für ein Radienverhältnis $\rho = R_i/R_o \ll 1$. Die Fälle $\rho \approx 1$ sind für Klimamodelle und atmosphärische Vorgänge bedeutungsvoll. Allerdings kann man dieses Problem nicht auf eine endlichdimensionale Dynamik reduzieren [10]. Vielmehr muß man im Limes $\rho \rightarrow 1$ partielle Differentialgleichungen als Grenzgleichungen betrachten. Für den Fall der reinen Navier-Stokes Gleichungen wird die Dynamik für große Anfangsbedingungen und Anregungen näherungsweise durch die Navier-Stokes Gleichung auf der Kugeloberfläche beschrieben.

3.) Dynamik von Spiralwellen

Spiralwellen treten in den verschiedensten chemischen und physikalischen Systemen auf. Experimentell sind diese raum-zeitlichen Muster unter anderem in der Belousov-Zhabotinsky Reaktion, bei der Katalyse an Platinoberflächen und in der Rayleigh-Bénard Konvektion beobachtet worden. Sowohl in den Experimenten wie auch in numerischen Simulationen findet man spontane Verzweigungen von starr-rotierenden zu mäandernden Spiralwellen. Im Resonanzfall verzweigen driftende Wellen. Mathematisch werden derartige Systeme durch Reaktions-Diffusionssysteme

$$u_t = D\Delta u + f(u, \mu), \quad x \in \mathbb{R}^2, u \in \mathbb{R}^m, \quad (1)$$

in der Ebene modelliert. Der Vektor u ist dann typischerweise durch die Konzentrationen der

chemischen Spezies gegeben. Gleichung (1) ist äquivariant unter der euklidischen Gruppe $SE(2)$ der Translationen und Rotationen. In [2] und [3] haben wir die Dynamik in der Nähe von Verzweigungspunkten auf endlich-dimensionale Zentrumsmannigfaltigkeiten reduziert. Dies ist nicht-trivial, da die Gruppe $SE(2)$ nicht kompakt ist und auf den relevanten Funktionenräumen nicht norm-stetig operiert. In einigen Fällen ist die Gruppenaktion sogar unstetig. Die Gleichungen auf der Zentrumsmannigfaltigkeit besitzen eine zusätzliche Struktur, die in [1] geklärt wurde. In der letztgenannten Arbeit wurden darüber hinaus Bedingungen für das Driften und Mäandern von Wellen hergeleitet. Diese Kriterien sind numerisch leicht berechenbar. Damit konnten wir die oben beschriebenen Phänomene durch Hopf-Verzweigungen erklären. In einer weiteren geplanten Arbeit wollen wir diese Techniken auf sekundäre Bifurkationen zu Tori mit drei Frequenzen anwenden, die ebenfalls experimentell beobachtet worden sind.

Literatur

1. B. FIEDLER, B. SANDSTEDTE, A. SCHEEL, C. WULFF, *Bifurcations from relative equilibria of non-compact group actions: Skew products, meanders, and drifts*, DFG-Schwerpunktreihe, Preprint No. 55/96 (1996); Doc. Math. J. DMV, **1** (1996), pp. 479–505.
2. B. SANDSTEDTE, A. SCHEEL, C. WULFF, *Center-manifold reduction for spiral waves*, erscheint in: C. R. Acad. Sci. Ser. I.
3. B. SANDSTEDTE, A. SCHEEL, C. WULFF, *Dynamics of spiral waves on unbounded domains using center-manifold reductions*, WIAS-Preprint No. 288, Berlin 1996.
4. D. ARMBRUSTER, P. CHOSSAT, *Heteroclinic cycles in a spherically invariant system*, Physica 50D (1991), pp. 155–176.
5. P. CHOSSAT, F. GUYARD, R. LAUTERBACH, *Generalized heteroclinic cycles in spherically invariant systems and their perturbations*, WIAS-Preprint No. 303, Berlin 1996.
6. P. CHOSSAT, R. LAUTERBACH, I. MELBOURNE, *Steady-state bifurcation with $O(3)$ -symmetry*, Arch. Rat. Mech. Anal., **113** (4) (1991), pp. 313–376.
7. F. GUYARD, R. LAUTERBACH, *Forced symmetry breaking perturbations for periodic solutions*, erscheint in: Nonlinearity.
8. R. LAUTERBACH, S. MAIER, E. REISSNER, *A systematic study of heteroclinic cycles in dynamical systems with broken symmetries*, Proc. Roy. Soc., Edinburgh, 126A (1996), pp. 885–909.
9. R. LAUTERBACH, M. ROBERTS, *Heteroclinic cycles in dynamical systems with broken spherical symmetry*, J. Diff. Equat., **100** (1992), pp. 428–448.
10. D. PETERHOF, *Hydrodynamische Probleme im dünnen Kugelspalt*, Dissertation, Freie Universität Berlin, 1996.

Singulär gestörte Systeme mit Gleitzuständen

Bearbeiter: R. J. Rumpel, K. R. Schneider

Kooperation: L. M. Fridman (Samara Architecture and Building Academy, Rußland), F. Altpeter (École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Schweiz), B. Michaeli (Universität Köln)

Viele dynamische Prozesse lassen sich als Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen mit Unstetigkeitsflächen modellieren. Die Unstetigkeiten können z. B. von der Steuerung (Relais) oder von mechanischen Kräften (trockene Reibung) herrühren. In solchen Systemen kann es zu Gleitbewegungen kommen, d. h. einem zeitweisen Verlauf der Trajektorie längs der Unstetigkeitsfläche. Diese Gleitzustände können mit der *Methode der äquivalenten Steuerung* von V. I. Utkin geeignet modelliert werden. Das Ziel der Untersuchungen bestand in der Übertragung von analytischen Methoden für glatte dynamische Systeme auf Systeme mit Gleitzuständen [4], wobei die bisher wenig untersuchten **singulär gestörten Systeme mit Gleitzuständen (SGG-Systeme)** im Mittelpunkt standen:

$$\begin{aligned}\mu \frac{dz}{dt} &= F(z, y, \sigma, s, u) \\ \frac{dy}{dt} &= f_1(z, y, \sigma, s, u) \\ \frac{d\sigma}{dt} &= f_2(z, y, \sigma, s, u) \\ \frac{ds}{dt} &= h(z, y, \sigma, s, u)\end{aligned}\tag{1}$$

mit

- $z \in \mathbb{R}^m$: „schnelle“ Variablen
- $(y, \sigma, s) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}$: „langsame“ Variablen, wobei
- $u = \text{sgn}(s)$, also $s = 0$ die Unstetigkeitsfläche und
- σ den Rand des Gleitgebiets beschreibt.

In [2] liegen Ergebnisse zur asymptotischen Entwicklung der Trajektorien des nichtdegenerierten Systems (1) vor, die auf der *Randschichtmethode* von A. B. Vasileva basieren. Die Dimension des Systems (1) läßt sich auf zwei verschiedene Möglichkeiten reduzieren:

a) durch Übergang zum reduzierten System ($\mu = 0$),
 b) durch Beschränkung auf die Dynamik im Gleitgebiet $D_{sli} \subset \{s = 0\}$ (äquivalente Steuerung). Die reduzierten Systeme wurden benutzt, um für SGG-System (1) Kriterien für Existenz, Stabilität und Persistenz periodischer Orbits herzuleiten. Sie beruhen auf Eigenschaften der Trajektorien an den Übergangsstellen zum und vom Gleitzustand, an denen die Lösungen nicht glatt sind. Zentrales Hilfsmittel ist die Einführung geeigneter Punktabbildungen vom Poincaréschen Typ auf dem Rand des Gleitgebiets.

Die Ergebnisse wurden auf ein SGG-System angewendet, das ein Doppelpendel mit linearer Kopplung beschreibt, bei dem das Pendel mit Masse m_1 auf einer gleichmäßig rotierenden Drehscheibe mit Neigungswinkel α aufliegt. Die Masse m_2 des anderen Pendels spielt die Rolle des kleinen Parameters μ .

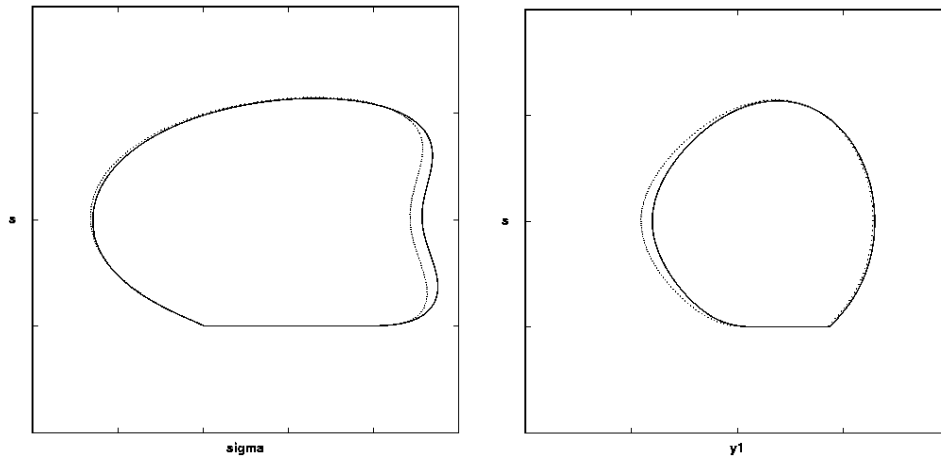


Abb. 1: Projektionen der periodischen Orbits des reduzierten Systems (gepunktet) und des nichtdegenerierten Systems (durchgezogen) mit $\mu = 0.05$

Dieses SGG-System läßt sich mit kleinen Modifikationen als Roboterarm mit Störmasse interpretieren. Es erfüllt die Voraussetzungen der gefundenen Theoreme. Die Persistenz des stabilen periodischen Orbits ist in der Abbildung dokumentiert.

In der letzten Zeit wurde die Anwendbarkeit dieser Untersuchungen auf mechatronische SGG-Systeme mit mehreren Freiheitsgraden, insbesondere CNC-Maschinen [1], geprüft. Von technischer Relevanz ist die Betrachtung von Verbindungswellen, die in der Realität nie ganz starr sind. Als kleiner Parameter fungiert der Kehrwert der Steifigkeit. Es wurde nicht nur das klassische statische Reibmodell, sondern auch ein neuartiges **dynamisches Reibmodell** (*Canudas de Wit et al., 1995*) berücksichtigt. Dieses umfaßt sowohl die Geschwindigkeitsabhängigkeit (Stribeck-Effekt) als auch die Auslenkungsabhängigkeit (Dahl-Effekt / Auslenkungshysterese) der Reibung. Es wurden Simulationen zum Vergleich von dynamischem und statischem Reibmodell durchgeführt, die bestätigen, daß das statische Modell als Grenzfall des dynamischen Modells betrachtet werden kann.

Literatur

1. F. ALTPETER, B. MICHAELI, R. J. RUMPEL, *Analyse der Dynamik einer automatisch gesteuerten Werkzeugmaschine mit dynamischer Reibung*, WIAS-Preprint, in Vorbereitung.
2. L. M. FRIDMAN, R. J. RUMPEL, *On the asymptotic analysis of singularly perturbed systems with sliding mode*, WIAS-Preprint No. 246, Berlin 1996.
3. R. J. RUMPEL, *On the qualitative behaviour of nonlinear oscillators with dry friction*, ZAMM, **76** (1996), S2, pp. 665-666.
4. R. J. RUMPEL, *Über periodische Lösungen von singular gestörten Differentialgleichungssystemen mit Gleitzuständen*, Dissertationsschrift, wird demnächst eingereicht.

Beulzustände in mechanischen Strukturen

Bearbeiter: D. Peterhof, B. Sandstede

Kooperation: A. Scheel (Institut für Mathematik I, FU Berlin)

Förderung: Feodor-Lynen Stipendium der Alexander von Humboldt-Stiftung

Die Gleichung

$$u_{tt} + u_{xxxx} + Pu_{xx} + u - u^2 = 0, \quad x \in \mathbb{R},$$

beschreibt Beulzustände von unendlich ausgedehnten Stäben, die auf einem abstoßenden elastischen Untergrund aufliegen. Die aufgetragene axiale Last ist dabei durch den Parameter P gegeben. In dieser Gleichung wurden von [Buffoni, Champneys, Toland] ein primärer und unendlich viele sekundäre lokalisierte Beulzustände mit endlicher Energie gefunden. Die sekundären Zustände bestehen aus mehreren, weit voneinander entfernten Kopien des primären Zustands. In [2] wurde die Stabilität dieser Beulzustände untersucht. Das Ergebnis hängt von der Belastungsart ab. Wird eine konstante Last aufgetragen (dead loading), so ist der primäre Beulzustand instabil. Falls dagegen die Verschiebung vorgegeben wird (rigid loading), so wird der primäre Zustand für kleine resultierende Lasten stabilisiert. Realistischer sind Modelle, die auf unendlichen Zylindern definiert sind und den Querschnitt berücksichtigen. Beulzustände lösen dann eine elliptische Differentialgleichung der Form

$$u_{xxxx} + u_{yyyy} = f(u, \nabla u, \Delta u), \quad (x, y) \in \mathbb{R} \times \Omega. \quad (1)$$

Mitte der achtziger Jahre wurden Algorithmen zur numerischen Berechnung von lokalisierten Gleichgewichten dieser Gleichungen entwickelt. Bisher gibt es aber weder Konvergenz- noch Stabilitätsbeweise. Ebenso ist nicht bekannt, wie man Verzweigungen von sekundären Beulzuständen analysieren kann. In [1] haben wir begonnen, diese Probleme zu lösen. Die grundlegende Schwierigkeit ist, daß (1) schlecht gestellt ist! Wir konnten beweisen, daß der Funktionenraum so in zwei Komponenten zerlegt werden kann, daß die in einem primären Zustand linearisierten Gleichungen vorwärts bzw. rückwärts in der ersten bzw. zweiten Komponente gelöst werden können. Wir hoffen, damit in weiteren Arbeiten Verzweigungen von sekundären Zuständen behandeln sowie Fehlerabschätzungen für numerische Algorithmen geben zu können.

Literatur

1. D. PETERHOF, B. SANDSTED, A. SCHEEL, *Exponential dichotomies for solitary waves of semilinear elliptic equations on infinite cylinders*, WIAS-Preprint No. 266, Berlin 1996; erscheint in: J. Diff. Equat.
2. B. SANDSTED, *Instability of localised buckling modes in a one-dimensional strut model*, WIAS-Preprint No. 247, Berlin 1996.

Stabilitätswechsel in Systemen mit mehreren Zeitskalen

Bearbeiter: K. R. Schneider

Kooperation: Karmeshu (Jawaharlal Nehru University, New Delhi, Indien), N. N. Nefedov (Staatliche Universität Moskau, Rußland), A. Schuppert (Hoechst AG, Frankfurt/M.)

Die mathematische Modellierung zahlreicher Prozesse in der Biochemie und in anderen Gebieten der Naturwissenschaften führt auf Differentialgleichungssysteme mit mehreren Zeitskalen. Wir beschränken uns auf singular gestörte Systeme der Gestalt

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

mit $x \in R^m, y \in R^n$. Häufig ist die Dimension der schnellen Variablen y sehr groß ($n \gg 1$), so daß nach einer adäquaten Dimensionsreduktion gesucht wird, um qualitative Untersuchungen bzw. online-fähige Berechnungen durchführen zu können. Unter bestimmten Voraussetzungen ist die Quasistationaritätsannahme dafür ein probates Mittel. In den Fällen, wo diese Annahme nicht gerechtfertigt werden kann, liegt entweder ein Schnitt von Gleichgewichtsmannigfaltigkeiten des zu (1) gehörenden assoziierten Systems

$$\frac{dy}{d\tau} = g(x, y, t, 0)$$

vor, was mit einer Änderung des Stabilitätsverhaltens dieser Mannigfaltigkeiten verbunden ist, oder die Jacobi-Matrix von (1) wird in Unterräumen singular. Im Berichtszeitraum wurde der Fall der Stabilitätsänderung weiter untersucht. Das grundlegende Problem besteht darin, ob eine Lösung sofort der neuen stabilen Mannigfaltigkeit folgt oder sich erst für einige Zeit nahe der alten, aber nunmehr instabil gewordenen Mannigfaltigkeit aufhält und dann in Richtung der stabilen Mannigfaltigkeit springt. Unter Verwendung der Technik der Ober- und Unterlösungen konnten neue Bedingungen für einen unmittelbaren Stabilitätswechsel abgeleitet werden. Für den Fall des verzögerten Stabilitätswechsels konnte mit derselben Technik bei skalaren nichtautonomen singular gestörten Differentialgleichungen die asymptotische Verzögerungszeit bestimmt werden. Die Resultate über einen verzögerten Stabilitätsaustausch können mit zeitabhängigen Modellreduktionen bei singular gestörten Systemen in Zusammenhang gebracht werden. Sie wurden ebenfalls zur Erklärung von verzögerten Sprüngen der Populationsdichte (unter Einschluß des Allee-Effektes) in der modifizierten logistischen Wachstumsgleichung verwendet. Weiterhin besteht ein Zusammenhang zu verzögerten Bifurkationen bei Systemen mit einem langsam veränderlichen Bifurkationsparameter. Diese Beziehung wurde genutzt, um eine neue Klasse von Relaxationsschwingungen zu begründen. Die Untersuchungen zu diesem Problemkreis sollen im Blick auf höherdimensionale Systeme fortgesetzt werden.

Literatur

1. K. R. SCHNEIDER, N. N. NEFEDOV, *Delayed exchange of stabilities in singularly perturbed systems*, WIAS-Preprint No. 270, Berlin 1996.
2. K. R. SCHNEIDER, KARMESHU, *Delayed jump behavior in population growth with slowly varying carrying capacity*, in Vorbereitung.
3. K. R. SCHNEIDER, *A new class of relaxation oscillations*, in Vorbereitung.

4.3 Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen

4.3.1 Zusammenfassung

Die Forschungsgruppe hat ihre für einen längeren Zeitraum konzipierten Forschungen zu den Schwerpunkten Numerische Verfahren für Systeme von Algebra-Differentialgleichungen und Numerische Verfahren für partielle Differentialgleichungen, die in Verbindung mit der Behandlung anspruchsvoller Anwendungsaufgaben bearbeitet werden, fortgesetzt. Es werden Anwendungsprobleme eigenständig und in Zusammenarbeit mit anderen Forschungsgruppen behandelt. Die Arbeiten zur Entwicklung und Implementation nutzerorientierter Softwarepakete, zur Entwicklung benutzerfreundlicher Oberflächen und zu Fragen der Visualisierung, die alle von zentraler Bedeutung für das Institut sind, wurden konsequent weitergeführt.

Numerische Verfahren für Systeme von Algebra-Differentialgleichungen wurden für die dynamische Simulation von physikalisch-chemischen Prozessen in komplexen chemischen Produktionsanlagen entwickelt und auf modernen Rechnerarchitekturen implementiert. Die für die nichtlinearen Gleichungen entwickelten parallelen strukturierten Newton-Verfahren zeigten bei Testrechnungen an großen Beispielen der Bayer AG bemerkenswerte Beschleunigungsfaktoren. Der lineare Solver wurde mit dem Simulator SPEEDUP an vielen Aufgabenstellungen der chemischen Industrie erprobt. Benchmark-Tests zeigten die Vorteile unserer Verfahren.

Für den Entwurf von Schaltungen im Mikrowellen- und Millimeterwellenbereich, speziell in monolithisch integrierter Form, wurden für eine dreidimensionale elektromagnetische Simulation im Frequenzbereich angepaßte numerische Methoden entwickelt. Aufgrund erheblicher Speicherplatz- und Rechenzeiteinsparungen gegenüber bisherigen im Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik Berlin (FBH) eingesetzten Tools können jetzt komplexere Schaltungen simuliert werden. Die Klasse der behandelbaren Aufgaben wurde durch die numerische Behandlung von Modellerweiterungen vergrößert.

Die Arbeiten zur numerischen Simulation von Transportprozessen in porösen Medien wurden weitergeführt. Es liegt jetzt ein Prototyp für ein Anwenderprogramm vor, welcher u. a. auf der HANNOVER-MESSE vorgestellt wurde. Damit können in 1, 2 oder 3 Raumdimensionen auf unstrukturierten Netzen nichtlineare Fließprozesse in porösen Medien berechnet werden. Die Zusammenarbeit mit der WASY GmbH hat sich weiterentwickelt. Es wurden Arbeiten auf dem Gebiet der Parameteridentifikation und der adaptiven Lösungsverfahren ausgeführt.

Eine institutsübergreifende Rolle spielen das Projekt „Entwicklung von Algorithmen und Softwarekomponenten für die numerische Lösung von partiellen Differentialgleichungen“ und die Arbeiten zur Visualisierung. Hier wurden im Berichtszeitraum weitere Schritte zur Integration der Forschungsgruppe in die Gesamtstrategie des Instituts unternommen. Die Toolbox *pdelib* wurde im Institut verfügbar gemacht. Es wurden mehrere gemeinsame Projekte mit anderen Forschungsgruppen in Angriff genommen.

4.3.2 Projekte

Numerische Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen

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

Kooperation: F. Hubbuch (Bayer AG Leverkusen), R. Zeller (Cray Research GmbH a Silicon Graphics Company, München), T. Garratt, St. Zitney (AspenTech UK Ltd, Cambridge, UK), U. Nowak (Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik, Berlin), G. Wozny (Institut für Prozeß- und Anlagentechnik, TU Berlin), R. Lamour (Institut für Mathematik, HU Berlin)

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

Bei der Prozeßsimulation von komplexen chemischen Anlagen, z. B. von wärme- und stromverkoppelten Destillationsanlagen (siehe Abb. 1), werden zunächst die einzelnen Komponenten der Anlage, wie z. B. Böden von Destillationskolonnen, Verdampfer oder Pumpen, modelliert. Durch Vernetzung der Komponenten (flowsheeting) wird dann die Modellierung von Teilanlagen und schließlich durch Vernetzung der Teilanlagen die Modellierung der Gesamtanlage vorgenommen.

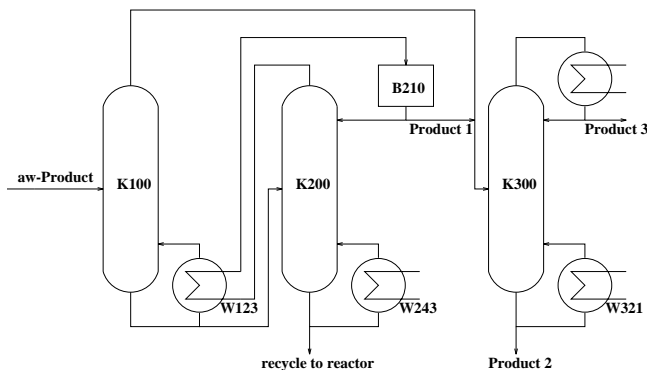


Abb. 1: Flowsheet einer wärme- und stromverkoppelten Destillationsanlage

Die mathematische Modellierung der dynamischen Prozesse sowohl in den Teilanlagen als auch in der Gesamtanlage führt zumeist auf Anfangswertprobleme für Systeme von Algebra-Differentialgleichungen

$$F(t, y(t), \dot{y}(t), u(t)) = 0, \quad y(0) = y_0 \quad (1)$$

$$F : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^n.$$

Dabei bezeichnet y den Vektor der Unbekannten und u den Vektor der stückweise stetigen Parameterfunktionen. Das System (1) ist numerisch steif und hat durch geeignete Modellierung den Index 1. Es ist entsprechend der Modellierung über Anlagenkomponenten hierarchisch in Teilsysteme strukturiert und kann bei Gesamtanlagen bis zu 100 000 Gleichungen umfassen. Die von uns entwickelten und auf Parallelrechnern implementierten numerischen Verfahren nutzen diese Struktureigenschaften aus. Dabei werden Parallelisierungen auf den Niveaus der Differentialgleichungen, der nichtlinearen und der linearen Gleichungen betrachtet.

Auf dem Niveau der Differentialgleichungen wurden Block-Waveform-Iterationsverfahren untersucht. Für semiexplizite DAE-Systeme vom Index 1 konnte die Konvergenz kontinuierlicher

Block-Waveform-Iterationsverfahren bewiesen werden [4]. Es wurde gezeigt, daß unter einschränkenden Annahmen bei der Modellierung von Destillationskolonnen solche DAE-Systeme entstehen. Die Konvergenzbedingungen sind erfüllt, falls die DAE-Systeme entsprechend [4] in Blöcke partitioniert werden.

Auf dem Niveau der nichtlinearen Gleichungen wurden Block-strukturierte Newton-artige Verfahren entwickelt, die keine einschränkenden Modellannahmen erfordern. Nach dem geeigneten Zusammenfassen von Teilsystemen zu Blöcken erreicht man durch Erweiterung des in jedem Diskretisierungszeitpunkt entstehenden nichtlinearen Gleichungssystems eine formale Entkopplung der Blocksysteme bez. ihrer Variablen, wodurch deren parallele Lösung ermöglicht wird. Die Kopplung der Blocksysteme wird über ein zusätzlich erzeugtes und sequentiell zu lösendes Hauptsystem realisiert. Ein einstufiges Verfahren wurde auf einem moderat parallelen Rechner, einer Cray J90, implementiert. Es zeichnet sich durch effektive grobgranulare Parallelität mit sehr geringem Overhead und durch numerische Stabilität aus.

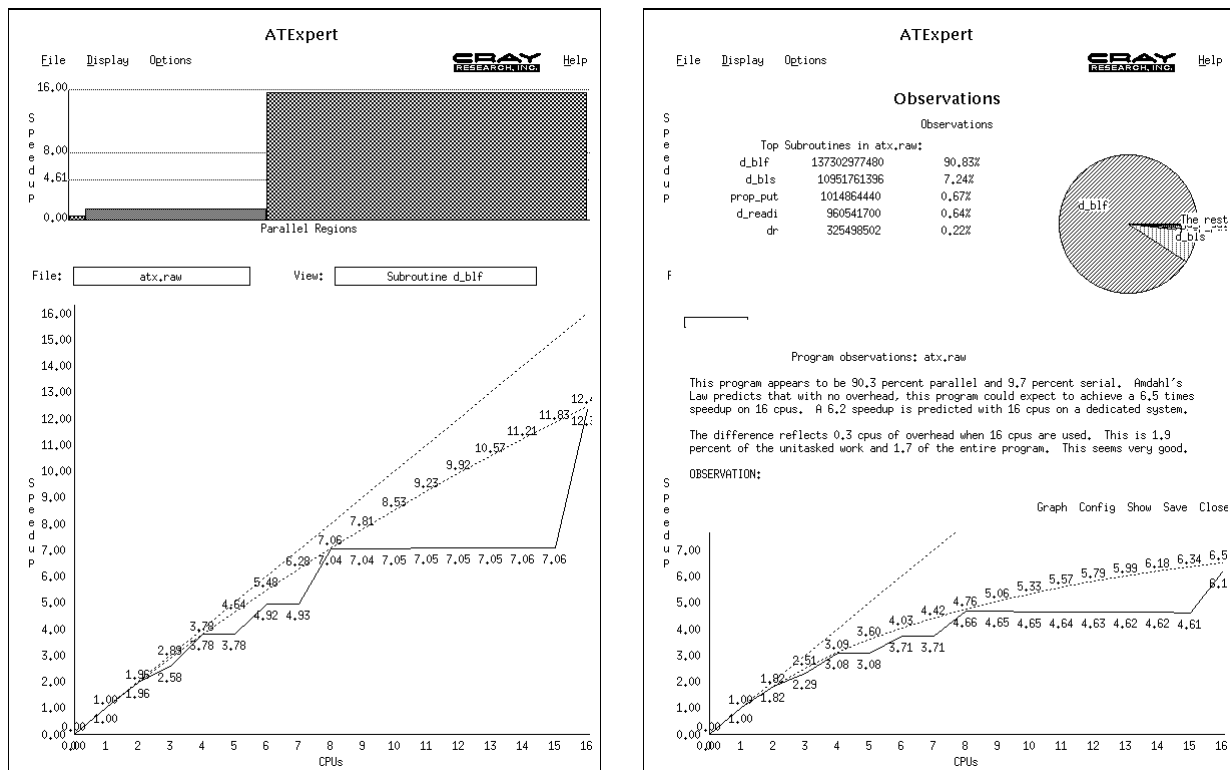


Abb. 2: Performance Analyse für die dynamische Simulation einer Destillationsanlage unter Verwendung parallelisierter Block-strukturierter Newton-Verfahren

Es wurden Testrechnungen an verschiedenen großen Beispielen der Bayer AG durchgeführt. Dabei konnten für das parallele strukturierte Newton-Verfahren bei der Verwendung von 16 Prozessoren Beschleunigungsfaktoren zwischen 9 und 12 ermittelt werden. Es ist dadurch gelungen, die Verweilzeit für die gesamte dynamische Simulation auf unter 30 % zu reduzieren. Die Abb. 2 zeigt eine Performance Analyse für den WIAS-Testsimulator bei der Simulation einer Destillationsanlage, bei der das DAE-System mit ca. 20 000 Gleichungen unter Bildung

von 16 Gleichungsblöcken gelöst wurde. Für das Block-strukturierte Newton-Verfahren ergibt sich hier ein maximaler Beschleunigungsfaktor von 12.3 (Abb. 2, links) und damit für die gesamte dynamische Simulation ein Beschleunigungsfaktor von 6.2 (Abb. 2, rechts).

Zur Berechnung konsistenter Anfangswerte wurde das Suchverfahren für Startwerte durch eine Adaption von Verfahren von R. Lamour erweitert, die auf Arbeiten zu überführbaren DAE's basieren.

Bei den linearen Systemen mit schwach besetzten Matrizen wird mit einem Pseudocode gearbeitet, um die Möglichkeiten von Supercomputern auszunutzen. Die Verfahren wurden im Simulator SPEEDUP an vielen industrierelevanten Beispielen für Vektorrechner und Parallelrechner mit shared bzw. distributed Memory erprobt und mit dem in SPEEDUP enthaltenen und auf der Frontal-Methode basierenden linearen Solver FAMP verglichen. Hierbei ging auf einem Vektorcomputer die CPU-Zeit für eine gesamte Simulation auf 63 % zurück. Mit einem großen Beispiel der Bayer AG wurden auf dedizierten Supercomputern in den USA Benchmark-Tests durchgeführt. Es zeigte sich eine deutliche Überlegenheit unserer Methoden. Durch die Nutzung eines Parallelcomputers für den linearen Solver zusammen mit einem Vektorcomputer für die anderen Verfahren in SPEEDUP gelang nach Aussage unseres Partners weltweit eine der ersten industriellen Applikationen auf diesen Computern.

Die Methoden zur automatischen Erzeugung einer Schnittstelle für den DAE-Solver wurden weiterentwickelt, neu organisiert und durch eine graphische Benutzeroberfläche erweitert. Damit können Schnittstellenroutinen generiert werden, die strikt teilsystemorientiert und ohne Overhead arbeiten. Dadurch gelang eine wesentliche Beschleunigung der Jacobi-Matrix-Berechnung. Der Interpretiercode zur Funktions- und Jacobi-Matrix-Berechnung ist so generierbar, daß er teilsystemorientiert auf die einzelnen Prozessoren eines MPP-Systems verteilt werden kann. Außerdem kann eine Schnittstelle zum DAE-Solver LIMEX erzeugt werden.

Die Arbeitsgruppe besitzt eine Autorisierung von Aspen Technology, Inc., Cambridge, USA, den Simulator SPEEDUP für fünf Jahre auf einem Cray-Rechner im ZIB für Forschungszwecke und für die Entwicklung und Erprobung numerischer Verfahren kostenlos zu nutzen. Diese Autorisierung haben nur noch wenige Universitäten in den USA.

Literatur

1. F. GRUND, J. BORCHARDT, D. HORN, T. MICHAEL, H. SANDMANN, *Differential-algebraic systems in the chemical process simulation*, Scientific Computing in Chemical Engineering (F. Keil, W. Mackens, H. Voss, J. Werther, eds.), Springer-Verlag, Berlin, 1996, pp. 68–74.
2. F. GRUND, T. MICHAEL, L. BRÜLL, F. HUBBUCH, R. ZELLER, J. BORCHARDT, D. HORN, H. SANDMANN, *Numerische Lösung großer strukturierter DAE-Systeme in der chemischen Prozeßsimulation*, Mathematik – Schlüsseltechnologie für die Zukunft (K.-H. Hoffmann, W. Jäger, Th. Lohmann, H. Schunck, eds.), Springer, Berlin, 1996, pp. 91–103.
3. D. HORN, *Entwicklung einer Schnittstelle für einen DAE-Solver in der chemischen Verfahrenstechnik*, Software Engineering im Scientific Computing (W. Mackens, S. M. Rump, eds.), Vieweg, Braunschweig, 1996, pp. 249–255.
4. T. MICHAEL, J. BORCHARDT, *Convergence criteria for waveform iteration methods applied to partitioned DAE systems in chemical process simulation*, WIAS-Preprint No. 262, Berlin 1996.

Numerische Lösung strukturierter DAE-Systeme

Bearbeiter: J. Borchardt, T. Michael

Kooperation: P. Rentrop (TH Darmstadt), G. Wozny (Institut für Prozeß- und Anlagentechnik, TU Berlin)

Die mathematische Modellierung chemischer Prozesse führt auf Anfangswertprobleme für große in Teilsysteme strukturierte Systeme von Algebra-Differentialgleichungen (DAE). Es werden semiexplizite DAE-Systeme vom Index 1

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= f(x_1, x_2, t) \\ 0 &= h(x_1, x_2, t) \\ x(t_0) &= x_0, \quad t \in [t_0, t_e] \end{aligned} \quad (1)$$

mit konsistenten Anfangswerten $x_0 = (x_{01}, x_{02})^T$ und Funktionen $f: \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^l \times [t_0, t_e] \rightarrow \mathbb{R}^k$, $h: \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^l \times [t_0, t_e] \rightarrow \mathbb{R}^l$ betrachtet. Zur Lösung von (1) mit Waveform-Relaxationsverfahren wird eine Partitionierung in r Teilprobleme jeweils vom Index 1 vorausgesetzt. Spezialfälle sind Block-Jacobi-Waveform-Relaxationsverfahren (BJWR)

$$\begin{aligned} \dot{x}_{1i}^k &= f_i(x_{11}^{k-1}, x_{21}^{k-1}, \dots, x_{1i-1}^{k-1}, x_{2i-1}^{k-1}, x_{1i}^k, x_{2i}^k, x_{1i+2}^{k-1}, x_{2i+2}^{k-1}, \dots, x_{1r}^{k-1}, x_{2r}^{k-1}, t) \\ 0 &= h_i(x_{11}^{k-1}, x_{21}^{k-1}, \dots, x_{1i-1}^{k-1}, x_{2i-1}^{k-1}, x_{1i}^k, x_{2i}^k, x_{1i+2}^{k-1}, x_{2i+2}^{k-1}, \dots, x_{1r}^{k-1}, x_{2r}^{k-1}, t) \\ (x_{1i}^k(t_0), x_{2i}^k(t_0))^T &= (x_{1i,0}, x_{2i,0}), \quad i = 1(1)r, \quad k = 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (2)$$

mit Startfunktionen $x_{1i}^0 \in C^1([t_a, t_e], \mathbb{R}^k)$, $x_{2i}^0 \in C^1([t_a, t_e], \mathbb{R}^l)$ und Block-Gauß-Seidel-Waveform-Relaxationsverfahren (BGSWR). Es konnte die Konvergenz der kontinuierlichen BJWR und BGSWR nachgewiesen werden [1].

Dafür wurde ein zu (2) äquivalentes Fixpunktproblem

$$\begin{bmatrix} x_{1i}^k(t) \\ x_{2i}^k(t) \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} x_{1i,0} + \int_{t_0}^t f_i(x^k(s), x^{k-1}(s), s) ds \\ g_i(x^k(t), x^{k-1}(t), t) \end{bmatrix}, \quad i = 1(1)r, \quad t \in [t_0, t_e]$$

formuliert, worauf bei globaler Lipschitzstetigkeit der f_i und g_i bez. x^k und x^{k-1} nach Konstruktion von speziellen Normen und Banach-Räumen der Banachsche Fixpunktsatz angewendet werden kann. Dabei ergibt sich für die Lipschitzkonstanten von g_i die Bedingung

$$\sum_{j=1}^r \left(g_{ix_{1j}^k} + g_{ix_{2j}^k} + g_{ix_{1j}^{k-1}} + g_{ix_{2j}^{k-1}} \right) < 1.$$

Eine vereinfachte Modellierung von Destillationskolonnen führt auf Probleme (1). Diese können entsprechend [1] in Teilprobleme vom Index 1 partitioniert werden, so daß die Lipschitzkonstanten von g_i der o.g. Bedingung genügen. Die Lipschitzkonstanten können mittels der Jacobi-Matrizen von h_i approximiert werden. Damit sind für diese Aufgaben konvergente Waveform-Relaxationsverfahren einsetzbar.

Literatur

1. T. MICHAEL, J. BORCHARDT, *Convergence criteria for waveform iteration methods applied to partitioned DAE systems in chemical process simulation*, WIAS-Preprint No. 262, Berlin 1996.

Elektromagnetische Simulation von monolithisch integrierten Höchsthfrequenzschaltungen

Bearbeiter: G. Hebermehl, R. Schlundt, H. Langmach

Kooperation: W. Heinrich, J. Gerdes, H. Zscheile (Ferdinand-Braun-Institut für Höchsthfrequenztechnik Berlin), K. Beilenhoff, H. Klingbeil (TH Darmstadt)

Die dreidimensionale elektromagnetische Simulation für den Entwurf von planaren Mikrowellen- und Millimeterwellenschaltungen stellt extreme Anforderungen an die räumliche Auflösung, da neben Details im Mikrometerbereich Kopplungseffekte mit charakteristischen Abmessungen von mehreren Millimetern erfaßt werden müssen. Um den numerischen Aufwand in Grenzen zu halten, ist äußerste Ökonomie bei der Wahl des Diskretisierungsgitters und der numerischen Verfahren geboten.

Monolithisch integrierte Höchsthfrequenzschaltungen werden in der Mobil- und Satellitenkommunikation, für intelligente Sensorsysteme und in der Kfz-Radartechnik benötigt.

Bisher vorhandene Entwurfswerkzeuge sind auf bestimmte Klassen von Schaltungen beschränkt oder erfordern einen hohen Rechen- und Speicherplatzaufwand, so daß lediglich die Analyse von Einzelementen oder von relativ kleinen Teilschaltungen durchgeführt werden kann.

Die Höchsthfrequenzschaltungen werden als Verbindung unendlich langer Wellenleiter, die longitudinal homogen sind, mit einer Diskontinuität (siehe Abb. 1) beschrieben [2, 1]. Transmissions- und Reflexionsverhalten der Schaltungen werden durch die Streumatrix wiedergespiegelt. Da die Simulationen nur für spezielle Frequenzen durchzuführen sind, wird die Aufgabe im Frequenzbereich behandelt. Die Streumatrix wird aus dem elektrischen Feld berechnet. Das elektromagnetische Feld wird durch die Lösung eines dreidimensionalen Randwertproblems für die Maxwell'schen Gleichungen mit Wellenleiter-Randbedingung gewonnen. Es wird von der Integralform der Maxwell'schen Gleichungen bei zeitharmonischer Erregung ausgegangen:

$$\oint_{\partial\Omega} \frac{1}{\tilde{\mu}\mu_0} \vec{B} \cdot d\vec{s} = \int_{\Omega} (j\omega\tilde{\epsilon}\epsilon_0\vec{E}) \cdot d\vec{\Omega}, \quad \oint_{\cup\Omega} (\tilde{\epsilon}\epsilon_0\vec{E}) \cdot d\vec{\Omega} = 0,$$

$$\oint_{\partial\Omega} \vec{E} \cdot d\vec{s} = \int_{\Omega} (-j\omega\vec{B}) \cdot d\vec{\Omega}, \quad \oint_{\cup\Omega} \vec{B} \cdot d\vec{\Omega} = 0.$$

Die Diskretisierung der Gleichungen erfolgt mit Hilfe einer Finite-Volumen-Methode unter Verwendung eines kartesischen Gitters mit variabler Schrittweite und führt auf sehr rechenzeit- und speicherplatzaufwendige, z. T. auch schlecht konditionierte Eigenwertprobleme für schwach besetzte nichtsymmetrische Matrizen und hochdimensionale lineare Gleichungssysteme mit schwach besetzten indefiniten symmetrischen Koeffizientenmatrizen. Die Lösungen der Eigenwertprobleme liefern die Randbedingungen an den Toren für das dreidimensionale Randwertproblem für die Diskontinuität.

Gegenstand der in der Arbeitsgruppe durchgeführten Arbeiten sind die schnelle Lösung der Aufgaben der Linearen Algebra, Modellerweiterungen und die Analyse des Verfahrens im Hinblick auf den Übergang zu unstrukturierten Gittern.

Eigenwertproblem

Die schnellere und speicherplatzsparende Lösung der Eigenwertprobleme durch die Vermeidung der Berechnung aller Eigenwerte zur Bestimmung einer kleinen Menge von Ausbreitungskon-

stanten (siehe Berichte 1994/95) wurde verbessert und auf Strukturen mit Symmetrieeigenschaften ausgedehnt, so daß jetzt eine größere Klasse von Schaltungen numerisch simuliert werden kann.

Lineare Gleichungssysteme

Durch die Aufspaltung der hochdimensionalen Gleichungssysteme (10^6 Unbekannte) mit Hilfe graphentheoretischer Methoden wird eine Reduktion der Ordnung erreicht. Auf die kleineren Systeme werden dann Krylov-Verfahren mit geeigneten, auf die Aufgabe zugeschnittenen Vorkonditionierern angewandt.

Einsparungen

Durch die Speicherplatzeinsparungen um den Faktor 80 und die Reduktion der Rechenzeit um den Faktor 50 bildet die Berechnung der Ausbreitungskonstanten nicht mehr den limitierenden Teil der Simulationssoftware bez. der auf Workstations realisierbaren Problemgröße. Die Rechenzeit für die Lösung der hochdimensionalen Gleichungssysteme wurde um den Faktor 10 verringert. Durch die Rechenzeit- und Speicherplatzeinsparungen insgesamt kann die Simulation komplexerer Schaltungen, die vorher Wochen in Anspruch nahm, inzwischen in Tagen durchgeführt werden. Durch die neuen Verfahren wurde auch eine Steigerung der Genauigkeit der Ergebnisse erreicht.

Modellerweiterungen

Der Übergang zu Modellen mit verlustbehafteten Materialien führt auf Eigenwertprobleme und Gleichungssysteme für komplexwertige Matrizen; an deren rechenzeit- und speicherplatzsparenden Varianten wird gearbeitet.

Unstrukturierte Gitter

Eine weitere Reserve in der Verbesserung der feldtheoretischen Simulation liegt im Übergang auf unstrukturierte Gitter, da die Verwendung kartesischer Gitter mit variabler Schrittweite bei einer Verfeinerung zu einer Häufung von Elementarzellen auch in Gebieten führt, in denen diese Feinheit nicht benötigt wird. Außerdem sind Quader weniger zur Anpassung krummliniger Ränder geeignet. Zusammen mit H. Langmach (Finite-Volumen-Methode) und I. Schmelzer (Gittergenerator) (S. 71) wird an der Lösung der dreidimensionalen Maxwell'schen Gleichungen auf unstrukturierten Gittern gearbeitet. Die Diskretisierung der Maxwell'schen Gleichungen auf unstrukturierten Gittern (Tetraeder und zugehörige duale Voronoi-Gebiete, siehe Abb. 3) für die Diskontinuität und für ausgewählte Wellenleiter (Prismen mit dreieckiger Grundfläche und zugehörige duale Prismen, siehe Abb. 2) wurde formuliert.

Es wurde ein DFG-Antrag mit dem Thema „Finite-Integrationstheorie mit unstrukturierter Diskretisierung zur elektromagnetischen Simulation von Höchstfrequenzschaltungen“ gestellt. Das gesamte Verfahren der feldtheoretischen Simulation von Höchstfrequenzschaltungen und die numerischen Ergebnisse wurden in den Publikationen [3, 4, 5, 6, 7, 8] dargestellt.

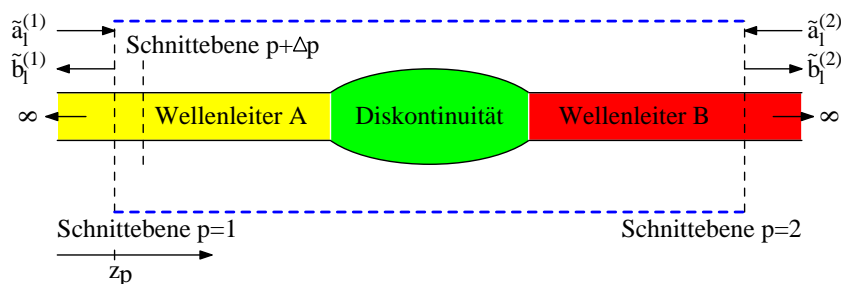


Abb. 1: Verbindungsstruktur

Literatur

1. 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, March 1992, pp. 540–546.
2. A. CHRIST, H.-L. HARTNAGEL, *Three-Dimensional Finite-Difference Method for the Analysis of Microwave-Device Embedding*, IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, Vol. MTT-35, No. 8, June 1987, pp. 688–696.
3. G. HEBERMEHL, R. SCHLUNDT, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *Simulation of Monolithic Microwave Integrated Circuits*, WIAS-Preprint No. 235, Berlin 1996.
4. G. HEBERMEHL, R. SCHLUNDT, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *Improved Numerical Solutions for the Simulation of Monolithic Microwave Integrated Circuits*, WIAS-Preprint No. 236, Berlin 1996.
5. G. HEBERMEHL, R. SCHLUNDT, *Numerical Solutions for the Simulation of Monolithic Microwave Integrated Circuits*, Book of Abstracts, 9th Conference of the European Consortium for Mathematics in Industry, Technical University of Denmark, Lyngby/Copenhagen, Denmark, June 25–29, 1996, pp. 559–561.
6. G. HEBERMEHL, R. SCHLUNDT, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *Numerical Solutions for the Simulation of Monolithic Microwave Integrated Circuits*, erscheint in: Progress in Industrial Mathematics, **2**, Teubner and Wiley, 8 pages.
7. G. HEBERMEHL, R. SCHLUNDT, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *Eigen Mode Solver for Microwave Transmission Lines*, eingereicht in: The International Journal for Computation and Mathematics in Electrical and Electronic Engineering.
8. G. HEBERMEHL, R. SCHLUNDT, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *Improved Numerical Solutions for the Simulation of Microwave Circuits*, eingereicht in: SIAM J. Sci. Comput.

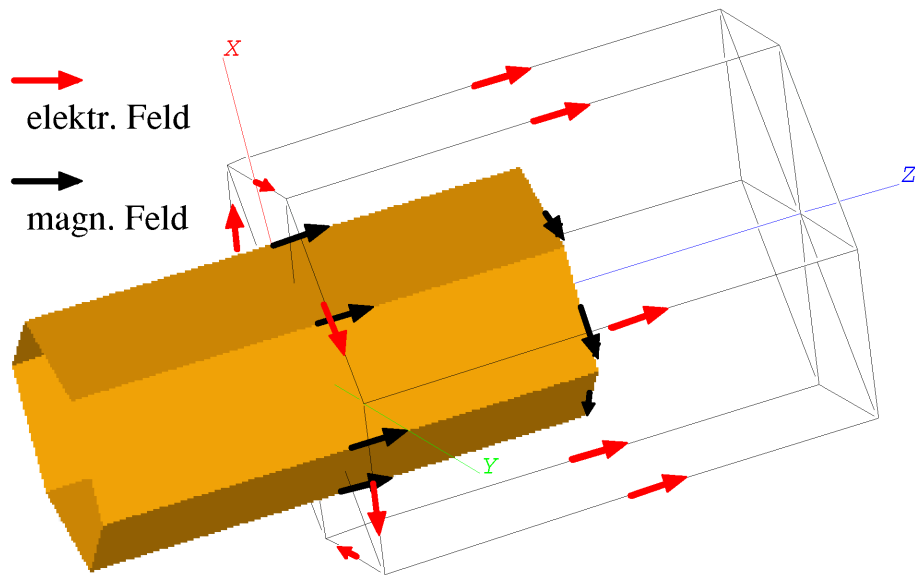


Abb. 2: Primäres und duales Prismengitter für den Wellenleiter

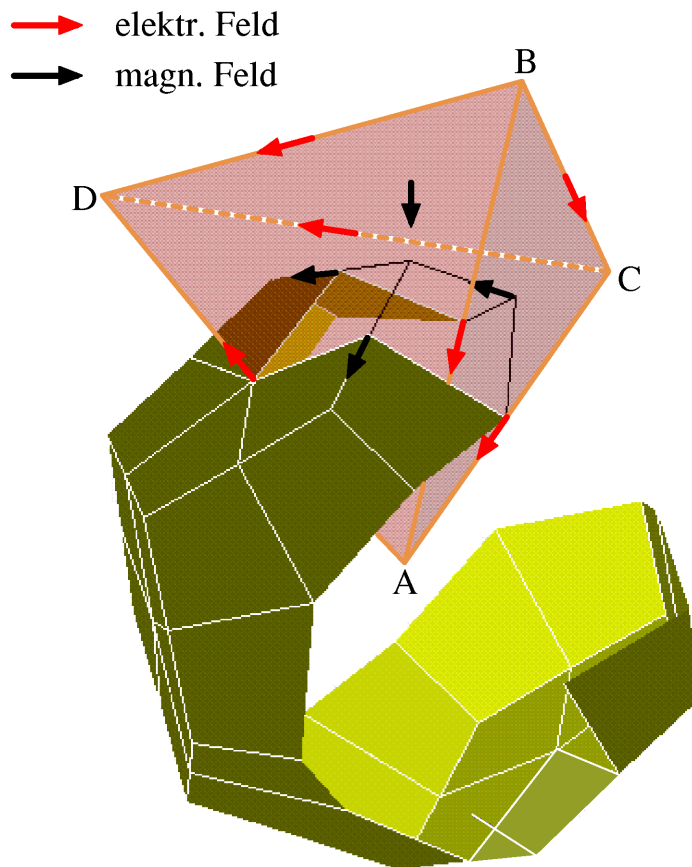


Abb. 3: Voronozelle mit Tetraeder für die Diskontinuität

Visualisierung

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

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

Für die Auswertung der Ergebnisse, die Darstellung von Zwischenergebnissen und die rechnergestützte Simulation der im Institut behandelten 2D- und 3D-Probleme, die in den meisten Fällen auch zeitabhängig sind, ist eine leistungsstarke graphische Umgebung (Hardware und Software) für eine detailtreue und informationsverlustfreie Visualisierung erforderlich.

Das Herzstück der Hardwareausstattung des aufgebauten Graphik-Labors ist eine „Reality Engine“ der Firma Silicon Graphics. Diese Workstation ist speziell für graphische Darstellungen prädestiniert (hardwaremäßige Unterstützung des Renderings, Echtzeitverarbeitung bei der Erzeugung von Videos mittels eines anschließbaren Videobords). Für die Erzeugung von S-VHS-Videos (PAL- oder NTSC-Format) wurde 1996 ein Video-Board Galileo in die Ausrüstung einbezogen.

Bei der Beschaffung von Workstations der Firmen Digital Equipment Corporation und SGI für die Arbeitsgruppe wurde darauf geachtet, daß die OpenGL-Graphik-Schnittstelle unterstützt wird. Damit ist die Graphikumgebung am Arbeitsplatz kompatibel zu der High-End-Graphik des Instituts.

Die Gruppe konnte auf diesem Gebiet auf wertvolle Unterstützung durch das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) und die Humboldt-Universität zurückgreifen. Die Präsentation wissenschaftlicher Ergebnisse in Form von Graphiken und Videos ist eine Serviceleistung für alle Forschungsgruppen des Hauses. Insbesondere für die Forschungsgruppen 1, 2, 3 und 6 wurden Leistungen auf diesem Gebiet erbracht. Für die Visualisierung der Ergebnisse der partitionierenden Clusteranalyse wurde eine AVS-Coroutine entwickelt. Die Arbeiten wurden zusammen mit H.-J. Mucha (Forschungsgruppe 6) (S. 103) publiziert [1].

Gerade in der Entwicklungs- und Testphase von Codes ist insbesondere für dreidimensionale Aufgabenstellungen ein Online-Graphik-Anschluß von großem Wert. Für diese Aufgaben werden am Institut entwickelte Graphikpakete verwendet. Das Paket GMS (J. Fuhrmann, H. Langmach, S. 71), welches u. a. in die in der Forschungsgruppe 1 verwendeten Codes ToSCA und DIOS integriert ist, unterstützt sowohl X-Windows als auch Postscript. Die Graphik-Schnittstelle OpenGL ist zum de-Facto-Standard für 3D-Graphik im UNIX-Bereich geworden und kann sowohl auf Maschinen mit Hardwareunterstützung für die Graphik als auch über das am Hause installierte Public-Domain-Paket MESA unter X-Windows verwendet werden. Die darauf basierende Bibliothek gltools wurde im Rahmen des Baukastensystems für partielle Differentialgleichungen entwickelt und u. a. bereits im Zuge der Kooperation mit dem ZIB in KASKADE integriert (S. 71).

Literatur

1. F.-K. HÜBNER, G. REINHARDT, *Visualisierung und Clusteranalyse mit AVS*, in: H. H. Bock, H.-J. Mucha, *Classification and multivariate graphics: Models, software and applications*, WIAS-Report No. 10, Berlin 1996.

Simulation von Transportprozessen in porösen Medien

Bearbeiter: J. Fuhrmann, S. Hengst, H. Langmach

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

Nichtlinearer Fluidtransport. Der Fluidtransport in porösen Medien wird in vielen für die Praxis interessanten Fällen durch nichtlineare, teilweise degenerierte parabolische Differentialgleichungen beschrieben. Es werden Diskretisierungs- und Lösungsverfahren für solche Probleme entwickelt und implementiert. Ein Code zur Simulation des Fluidtransports in porösen Medien, welcher Phänomene wie Kompressibilität, Viskosität sowie gesättigt-ungesättigtes Fließen in ein-, zwei- und dreidimensionalen Gebieten behandelt, wurde entwickelt [1] und u. a. auf der Hannover-Messe vorgestellt. Er basiert auf einer impliziten Zeitdiskretisierung und einer Raumdiskretisierung mit Hilfe eines knotenzentrierten Finite-Volumen-Verfahrens auf unstrukturierten Netzen. Zur Lösung der diskreten Probleme wird das Newton-Verfahren in Kombination mit vorkonditionierten Krylov-Unterraumverfahren eingesetzt. Die Basis der Implementation ist die Toolbox *pdelib* (S. 71). Es wird weiterhin das Ziel verfolgt, auf dieser Basis Anwenderkontakte zu knüpfen.

Bestehende Kontakte zu P. Knabner und B. Iglar (Universität Erlangen-Nürnberg) sowie zu G. Nützmann (Institut für Gewässerökologie und Binnenfischerei, Berlin) wurden aufrechterhalten bzw. ausgebaut.

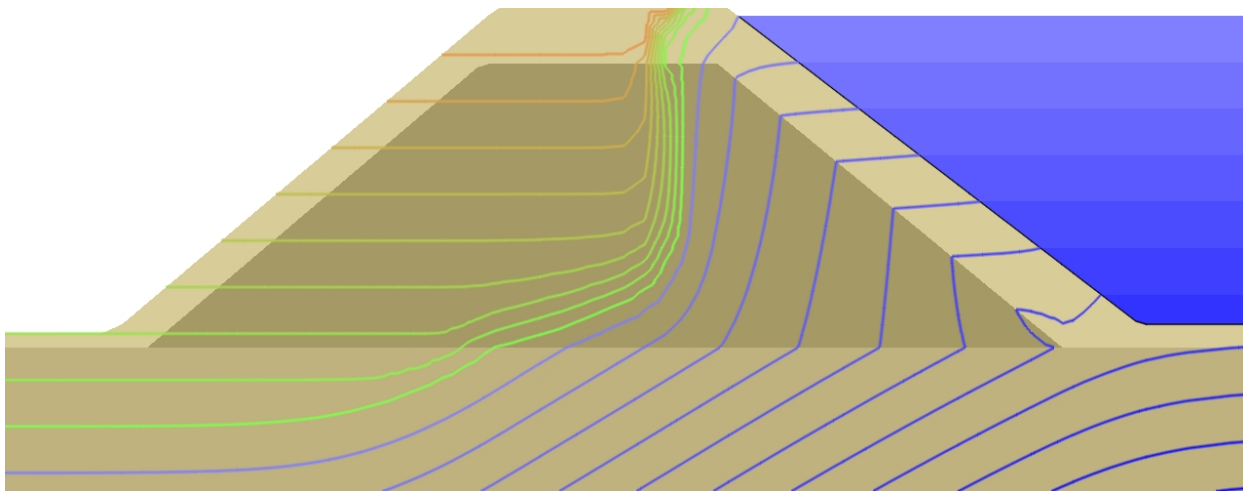


Abb. 1: Wasserfluß durch einen Dammbauwerk bei Hochwasser in Zusammenarbeit mit der Geoconsult Magdeburg GmbH

Finite-Volumen-Verfahren höherer Ordnung. Die Bearbeitung des reaktiven Stofftransports und von Zweiphasenströmungen auf der Basis der Druck-Sättigungsformulierung erfordert die Behandlung konvektionsdominanter und hyperbolischer partieller Differentialgleichungen. Hierzu werden knotenbasierte Finite-Volumen-Methoden (FVM) untersucht. Es werden sowohl exponentiell angepaßte Upwind-Schemata als auch Verfahren höherer Ordnung für hyperbolische Probleme betrachtet.

Schwierigkeiten bereitet dabei die geeignete Wahl der linearen Rekonstruktionsfunktionen, da im Vergleich zu zellzentrierten FVM nicht nur Nachbarelemente zu berücksichtigen sind.

Parameteridentifikation. In Kooperation mit der Forschungsgruppe 4 (S. 83) und der WASY GmbH wurde ein Verfahren von Vainikko zur Behandlung von Parameteridentifikationsproblemen im Rahmen des von der Firma vertriebenen Paketes FEFLOW implementiert [2]. Die dabei entstandene Schnittstelle der Toolbox *pdelib* zu FEFLOW ermöglicht weitere gemeinsame Projekte.

Literatur

1. J. FUHRMANN, *On numerical solution methods for nonlinear parabolic problems*, erscheint in: Proceedings of the 1st GAMM-Seminar on Modelling and Computation in Environmental Sciences, Stuttgart.
2. G. BRUCKNER, S. HANDROCK-MEYER, H. LANGMACH, *On the identification of soil transmissivity from measurements of the groundwater level*, WIAS-Preprint No. 250, Berlin 1996.

Entwicklung von Algorithmen und Softwarekomponenten für die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen

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

Kooperation: B. Erdmann, R. Roitzsch (ZIB), R. Kornhuber (Universität Stuttgart)

Im Rahmen dieses Projektes wird das System *pdelib* von Softwarekomponenten für die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen entwickelt und gepflegt. Gleichzeitig wird an Eigenentwicklungen numerischer Verfahren mit den Schwerpunkten algebraische Mehrgitterverfahren, Gittergenerierung und adaptive Verfahren gearbeitet.

pdelib. Für die Bearbeitung der vielfältigen Anwendungsprojekte des Institutes ist es notwendig, daß eine Softwarebasis im Hause entwickelt und gepflegt wird. Dabei müssen moderne numerische Verfahren und Programmier Techniken verwendet und aktuelle Entwicklungen auf dem Gebiet der Softwareentwicklung verfolgt werden.

Im Berichtszeitraum wurden die von der Arbeitsgruppe in den letzten Jahren entwickelten Softwarekomponenten – zusammengefaßt unter dem Namen *pdelib* – im Hinblick auf eine breite Verwendbarkeit überarbeitet, zu großen Teilen dokumentiert, in ein Quellcodemanagementsystem überführt und im Institut zur Diskussion gestellt.

Besonderes Gewicht wird bei der Entwicklung dieses Baukastensystems auf die klare, verständliche und möglichst stabile Definition von Schnittstellen sowie auf Portabilität und Wiederverwendbarkeit der Codes gelegt. Die Anwendung moderner Programmierparadigmen wie Modularität und Objekt-Orientiertheit, welche nur durch den Einsatz von Programmiersprachen wie C und C++ gewährleistet werden kann, ist hierbei erforderlich. Gleichzeitig wurden Datenstrukturen so angelegt, daß auf hochoptimierte FORTRAN-Kerne für die lineare Algebra zurückgegriffen werden kann.

Die so erstellten Softwarekomponenten wie z. B.:

- eine Bibliothek iterativer Verfahren,
- eine Bibliothek von Vorkonditionierern und direkten Lösern schwachbesetzter linearer Gleichungssysteme unter Einbeziehung von im Projekt (S. 60) erstellten Programmen unter Mitwirkung von M. Uhle,
- eine Schnittstelle für die Verwaltung von Gitterstrukturen mit dimensionsunabhängigem Programminterface, mit Anschlüssen an den Gittergenerator IBG, den Kern des adaptiven Finite-Elemente-Codes KASKADE des ZIB [1] und an das Simulationspaket FEFLOW der WASY GmbH [2],
- eine OpenGL-basierte Online-Graphik-Bibliothek (S. 68),
- ein Dateiformat für die Verwaltung von Finite-Elemente-Daten, welches Anschlüsse an verschiedene Gittergeneratoren und Visualisierungstools ermöglicht,

lassen sich für Entwicklungen von Simulationsprogrammen sowohl innerhalb der Arbeitsgruppe (S. 69) als auch in Zusammenarbeit mit anderen Forschungsgruppen einsetzen.

Gemeinsam mit der Forschungsgruppe 1 konnten auf dieser Softwarebasis erste Testrechnungen auf dem Gebiet des Laser- und Induktionshärtens von Stahl vorgenommen werden (S. 29).

Weiterhin wurde dieser Forschungsgruppe ein Prototyp für einen Löser für die nichtlineare Poissonsgleichung in drei Raumdimensionen zur Verfügung gestellt, um die Verwendbarkeit der entwickelten Komponenten im Rahmen der geplanten Arbeiten zur Erweiterung des Programmsystems ToSCA zu diskutieren. Auf der Basis der erwähnten Schnittstelle zu FEFLOW wird das Projekt (S. 83) realisiert.

Die im Rahmen dieses Projektes erstellte Online-Graphik wird gemeinsam mit den Kollegen der Arbeitsgruppe Visualisierung (S. 68) gepflegt. Sie wurde in KASKADE eingebaut und findet auch Eingang in das Projekt (S. 103) der Forschungsgruppe 6.

Auf dem im April dieses Jahres gemeinsam mit dem Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) organisierten Workshop „Datenstrukturen für adaptive Multilevel-Finite-Elemente-Verfahren“ wurden diese programmtechnischen Ansätze vorgestellt und mit Kollegen anderer Einrichtungen diskutiert.

Algebraische Mehrgitterverfahren. Die schnelle Auflösung großer, schwachbesetzter linearer Gleichungssysteme ist ein Kern für fast alle numerischen Verfahren im Zusammenhang mit der Lösung partieller Differentialgleichungen. In dieser Verfahrensklasse sind Mehrgitterverfahren aufgrund ihrer potentiellen optimalen Komplexität besonders interessant.

Ziel der Arbeit in der Gruppe ist die Weiterentwicklung eines Mehrgittervorkonditionierers für Probleme mit stark variierenden Koeffizienten auf Tensorproduktnetzen auf den Fall unstrukturierter Netze. Dieser soll sich flexibel im Rahmen komplexer Simulationsprobleme verwenden lassen. Der vorgeschlagene modulare Aufbau und eine einheitliche Beschreibung dieser Verfahren sowohl für strukturierte als auch für unstrukturierte Netze [3] sind von Vorteil für das Verständnis dieser Verfahren und sollen eine effiziente Implementation ermöglichen.

Auf diesem Gebiet bestehen u. a. Kontakte zu A. Reusken (TU Eindhoven), D. Braess (Universität Bochum) und K. Gärtner (ETH Zürich).

Gittergenerierung. Die Beschreibung komplizierter Geometrien und Materialverteilungen in zwei und drei Raumdimensionen sowie die Generierung von Gittern, welche diese Geometrien widerspiegeln, ist ein zentraler Punkt bei der Entwicklung anwendungsorientierter Verfahren für partielle Differentialgleichungen. Hierzu wird von I. Schmelzer an einer neuen Version des Gittergenerators IBG gearbeitet. Auf der Grundlage verbesserter, in C++ implementierter Datenstrukturen sollen bisher offengebliebene Wünsche von Nutzern behandelt werden. Gleichzeitig kann damit das im Vorjahr erzielte bessere theoretische Verständnis berücksichtigt werden.

Die vorhandene Version ist über eine Offline-Schnittstelle in viele Projekte (S. 69), (S. 64), (S. 29) integriert.

Auf dem von der Gruppe veranstalteten Gittergenerierungstag wurden Kontakte insbesondere zu den Linzer Kollegen J. Schöberl und F. Kickinginger geknüpft.

Adaptive Verfahren. Sowohl die Lösung dreidimensionaler Randwertprobleme als auch die Behandlung von stark lokalisierten Phänomene, welche in allen behandelten Aufgabenklassen auftreten können, macht die Entwicklung adaptiver Verfahren notwendig. Auf diesem Gebiet kooperiert die Gruppe mit dem ZIB und mit der Universität Stuttgart (R. Kornhuber). Ein erstes Resultat dieser Kooperationen ist eine C-Schnittstelle zu dem adaptiven Finite-Elemente-Code KASKADE, welche die Untersuchung adaptiver Verfahren im Rahmen der in der Gruppe vorhandenen Softwarebasis ermöglicht. Diese Schnittstelle wurde auch bei der WASY GmbH installiert.

Für die oben beschriebenen Problemstellungen auf dem Gebiet der porösen Medien ist die Entwicklung robuster Fehlerschätzer ein offenes Problem. Um diese Fragestellung in einem anwendungsbezogenen Kontext intensiver bearbeiten zu können, wurde ein BMBF-Antrag für die Förderung einer Kooperation mit der WASY GmbH gestellt.

Literatur

1. R. BECK, B. ERDMANN, R. ROITZSCH, *KASKADE 3.0 - An object oriented finite element code*, Technical Report, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik, TR 95-4, Berlin, 1994.
2. H.-J. G. DIERSCH, *Interactive, graphics-based finite-element simulation system FEFLOW for modeling groundwater flow, contaminant mass and heat transport processes*, WASY Institute for Water Resources Planning and Systems Research Ltd. Berlin, 1996. FEFLOW User's Manual Version 4.50.
3. J. FUHRMANN, *Outlines of a modular algebraic multigrid method*, in: Proceedings of the Conference on Algebraic Multilevel Iteration Methods, Nijmegen, (O. Axelsson, B. Polman, eds.) Katholieke Universiteit Nijmegen, Niederlande, 1996, pp. 141–153.

4.4 Forschungsgruppe Integralgleichungen und Pseudodifferentialgleichungen

4.4.1 Zusammenfassung

Die Forschungsgruppe hat die Arbeit an spezifischen Beiträgen zur Entwicklung, Implementation und effektiven Nutzung von Integralgleichungs- und Randelementmethoden in komplexen Anwendungsfeldern der Natur- und Ingenieurwissenschaften verstärkt fortgesetzt. Im Mittelpunkt standen die Entwicklung und Implementierung effektiver Algorithmen zur Lösung des direkten Problems bei binären optischen Gittern, das Problem des Entwurfs diffraktiver Strukturen in der Optik (Teillösungen zum inversen Problem), analytische und numerische Lösungen von ebenen Elastizitätsproblemen in nichtglatten Gebieten sowie von Tragflügelproblemen, spezielle inverse Probleme in der Hydrologie (z. B. Bestimmung der Bodendurchlässigkeit aus Grundwasserständen), der Seismik und der Geodäsie (Berechnung des Schwerefeldes der Erde). In den Grundlagenuntersuchungen wurden wichtige Resultate bei der Lösung folgender Probleme erzielt: Konstruktion von Waveletbasen auf Rechteckgebieten, numerische Lösung optimaler Steuerungsprobleme, Diskretisierungsverfahren für Pseudodifferentialgleichungen unter Benutzung von Wavelets, Multiwavelets, orthogonalen Polynomen oder Quadraturformeln, Gebietszerlegungsmethoden und schnelle Löser für elliptische partielle Differentialgleichungen. Ein Anwendungsprojekt wurde im Rahmen einer Forschungsvereinbarung mit dem Berliner Institut für Optik GmbH durchgeführt. Für ein anderes, forschungsgruppenübergreifendes Projekt war die WASY GmbH der Auftraggeber. Weitere Arbeiten der Forschungsgruppe wurden im Rahmen von interdisziplinären Projekten, in internationaler Forschungskooperation oder mit Förderung durch die DFG durchgeführt.

Im folgenden stellen wir die wichtigsten im Jahre 1996 bearbeiteten Projekte vor.

4.4.2 Projekte

Analytische und numerische Behandlung direkter und inverser Probleme für diffraktive Strukturen in der Optik

Bearbeiter: J. Elschner, G. Schmidt

Kooperation: B. Kleemann, H.-J. Rostalski (Berliner Institut für Optik GmbH, (BIFO))

Die Entwicklung verschiedener hochpräziser Mikro-Techniken erlaubt heute die Herstellung mikrooptischer Elemente mit komplexen Oberflächenprofilen und Strukturgrößen, die im Bereich der Wellenlänge des Lichts liegen. Da bei Strukturen kleiner als fünf mal der Wellenlänge Polarisations- und Resonanzeffekte auftreten, ergeben sich durch die Mikrostrukturierung von Ober- und Grenzflächen qualitativ neue Anwendungsmöglichkeiten der Optik, deren Nutzung in verschiedenen Bereichen der Verfahrens-, Umwelt- und Medizintechnik enorme Potentiale bietet. Für die Bestimmung der Wirkung eines optischen Gitters oder für die optimale Anpassung der beugenden Struktur gewinnt die numerische Simulation immer größere Bedeutung. Allerdings reichen die bisher benutzten Ansätze der skalaren Beugungstheorie für Modellierung und Berechnung solcher Strukturen nicht mehr aus. Gegenstand der Arbeiten, die im Rahmen einer Forschungsvereinbarung mit dem BIFO durchgeführt werden, ist die Untersuchung exakterer Modelle (auf der Basis von Transmissionsproblemen für die elektromagnetischen Feldgleichungen) und deren analytische und numerische Behandlung. Die Hauptanwendung liegt in der Entwicklung effektiver numerischer Methoden zur Lösung von Optimal-Design-Problemen für binäre Gitter, die am BIFO entworfen werden. Von Interesse ist dabei u. a. die Wirkungsgrad-erhöhung von Solarmodulen, von Mikrooptiken in Hochleistungslasern, von HR-Spiegeln und Polarisationschaltern.

1996 wurden zu dieser Thematik folgende Arbeiten durchgeführt:

1. Entwicklung und Implementierung effektiver Algorithmen zur Lösung des direkten Problems bei binären periodischen Gittern:

Hierbei wird die Invarianz des Problems bezüglich einer Raumdimension und der Fall einer ebenen einfallenden Welle angenommen. Das elektromagnetische Feld läßt sich aus den Transversalkomponenten des elektrischen (TE) und des magnetischen Feldes (TM) bestimmen, die im \mathbb{R}^2 Transmissionsprobleme für die Helmholtz-Gleichungen

$$\Delta u + k^2 u = 0 \tag{1}$$

mit stückweise stetigen Diffraktionskoeffizienten k und bekannten Ausstrahlungsbedingungen erfüllen. Da das Gitterprofil eine periodische Funktion ist, können die Lösungen u als quasiperiodische Funktionen gesucht werden, die (1) in einem Rechteck erfüllen und nichtlokalen Randbedingungen genügen, die durch hypersinguläre Integraloperatoren erzeugt werden. Außerdem müssen gewisse Transmissionsprobleme an den Materialgrenzen (Interface) erfüllt sein. Die Realisierung der Ausstrahlungsbedingungen in Form nichtlokaler Randbedingungen und die Variationsformulierung der entsprechenden Randwertaufgaben geht auf Untersuchungen von Bao/Dobson/Friedman (vgl. [1], [5]) zurück, die damit Existenz- und Eindeutigkeitsaussagen für die direkten Probleme beweisen konnten. Eine FE/BE-Diskretisierung der Variationsgleichungen bietet sich als numerisches

Lösungsverfahren an. Zur Lösung der direkten Probleme bei binären Gittern und stückweise konstantem k wurde ein auf bilinearen Ansatzfunktionen basierendes Verfahren implementiert. Das entstehende Gleichungssystem besitzt eine tridiagonale Struktur mit teilweise vollbesetzten Blöcken und ist nicht symmetrisch. Deshalb wird zur Lösung die Matrix-Progonka genutzt, die wegen der Geometrie der Beugungsgitter mit der FFT gekoppelt werden kann. Zahlreiche numerische Tests und Vergleiche mit der Integralgleichungsmethode haben gezeigt, daß diese Methode bei einer Vielzahl der heute die Anwender interessierenden Beugungsgitter recht genaue Resultate für die Kenngrößen der Beugungsgitter, die sogenannten Beugungs- und Transmissionseffektivitäten, liefert. Allerdings entstehen insbesondere bei großem k und großen Schichtdicken die bei Gebietsverfahren für die Wellengleichung charakteristischen Dispersionseffekte, die eine sehr feine Diskretisierung erfordern. Um die direkten Probleme auch für diese Beispiele in vertretbarem Zeitaufwand lösen zu können, wurde der oben genannte Zugang weiterentwickelt, u. a. als verallgemeinerte FEM (nach Babuška) mit minimaler Pollution, mathematisch begründet und implementiert (vgl. [4]). Dadurch konnte die Effektivität des Verfahrens erheblich erhöht werden.

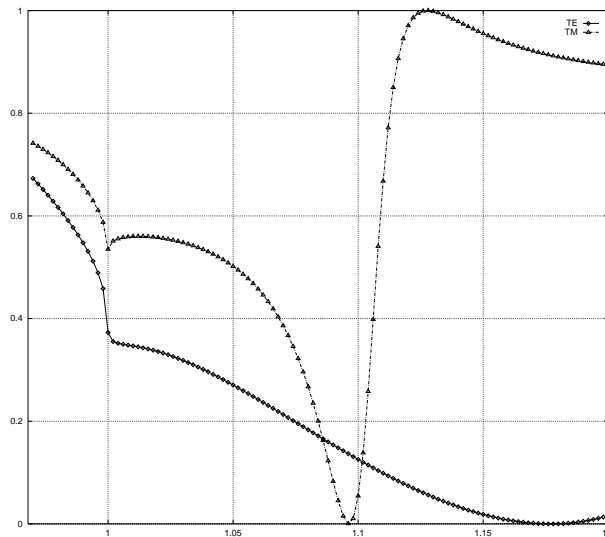


Abb. 1: Beispiel eines Polarisationsschalters. Transmittierte Energie der TE- und TM-Polarisation in Abhängigkeit von der Wellenlänge

2. Das die Ingenieure eigentlich interessierende Problem des Entwurfs diffraktiver Strukturen, die bestimmte optische Eigenschaften oder Funktionen realisieren, ist ein optimales Design-Problem. Zu seiner Lösung müssen neuere Methoden (vgl. [2], [3], [6]) zur Lösung von Identifizierungs- und Optimierungsproblemen für Randwertaufgaben genutzt und weiterentwickelt werden, deren theoretische Begründung bei Transmissionsproblemen mit nichtglattem Interface offen ist.

Die Bestimmung optimaler binärer Gitter führt oft auf Minimumprobleme für Zielfunktionen, die von Beugungs- und Transmissionskoeffizienten bzw. -effektivitäten für den TE- und TM-Fall abhängen. Für eine große Klasse dieser Funktionen wurde die Differenzierbarkeit bezüglich Variationen des binären Gitterprofils bewiesen, und es wurden erstmalig effektive Berechnungsformeln für die Gradienten angegeben. Um diese Formeln mathematisch begründen zu können, ist es notwendig, die Singularitäten der Lösung

von Transmissionsproblemen für die Helmholtz-Gleichung mit komplexem k in den Interface-Ecken zu untersuchen (vgl. [4]).

Die oben genannte Variationsformulierung des Beugungsproblems hat den Vorteil, daß die zur Gradientenberechnung benötigten direkten und dualen Probleme parallel gelöst werden können. Auf der Grundlage der verallgemeinerten FEM wurden verschiedene Gradientenverfahren zur Minimabestimmung der Zielfunktionen implementiert und numerisch getestet. Da die Zielfunktionen in der Regel mehrere lokale Minima besitzen, wurden verschiedene Verfahren zur Ermittlung geeigneter Startwerte getestet. Mit dem entwickelten Programmsystem ist es z. Zt. möglich, binäre Gitter zu bestimmen, die über einem Bereich von Wellenlängen oder Einfallswinkeln vorgegebene Intensitäten optimieren bzw. Phasendifferenzen zwischen den TE- und TM-Polarisationen realisieren.

Durch die Vielzahl der Anwendungsmöglichkeiten optischer Gitter und der damit zusammenhängenden optimalen Design-Probleme ist es notwendig, weitere Zielfunktionen und entsprechende Optimierungsalgorithmen zu untersuchen.

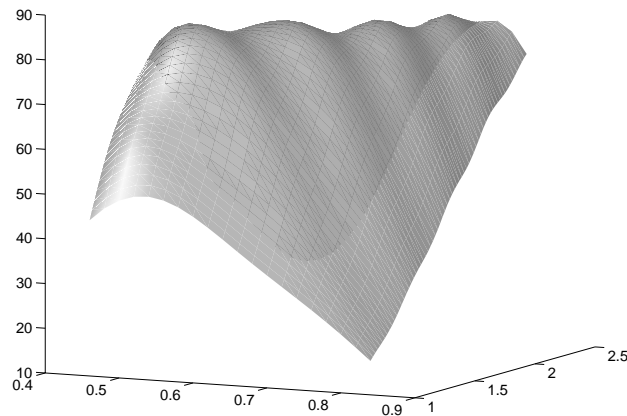


Abb. 2: Transmissionseffektivität der $-2.$ Ordnung in Abhängigkeit von Höhe und Breite einer binären Struktur

Literatur

1. G. BAO, D. DOBSON, J. COX, *Mathematical studies in rigorous grating theory*, J. Opt. Soc. Am., **A 10** (1995), pp. 1029–1042.
2. D. COLTON, R. KRESS, *Inverse acoustic and electromagnetic scattering theory*, Springer, Berlin 1992.
3. D. DOBSON, *Optimal design of periodic antireflexive structures for the Helmholtz equation*, Eur. J. Appl. Math., **4** (1993), pp. 321–340.
4. J. ELSCHNER, G. SCHMIDT, *Optimal design of binary diffractive gratings – analysis and numerics*, WIAS-Preprint, in Vorbereitung.
5. A. FRIEDMAN, *Mathematics in industrial problems*, Part 7, Chap. 14, Vol. **67** of the IMA Vol. Math. Appl., Springer, New York, 1995.
6. J. SOKOŁOWSKI, J. ZOLESIO, *Introduction to shape optimization*, Shape Sensitivity Analysis, Springer Series in Comp. Math., Vol. **16**, New York, 1992.

Integralgleichungsmethoden in Elastizitätstheorie und Tragflügeltheorie

Bearbeiter: J. Elschner, S. Pröbldorf, G. Schmidt

Kooperation: V. Maz'ya, T. Ivanov (Universität Linköping), I. H. Sloan (The University of New South Wales, Sydney), Y. Jeon (Ajou University, Suwon), E. P. Stephan (Universität Hannover), S. Okada (The University of Tasmania, Hobart), G. Monegato, L. Scuderi (Politecnico di Torino)

Zu diesem Projekt wurden 1996 folgende Arbeiten durchgeführt:

1. Berechnung spezieller Integraloperatoren der ebenen Elastizitätstheorie und die Kubatur von Potentialen in beschränkten Gebieten

Iterative Integralgleichungsmethoden sind ein interessantes alternatives Lösungsverfahren für nichtlineare Randwertaufgaben der Elastizitätstheorie, wenn es gelingt, effektive Approximationen für elastische und verwandte Potentiale zu entwickeln. Aufbauend auf den in vergangenen Jahren entwickelten und begründeten semi-analytischen Kubaturformeln für Integraloperatoren der mathematischen Physik, die numerisch effizient sind für glatte Funktionen mit kompaktem Träger (vgl. [4]), wurde die Anwendung von Wavelet-Techniken und der Fall beschränkter Integrationsgebiete untersucht. In [5] wurde eine approximative Multiresolution entwickelt, mit deren Hilfe Räume von glatten, schnell abfallenden Ansatzfunktionen in fast orthogonale Wavelet-Räume zerlegt werden können. Durch die fast verschwindenden Momente dieser Wavelets gelingt es, semi-analytische, schwach besetzte Matrix-Darstellungen wichtiger Integraloperatoren der mathematischen Physik anzugeben. In [3] wurde ein anderer Zugang für die Kubatur von Integraloperatoren in beschränkten Gebieten untersucht, der auf der Quasiinterpolation der Dichte auf speziellen, sich zum Rand hin häufenden Gitterpunkten basiert. Neben Abschätzungen des Approximationsfehlers wurde die optimale Wahl der Gitterverfeinerung beschrieben. Darüber hinaus wurden Computerprogramme zur Approximation von Funktionen in polygonalen Gebieten und zur Berechnung spezieller Integraloperatoren der ebenen Potential- und Elastizitätstheorie implementiert.

2. Lösung des Zaremba-Problems in Gebieten mit Ecken

Mellinsche Faltungsgleichungen stellen eine wichtige Klasse nichtkompakter Integralgleichungen dar, die insbesondere in der Bruchmechanik (z. B. Berechnung der Spannungsverteilung bei 2D-Rißproblemen) und bei der Lösung vieler anderer Randwertaufgaben der mathematischen Physik und Mechanik in Gebieten mit nichtglatten Rändern auftreten. Bei der numerischen Lösung derartiger Integralgleichungen haben sich in letzter Zeit Approximationsverfahren mit trigonometrischen Ansatzfunktionen als sehr effektiv erwiesen. Insbesondere wurde ein optimal konvergentes Kollokationsverfahren für das Zaremba-Problem in Gebieten mit Ecken entwickelt und numerisch getestet [2], wobei Transformationstechniken zur Glättung der Lösungssingularitäten mit der FFT zur schnellen Lösung der entstehenden Gleichungssysteme gekoppelt wurden. Die theoretische Begründung (Stabilität) dieser Verfahren stellt für Integralgleichungen mit Mellinschen Faltungskernen ein schwieriges Problem dar, das zur Zeit noch nicht zufriedenstellend gelöst ist. In [1] gelang es erstmalig, explizite hinreichende und notwendige Bedingungen

für die Stabilität des Galerkinverfahrens mit trigonometrischen Polynomen aufzustellen, wobei auch der Fall eines Systems solcher Gleichungen erfaßt wurde.

3. Analytische und numerische Lösung der Tragflügelgleichung mit logarithmischem Zusatzkern

Bei der Berechnung der Zirkulation beim freifahrenden schwach belasteten Propeller und bei der Lösung der Fundamentalprobleme der ebenen Elastizitätstheorie treten singuläre Integralgleichungen der Gestalt

$$\int_{-1}^1 \frac{f(y)}{x-y} dy + m(x) \int_{-1}^1 f(y) \log|x-y| dy + \int_{-1}^1 k(x,y)f(y)dy = g(x), \quad -1 < x < 1, \quad (1)$$

auf. In [7] wurden die Lösbarkeitsverhältnisse (einschließlich des Singulärverhaltens der Lösungen) in den gewichteten Räumen L_w^2 mit $w(x) = (1-x)^\alpha(1+x)^\beta$, $|\alpha| = |\beta| = 1/2$, vollständig geklärt. Im Falle der ungestörten Gleichung ($k \equiv 0$) und $m \in L_w^2$ wurden alle Lösungen explizit angegeben. Mit Hilfe dieser Lösungen wurde eine zu (1) äquivalente Fredholmsche Integralgleichung hergeleitet. In Form einer Normabschätzung für k ließ sich eine einfache hinreichende Bedingung dafür angeben, daß (1) für jede rechte Seite g genau eine einparametrische Lösungsschar in einem geeigneten Hilbertraum L_o^2 besitzt. Damit wurden bekannte Ergebnisse von Müller [6] und Schleiff [8] wesentlich verallgemeinert. Unter Benutzung der Lösbarkeitstheorie wurde ein numerisches Verfahren mit orthogonalen Polynomen als Ansatzfunktionen beschrieben, für das Stabilität und optimale Fehlerabschätzungen in einer Skala von gewichteten Sobolev-Normen und gleichmäßigen Normen bewiesen wurden [7].

Im Falle unstetiger rechter Seiten g (Flügel Schlag) wurde eine in der Forschungsgruppe entwickelte Transformationstechnik zur Glättung der Lösungssingularitäten in den Sprungstellen von g mit einem trigonometrischen Kollokationsverfahren gekoppelt. Durchgeführte numerische Tests bestätigen die hohe Effizienz dieser Methode. Die Stabilitäts- und Konvergenzuntersuchungen werden in Zusammenarbeit mit G. Monegato und L. Scuderi (Politecnico di Torino) fortgesetzt.

Literatur

1. J. ELSCHNER, *Trigonometric approximation of Mellin convolution equations*, wird eingereicht in: J. Integral Equations Appl.
2. J. ELSCHNER, Y. JEON, I. H. SLOAN, E. P. STEPHAN, *The collocation method for mixed boundary value problems on domains with curved polygonal boundaries*, erscheint in: Numer. Math.
3. T. IVANOV, V. MAZ'YA, G. SCHMIDT, *Boundary layer approximations and cubature of potentials in domains*, in Vorbereitung.
4. V. MAZ'YA, G. SCHMIDT, "Approximate Approximations" and the cubature of potentials, Rend. Mat. Acc. Lincei, Serie 9, Vol. 6 (1995), pp. 161–184.

5. V. MAZ'YA, G. SCHMIDT, *Approximate wavelets and the approximation of pseudodifferential operators*, WIAS-Preprint No. 249, Berlin 1996.
6. H. N. MÜLLER, *Über eine singuläre Integralgleichung 1. Art mit Zusatzkern*, Math. Nachr., **35** (1967), pp. 57–74.
7. S. OKADA, S. PRÖSSDORF, *On the solution of the generalized airfoil equation*, WIAS-Preprint No. 242, Berlin 1996; erscheint in: J. Integral Equations Appl.
8. M. SCHLEIFF, *Über eine singuläre Integralgleichung mit logarithmischem Zusatzkern*, Math. Nachr., **42** (1969), pp. 79–88.

Numerische Lösung des fixen geodätischen Randwertproblems zur Bestimmung des Schwerefeldes der Erde

Bearbeiter: A. Rathsfeld

Kooperation: R. Klees (Delft University of Technology)

Ein fundamentales Problem der Geodäsie besteht in der Bestimmung des Schwerefeldes der Erde, wobei die Gestalt der Erdoberfläche als bekannt vorausgesetzt wird und die Schwerewerte an der Erdoberfläche durch Messungen bestimmt werden. Das gesuchte Schwerefeld ergibt sich als Lösung der Poisson-Gleichung im Außengebiet unter Einbeziehung einer nichtlinearen Randbedingung. Durch Linearisierung, durch Vernachlässigung kleiner Größen und mittels Potentialansatz kann das Randwertproblem für die Poissongleichung auf die stark singuläre Integralgleichung

$$a(P)x(P) + \frac{1}{4\pi} p.v. \int \frac{(\cos(\tau(P), Q-P))}{|Q-P|^2} x(Q) d_Q S = y(P), P \in S$$

mit einem nichttangentialen Vektorfeld τ über der Erdoberfläche S zurückgeführt werden. Die Schwierigkeit bei der numerischen Lösung der singulären Integralgleichung besteht darin, daß eine sehr komplexe, strukturierte Oberfläche möglichst genau aufgelöst werden muß, d. h., daß bei der Diskretisierung sehr große lineare Gleichungssysteme entstehen. Selbst mit der Speicherkapazität und Rechengeschwindigkeit modernster Computer können die anstehenden Matrizen nur mit Hilfe von Kompressionstechniken bearbeitet werden.

Als Testbeispiel für die numerische Lösung der singulären Integralgleichung über der gesamten Erdoberfläche S wurde im vergangenen Jahr die eingeschränkte Gleichung betrachtet, d. h., S wurde durch einen quadratischen Ausschnitt der Erdoberfläche ersetzt und die durch einen Waveletkollokationsalgorithmus diskretisierte Matrix konnte bis auf 3 % komprimiert werden, ohne daß der numerische Fehler sich verschlechtert (vgl. [1], [2]).

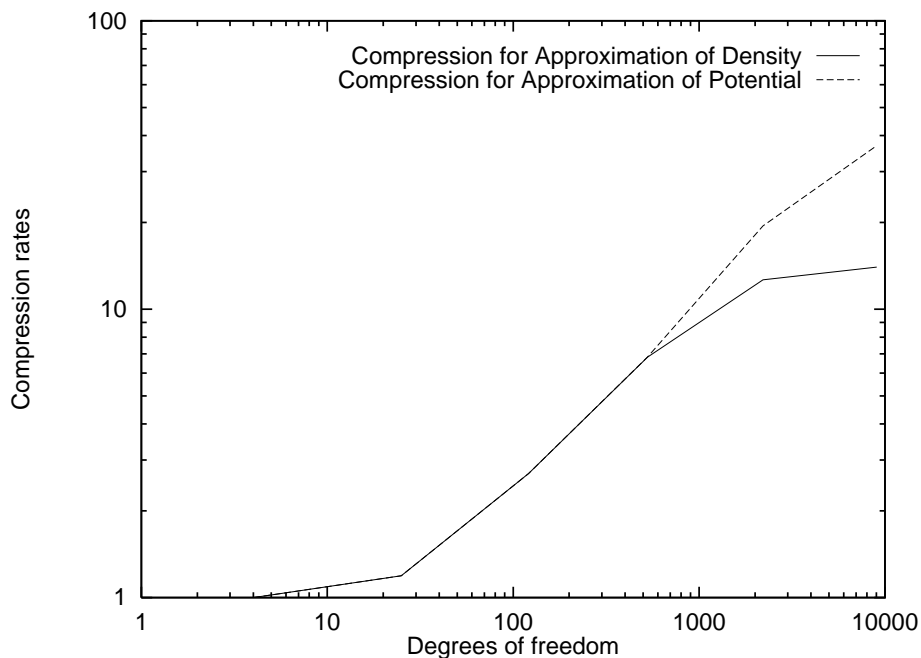


Abb. 1: Kompressionsraten in Abhängigkeit von den Freiheitsgraden

Der entscheidende Anteil der Rechenzeit bei der Realisierung des Algorithmus verstreicht bei der Berechnung der komprimierten Matrix. Deshalb wurde im Berichtsjahr ein neuer Quadraturalgorithmus für die Waveletmethode entwickelt, der die fehlende Glattheit der Geometrie berücksichtigt. Mit seiner Hilfe konnte die Rechenzeit von geschätzten 10 500 s für einen konventionellen Kollokationsalgorithmus auf nur 890 s für den Waveletalgorithmus gesenkt werden.

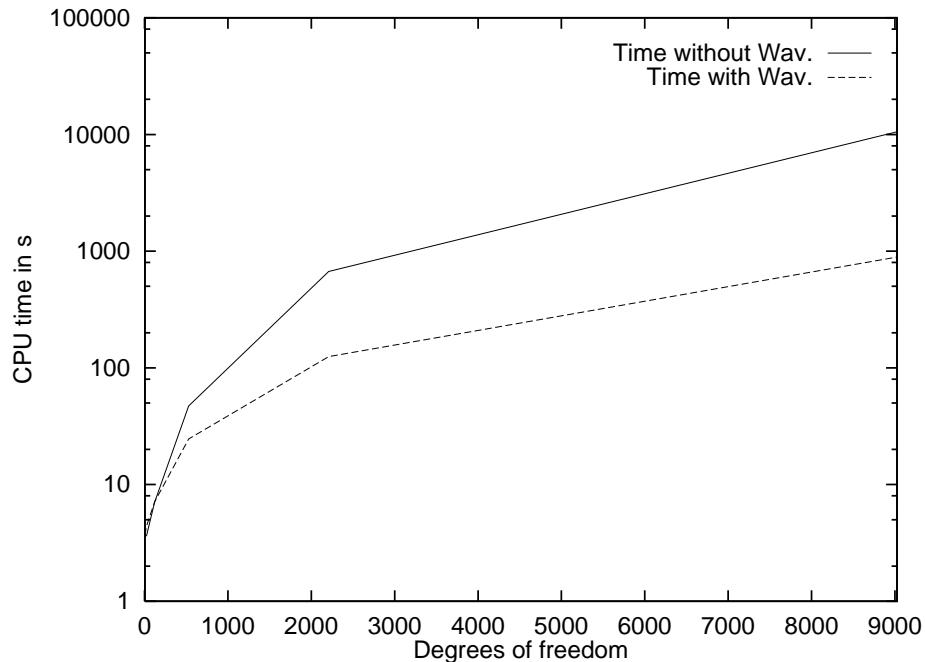


Abb. 2: Rechenzeit für Waveletalgorithmus in Abhängigkeit von der Dimension des Gleichungssystems

Außerdem wurde der Waveletalgorithmus für den Fall beliebiger Randmannigfaltigkeiten verallgemeinert, so daß die Diskretisierung der kugelförmigen Erdoberfläche möglich wird. Für diesen verallgemeinerten Algorithmus konnte gezeigt werden, daß die Kompressionsraten, die Fehlerabschätzungen und die Komplexitätsraten (d. h. die Abschätzungen für den Rechenaufwand) erhalten bleiben (vgl. [3]).

Literatur

1. B. KLEEMANN, A. RATHSFELD, R. SCHNEIDER, *Multiscale methods for boundary integral equations and their application to boundary value problems in scattering theory and geodesy*, in: W. Hackbusch, G. Wittum (Herausgeber): *Boundary Elements, Implementation and Analysis of Advanced Algorithms*, Proceedings of the 12th GAMM-Seminar Kiel, Notes on Numerical Fluid Mechanics, Vol. 54, Vieweg-Verlag, Braunschweig, Wiesbaden, 1996.
2. A. RATHSFELD, *A wavelet algorithm for the boundary element solution of a geodetic boundary value problem*, WIAS-Preprint No. 225, Berlin 1996; eingereicht in: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*
3. A. RATHSFELD, *A wavelet algorithm for the solution of a singular integral equation over a smooth two-dimensional manifold*. WIAS-Preprint No. 267, Berlin 1996; eingereicht in: *Adv. Comput. Math.*

Inverse Probleme in Hydrologie und Seismik

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

Kooperation: H.-J. Diersch (WASY GmbH Berlin), M. Yamamoto (Universität Tokio),
L. Eldén (Universität Linköping)

Schwerpunkte waren die Regularisierung spezieller inverser Probleme durch eine Vorbehandlung der Daten sowie Identifizierbarkeitsfragen. Dabei standen die folgenden konkreten Aufgaben im Mittelpunkt:

1. Die Bestimmung des ortsabhängigen Koeffizienten in der zweidimensionalen stationären Diffusionsgleichung mit Anwendung bei der Bestimmung der Bodendurchlässigkeit aus Grundwasserständen (Hydrologie) als forschungsgruppenübergreifendes und anwendungsbezogenes Projekt (siehe Projekt S. 69)

Bei der Optimierung der Grundwasserüberwachung sowie bei der Altlastensanierung sind Aussagen über die Bodendurchlässigkeit von grundlegender Bedeutung. Zur Verfügung hat man nur wenige Meßwerte von Grundwasserständen sowie gewisse Kenntnisse über die Eigenschaften des Bodenmaterials. Auf Grund des Mangels an Meßwerten ist es unmöglich, vollständige Aussagen abzuleiten. Der Vertragspartner, die WASY GmbH, hat an Ergebnissen zu dieser Problematik großes Interesse.

Mathematisches Modell ist das lineare elliptische Randwertproblem

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot a(x,y)\nabla u(x,y) &= f(x,y) & (x,y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2 \\ u(x,y) &= 0 & (x,y) \in \partial\Omega_1 \\ a(x,y)\nabla u(x,y) \cdot \nu(x,y) &= g(x,y) & (x,y) \in \partial\Omega_2 = \partial\Omega \setminus \partial\Omega_1, \end{aligned}$$

gegeben in einem beschränkten Gebiet Ω mit stückweise glattem Rand $\partial\Omega$, wobei $\nu = \nu(x,y)$ die äußere Einheitsnormale zu $\partial\Omega_2$ bezeichnet. Zu identifizieren ist der Koeffizient $a(x,y)$ aus Messungen von $u(x,y)$ im Gebiet. Zur Behandlung des zweidimensionalen stationären Falles wurde ein von G. Vainikko entwickeltes direktes Verfahren benutzt. Es hat gegenüber indirekten Verfahren Vorteile in der Rechengeschwindigkeit und zeichnet sich dadurch aus, daß es bei lokal vollständig gegebenen Meßwerten lokal brauchbare Resultate liefert.

Dieses Verfahren wurde mit einer Methode der Datenvorglättung kombiniert mit dem Ziel, den Informationsmangel in den Daten mit Hilfe von a priori Informationen soweit wie möglich zu kompensieren und im Wechsel mit der Invertierung iterativ Daten und Koeffizient im Rahmen der gegebenen Information zu verbessern. Testrechnungen ergaben, daß dieses modifizierte Verfahren eine echte Weiterentwicklung der Methode von Vainikko darstellt, da es auch bei lokal unvollständig gegebenen Meßwerten verwertbare Ergebnisse liefert.

Vergleichsrechnungen, in denen die Gauß-Newton-Levenberg-Marquardt-Methode verwendet wurde, ergaben für den zweidimensionalen stationären Fall, daß das oben beschriebene Verfahren unter Ausnutzung aller verfügbaren Informationen brauchbare

Resultate bei kurzer Rechenzeit liefert. Die numerische Realisierung und die Implementierung des erstellten Programms in das Simulationssystem des Anwenders erfolgte in enger Zusammenarbeit der Forschungsgruppen 3 und 4.

Im Zusammenhang mit diesem Projekt wurde auch die Frage der Identifizierbarkeit des ortsabhängigen Koeffizienten unter den vom Anwender vorgegebenen Randbedingungen untersucht. Da der Koeffizient im betrachteten Anwendungsproblem eine stückweise konstante Funktion ist, wurde die Identifizierbarkeit im Raum L^2 untersucht. Die Randbedingungen sind vom Robin-Typ. Es läßt sich zeigen, daß der Koeffizient in Teilgebieten, in denen der Grundwasserstand nicht konstant ist und in solchen, in denen die Strömungslinien sich nicht tangential dem Rand des Gebietes nähern, identifiziert werden kann.

2. Die Bestimmung von Punktquellen in der Wellengleichung durch Messungen im Inneren oder auf dem Rande mit Anwendung (im 3D-Fall) auf die Bestimmung von Erschütterungsherden im Erdinneren aus Messungen an der Oberfläche

Betrachtet wurde die eindimensionale Wellengleichung

$$u_{tt}(x, t) = u_{xx}(x, t) + \lambda(t) \sum_{k=1}^N \alpha_k \delta(x - x_k),$$

in der N , α_k , x_k aus Messungen von $u(y, t)$ für fixiertes y , bzw. aus Messungen von $\frac{\partial u(0, t)}{\partial v}$ zu bestimmen sind. Neben Fragen der Existenz, Eindeutigkeit und Stabilität spielten Fragen der Rekonstruierbarkeit eine wichtige Rolle.

Geht man von natürlichen, d. h. gestörten Meßdaten aus, so ist wegen der Schlechtgestellttheit des Problems eine stabile Konstruktion der Lösung ohne Regularisierung nicht möglich. Diese wurde hier durch eine Methode der Datenglättung vorgenommen, die mathematisch die Bestimmung der singulären Werte einer Einbettungsabbildung beinhaltet. Die so vorbehandelten Daten sind für eine stabile Anwendung der nichtlinearen Rekonstruktionsabbildung geeignet. Letztere konnte in Spezialfällen explizit gefunden werden.

3. Die Identifikation von Koeffizienten in quasilinearen Differentialgleichungen

Betrachtet wurde das Problem der numerischen Bestimmung des Koeffizienten $a(u)$ in einer quasilinearen Differentialgleichung der Form

$$-(a(u)u_x)_x = f(x)$$

mit Robin-Randbedingungen. Diese Aufgabe stellt einen Spezialfall der in [4] und [5] in Bezug auf die Identifizierbarkeit untersuchten Probleme dar. Als Daten sind Werte der Funktion u in einigen wenigen Meßpunkten gegeben. Eine direkte Diskretisierung der Lösungsformel mit Hilfe von Meyer-Wavelets lieferte brauchbare numerische Resultate. Ein anderer Lösungsweg ist die Transformation des inversen Problems in eine Integralgleichung erster Art. Die Untersuchungen werden fortgeführt, die Resultate sind verallgemeinerungsfähig.

Literatur

1. G. BRUCKNER, S. HANDROCK-MEYER, H. LANGMACH, *On the identification of soil transmissivity from measurements of the groundwater level*, WIAS-Preprint No. 250, Berlin 1996; erscheint in: Proceedings of the Third Hellenic European Conference on Mathematics and Informatics, E. A. Lipitakis, ed., Hellenic Mathematical Society, Athen, 1996.
2. G. BRUCKNER, M. YAMAMOTO, *On the determination of point sources by boundary observations: Uniqueness, stability and reconstruction*, WIAS-Preprint No. 252, Berlin 1996.
3. G. BRUCKNER, M. YAMAMOTO, *Identification of point sources by boundary observations: Uniqueness, stability and reconstruction*, erscheint in: Proceedings of the Third Hellenic European Conference on Mathematics and Informatics, E. A. Lipitakis, ed., Hellenic Mathematical Society, Athen, 1996.
4. S. HANDROCK-MEYER, *Identifiability of distributed parameters for a class of quasilinear differential equations*, erscheint in: Journal of Inverse and Ill-Posed Problems.
5. S. HANDROCK-MEYER, *Identifiability of distributed physical parameters*, in: Parameter Identification and Inverse Problems in Hydrology, Geology and Ecology, J. Gottlieb and P. DuChateau, eds., Kluwer Academic Publishers, 1996, pp. 225–231.

Multiskalen- und Randelementmethoden

Bearbeiter: A. Kunoth, S. Pröbldorf, A. Rathsfeld, J. Schult

Kooperation: S. Bertoluzza (Istituto di Analisi Numerica, Pavia), W. Dahmen, K. Urban (RWTH Aachen), R. Schneider (TU Chemnitz-Zwickau), A. Kurdila (Texas A&M University), B. N. Khoromskij (Joint Institute for Nuclear Research, Dubna), W. McLean (University of New South Wales, Sydney), I. Saad Abdel-Fattah (University of Mansoura)

Förderung: DFG-Sachbeihilfe

Innerhalb dieses Projektes wurden Grundlagenforschungen zu folgenden Themen durchgeführt:

1. Multiskalenmethoden zur numerischen Behandlung von Operatorgleichungen (DFG-Projekt)

Als essentielles Ingredient von Multiskalenverfahren für Operatorgleichungen [3], [5] sind geeignete, hinreichend allgemeine Waveletbasen unerlässlich. Solche wurden auf einem Intervall in [4] konstruiert (und sind damit über Tensorproduktbildung auf beliebige Rechteckgebiete übertragbar).

Da sich diese Basen in ersten numerischen Tests als noch nicht optimal konditioniert erwiesen haben, werden entsprechende Modifikationen untersucht. Für die Implementierung wurde als erstes Beispiel einer elliptischen Pseudodifferentialgleichung eine einfache partielle Differentialgleichung diskretisiert. Dabei wurde das Problem der expliziten Behandlung von Dirichlet-Randbedingungen durch die theoretisch wohlbegründete Verwendung Lagrangescher Parameter angegangen. Dieser Ansatz der getrennten Behandlung von Randbedingungen wurde auch bei der Untersuchung von numerischen Verfahren zur Lösung optimaler Steuerungsprobleme verfolgt [9]. Die Prüfung der Effizienz dieser Methode in numerischen Experimenten läßt sich mit gewissen Modifikationen in die obigen Versuche einbetten und ist geplant.

Des weiteren wurden Gebietszerlegungsmethoden für Galerkinverfahren für elliptische partielle Differentialgleichungen untersucht, um durch die mögliche Koppelung das Potential verschiedener Diskretisierungsmethoden basierend etwa auf Finiten Elementen oder Wavelets ausnutzen zu können [2].

Einige grundlegende Software-Routinen bei der Verwendung von Wavelets in der objektorientierten Implementierung von Diskretisierungsverfahren für Pseudodifferentialgleichungen sind in [1] dokumentiert.

2. Stabilität numerischer Verfahren für periodische Pseudodifferentialoperatoren mit Multiwavelets als Ansatzfunktionen

Von den Ingenieuren werden vielfach Randelementmethoden mit Multiwavelets als Ansatzfunktionen (z. B. Splines mit Defekt) verwendet. Eine entsprechende Stabilitäts- und Konvergenzanalyse ist bisher jedoch nur in Spezialfällen entwickelt.

Im Rahmen dieses Teilprojektes wurde die Stabilität verallgemeinerter Galerkin-Petrov-Verfahren für periodische Pseudodifferentialgleichungen mit Multiwavelets als Ansatzfunktionen durch das Verhalten des numerischen Symbols charakterisiert. Hierbei ist

das numerische Symbol durch die Fourier-Transformation der Multiskalierungsfunktion und der Testfunktionale sowie durch das Hauptsymbol des Pseudodifferentialoperators bestimmt. Als Hilfsmittel wurden diskrete Sobolev-Normen eingeführt, wofür eine äquivalente Charakterisierung der Strang-Fix-Bedingung notwendig war. Für die Konstruktion der zu den Testfunktionalen dualen Funktionen wurde ein Reduktionsalgorithmus vorgeschlagen. Damit wurden entsprechende Ergebnisse aus [6] für Waveletalgorithmen und aus [10] für Randelementmethoden, die Splines mit Defekt benutzen, auf wichtige anwendungsrelevante Fälle verallgemeinert. Die Untersuchungen sollen in Richtung Fehleranalysis und Matrixkompressionen fortgesetzt werden.

3. Schnelle Löser mit harmonischen Poincaré-Steklov-Operatoren

In [7] wurden asymptotisch optimale Algorithmen für FE-Diskretisierungen der inneren und äußeren Poincaré-Steklov-Operatoren zur Laplace-Gleichung in ebenen polygonalen Gebieten bei Gitterverfeinerung in der Nähe der Eckpunkte entwickelt. Sowohl die Komplexität als auch der Speicherbedarf sind bei diesen Algorithmen (quasi-)linear. Die Methode basiert auf der Anwendung eines Multilevel-Interface-Lösers auf die Schur-Komplement-Reduktion bei Kopplung der Interface-Verfeinerungen mit geeigneten Dekompositionen des polygonalen Gebietes (vgl. auch [8]).

4. Quadraturformelmethode zur Lösung von zweidimensionalen singulären Integralgleichungen

Seit Beginn der 90er Jahre gibt es Stabilitätsuntersuchungen zu Kollokationsverfahren für mehrdimensionale stark singuläre Integralgleichungen auf glatten Mannigfaltigkeiten (vgl. [11]). Wenn man sich nun für vollständige Diskretisierungen dieser semidiskreten Verfahren interessiert und nach Algorithmen mit minimalem Aufwand sucht, dann steht man vor der Frage nach der Stabilität von einfachen Quadraturformelverfahren. Eine vollständige Antwort scheint wie auch schon bei den Kollokationsverfahren sehr schwierig. Partielle Ergebnisse sind dagegen möglich. So konnte für reguläre quadratische Gitter gezeigt werden, daß die lokale Stabilität zur Invertierbarkeit eines sogenannten numerischen Symbols äquivalent ist. Die globale Stabilität ergibt sich aus der lokalen Stabilität in jedem Punkt der zweidimensionalen Mannigfaltigkeit. Insbesondere konnte die Stabilität und Konvergenz des Quadraturformelverfahrens über regulären quadratischen Gittern für Integralgleichungen mit Mikhlin-Giraud-Kernen gezeigt werden (siehe [12]). Die Mikhlin-Giraudsche Symmetriebedingung des Kernes ist für interessante singuläre Randintegralgleichungen, z. B. für die des Problems der schiefen Ableitung (mit Anwendungen in Geodäsie und Theorie der Gezeiten), erfüllt.

Num.Symb. —

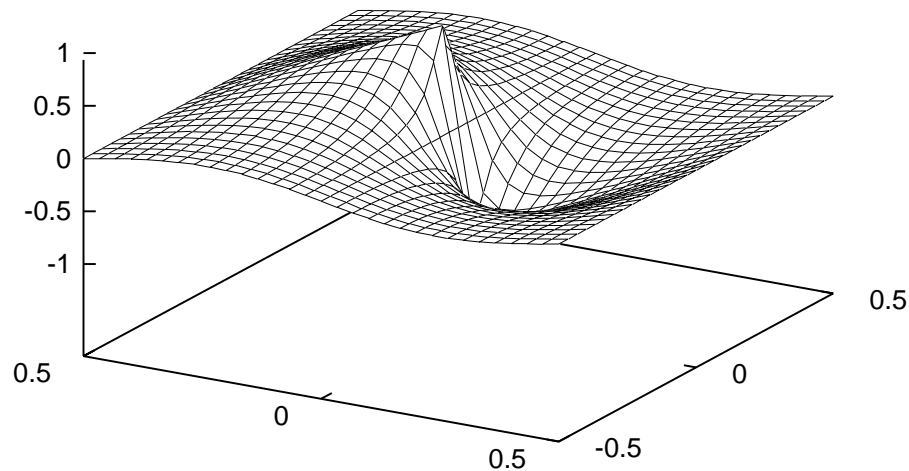


Abb. 1: Numerisches Symbol des Integraloperators mit Kern

$$k((x_1, x_2), (y_1, y_2)) = \frac{1}{2\pi} \frac{(x_1 - y_1)}{\sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2}^3}$$

Literatur

1. T. BARSCH, A. KUNOTH, K. URBAN, *Towards object oriented software tools for numerical multiscale methods for p.d.e.s using wavelets*, Bericht Nr. 127, RWTH Aachen, Juni 1996; erscheint in: *Multiscale Wavelet Methods for Partial Differential Equations*, W. Dahmen, A. Kurdila and P. Oswald (eds.), Academic Press.
2. S. BERTOLUZZA, A. KUNOTH, *Multilevel preconditioning for the stabilized three-field-formulation in domain decomposition*, in Vorbereitung.
3. W. DAHMEN, A. KUNOTH, K. URBAN, *A wavelet-Galerkin method for the Stokes equations*, *Computing*, **56**, No. 3 (1996), pp. 259–302.
4. W. DAHMEN, A. KUNOTH, K. URBAN, *Biorthogonal spline-wavelets on the interval – Stability and moment conditions*, WIAS-Preprint No. 265, Berlin 1996.
5. W. DAHMEN, A. KUNOTH, R. SCHNEIDER, *Operator equations, multiscale concepts and complexity*, in *Lectures in Applied Mathematics*, Vol. **32**, J. Renegar, M. Shub and S. Smale (eds.), American Mathematical Society, 1996, pp. 225–261.
6. W. DAHMEN, S. PRÖSSDORF, R. SCHNEIDER, *Wavelet approximation methods for pseudodifferential equations I: Stability and convergence*, *Math. Zeitschrift*, **215** (1994), pp. 583–620.
7. B. N. KHOROMSKIJ, S. PRÖSSDORF, *Fast computations with the harmonic Poincaré-Steklov operators on nested refined meshes*, WIAS-Preprint No. 220, Berlin 1996; eingereicht in: *Adv. Comput. Math.*

8. B. N. KHOROMSKIJ, S. PRÖSSDORF, *Multilevel preconditioning on the refined interface and optimal boundary solvers for the Laplace equation*, Adv. Comput. Math., **4** (1995), pp. 331–355.
9. A. KUNOTH, A. KURDILA, *Multilevel preconditioning of saddle point problems in optimal control, Part I: Theory, Part II: Numerical examples*, in Vorbereitung.
10. W. MCLEAN, S. PRÖSSDORF, *Boundary element collocation methods using splines with multiple knots*, Numer. Math., **74** (1996), pp. 419–451.
11. S. PRÖSSDORF, R. SCHNEIDER, *A spline collocation method for multidimensional strongly elliptic pseudodifferential operators of order zero*, Integral Equations Operator Theory, **14** (1991), pp. 399–435.
12. I. SAAD ABDEL-FATTAH, *Stability analysis of quadrature methods for two-dimensional singular integral equations*, Doktorarbeit, eingereicht an der Universität von Mansoura (Betreuer: A. Rathsfeld).

4.5 Forschungsgruppe Stochastische Systeme mit Wechselwirkung

4.5.1 Zusammenfassung

Entsprechend der allgemeinen Aufgabenstellung der Forschungsgruppe, komplexe Systeme mit vielen wechselwirkenden Komponenten vom Standpunkt der Wahrscheinlichkeitstheorie zu untersuchen, wurden die langfristig angelegten Projekte der Vorjahre weiterverfolgt. Dabei wurde verstärkt auf den Aspekt der mathematischen Herleitung makroskopischer Modelle aus mikroskopischen Theorien hingearbeitet. In Hinblick hierauf wurde die Untersuchung von Modellen mit langreichweitiger Wechselwirkung (Kac-Modelle) zu einem neuen Schwerpunkt der Arbeit, wobei ungeordneten Systemen das Hauptinteresse gilt. Auch auf dem Gebiet der Verzweigungsprozesse wurden erhebliche Fortschritte für Prozesse in ungeordneten („katalytischen“) Medien erzielt. Hier besteht ein enger Zusammenhang zu Reaktions-Diffusionsgleichungen mit singulären Koeffizienten.

Ebenfalls sehr intensiv weiterbetrieben wurde die mikroskopische Theorie der Phasentrennung, wo erstmals Resultate für dreidimensionale Modelle erzielt wurden. In der Entwicklung stochastischer Algorithmen zur Lösung kinetischer Gleichungen konnten erhebliche Verbesserungen der Konvergenzraten erzielt werden, insbesondere durch ein neuartiges Verfahren zur Reduktion stochastischer Fluktuationen.

4.5.2 Projekte

Tieftemperaturphasen in Modellen mit langreichweitiger Wechselwirkung

Bearbeiter: A. Bovier

Kooperation: M. Zahradník (Karls-Universität Prag), P. Picco, V. Gayrard (CPT Marseille)

Kac-Modelle sind Systeme mit Wechselwirkungen von endlicher, aber sehr weiter Reichweite. Sie stellen ein Bindeglied zwischen Molekularfeld-Theorien und realistischeren Modellen mit kurzreichweitiger Wechselwirkung dar. Ursprünglich wurden diese Modelle in den 60er Jahren eingeführt, um eine mikroskopische Herleitung der „Maxwell-Konstruktion“ zu geben, mit der das Problem nicht-eindeutiger Zustandsgleichungen in der van der Waals Theorie ad hoc beseitigt wurde. Ein weitaus interessanterer Aspekt dieser Modelle wurde jedoch erst in den letzten Jahren intensiv untersucht: die rigorose Herleitung von Kontinuums-Theorien (Ginzburg-Landau-Theorie, Phasefeldmodelle), wie sie im Rahmen der mesoskopischen Modellierung Verwendung finden, mittels Techniken aus der Theorie der großen Abweichungen. Aus diesem Grunde wollen wir die Untersuchung von Kac-artigen Modellen zu einem zentralen Thema unserer Arbeit machen. Dabei stehen zwei Zielrichtungen im Mittelpunkt:

- (i) Die Untersuchung von *ungeordneten* Systemen mit Kac-Wechselwirkung (Spin-Gläser, Hopfield-Modelle, Random-Field-Modelle),
- (ii) Phasentrennung und Gleichgewichtsformen.

Zum ersten Thema wurde in [1] ein erstes Resultat in einem eindimensionalen Modell, dem Kac-Hopfield-Modell, erzielt. Dieses ist durch eine Hamiltonfunktion

$$H_\gamma(\sigma; \xi) \equiv -\frac{1}{2} \sum_{i,j \in Z} J_\gamma(i-j) \sum_{\mu=1}^{M(\gamma)} \xi_i^\mu \xi_j^\mu \sigma_i \sigma_j$$

formal beschrieben. Dabei sind $\sigma_i \in \{-1, 1\}$ die dynamischen Variablen, die ξ_i^μ sind Zufallsvariablen, die in das Modell als Parameter eingehen; die Funktion $J_\gamma(i)$ ist positiv und identisch Null, wenn $|i| > 1/\gamma$, ihr Integral ist auf eins normiert. Von Interesse sind die ($M(\gamma)$ -dimensionalen) mesoskopischen Ordnungsparameter $m_x(\sigma; \xi) \equiv \sum_{i \in x} \xi_i \sigma_i$; dabei bezeichnet x einen mesoskopischen Block der Größe L , wo $1 \ll L \ll 1/\gamma$. In einem geeigneten Sinn ist die Gibbs'sche Verteilung dieser Ordnungsparameter durch ein Freies Energiefunktional

$$F(m; \xi) \equiv \int dx \int dy \frac{1}{2} \|m_x - m_y\|_2^2 + \int dx f_x(m_x; \xi)$$

kontrolliert. Dabei sind die f_x die freien Energien des Hopfieldmodells und räumlich zufällig. Damit ließen sich in [1] Aussagen über die Form typischer mesoskopischer Profile der Ordnungsparameter beweisen. Die zur Anwendung gebrachten Techniken benutzen noch stark die eindimensionale Natur des Problems.

In höherdimensionalen Modellen stößt man auf erhebliche Schwierigkeiten, da die üblichen Techniken von Tieftemperaturentwicklungen und der Pirogov-Sinai-Theorie in der vorliegenden Form nicht für die Behandlung langreichweitiger (und dabei schwacher) Wechselwirkungen

ausgelegt sind. Ziel des Projektes ist es, entsprechende Techniken für diesen Fall zu entwickeln. Ein erster Schritt wurde dazu in [2] getan. Es wurde eine Konturdarstellung für ferromagnetische Kac-Ising-Modelle gegeben und mit deren Hilfe eine scharfe Abschätzung an die kritische Temperatur bewiesen. Dabei wurde bislang noch die Spin-Flip-Symmetrie des Modells ausgenutzt.

Im nächsten Schritt sollen nun Tieftemperaturentwicklungen gefunden werden, mit deren Hilfe dann auch kompliziertere Modelle ohne Symmetrie behandelbar werden. Dies wird insbesondere zur Untersuchung der uns vornehmlich interessierenden ungeordneten Kac-Modelle unabdingbar. Das Projekt wurde durch die EU (CHRX-CT93-0411) gefördert.

Literatur

1. A. BOVIER, V. GAYRARD, P. PICCO, *Distribution of overlap profiles in the one-dimensional Kac-Hopfield model*, WIAS-Preprint No. 221, Berlin 1996; erscheint in: Commun. Math. Phys. (1997).
2. A. BOVIER, M. ZAHRADNÍK, *The low-temperature phase of Kac-Ising models*, WIAS-Preprint No. 240, Berlin 1996; erscheint in: J. Statist. Phys., **87** (1997).

Spin-Gläser und Neurale Netze

Bearbeiter: A. Bovier, Ch. Külske

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

Eine ausführliche Darstellung der Fragestellungen, denen wir uns in diesem Projekt widmen, wurde im Jahresbericht 1994 gegeben. Dieses Jahr stand im Zeichen der Organisation eines Workshops und eines damit verbundenen Buchprojekts zu diesem Thema [1]. Dazu wurde in einem umfänglichen Übersichtsartikel [2] zum Hopfield-Modell unser Zugang zu diesem Modell detailliert dargestellt, wobei gleichzeitig unsere früheren Resultate auf eine wesentlich größere Klasse von Modellen verallgemeinert wurden. Daneben konnten eine Reihe wesentlicher neuer Resultate für das eigentliche Hopfield-Modell erzielt werden. Entscheidend war hier die Erkenntnis, wie die in [3] bewiesene lokale Konvexität der „Ratenfunktion“ $\Phi(x)$ in einem Bereich der Modellparameter β und α benutzt werden kann, um exakte Resultate über die Gibbs-Maße zu beweisen. Insbesondere kann damit die Wahrscheinlichkeitsverteilung der zufälligen Gibbs-Maße des Modells im thermodynamischen Limes exakt beschrieben werden. Im weiteren ergibt sich eine rigorose Rechtfertigung heuristischer physikalischer Aussagen zur freien Energie des Modells. Die Ergebnisse sind in Teilen in [2] dargestellt, eine detaillierte Arbeit ist in Vorbereitung [4]. Als Nebenresultat konnte außerdem ein zentraler Grenzwertsatz für die Verteilung der Ordnungsparameter für den Fall bewiesen werden [5], daß die Zahl der „pattern“ langsamer als linear mit der Systemgröße wächst.

Ein wesentlicher neuer Gesichtspunkt in der Untersuchung ungeordneter Systeme ergibt sich durch ein von Newman und Stein [6] vorgeschlagenes Konzept des „Metazustandes“, mit dem in präziser Weise das Konvergenzverhalten der Wahrscheinlichkeitsverteilung von Gibbs Zuständen ungeordneter Systeme im thermodynamischen Limes beschrieben wird. Külske [7] hat diesbezüglich während eines Forschungsaufenthaltes am WIAS solche Objekte in einer Reihe von Beispielen explizit konstruiert und damit nicht unwesentlich zum Verständnis dieser neuartigen Begrifflichkeit beigetragen. Eine weitere Analyse dieser Objekte im Rahmen der von uns untersuchten Modelle ist in Arbeit [8].

Das Projekt wurde durch die EU (CHRX-CT93-0411) und die DFG gefördert.

Literatur

1. A. BOVIER, P. PICCO (HRSGB.), *Mathematics of spin glasses and neural networks*, erscheint in: Progress in Probability, Birkhäuser, Boston, 1997.
2. A. BOVIER, V. GAYRARD, *Hopfield models as generalized random mean-field models*, WIAS-Preprint No. 253, Berlin 1996; erscheint in: Mathematics of spin glasses and neural networks, A. Bovier und P. Picco (Hrsgeb.), Progress in Probability, Birkhäuser, Boston, 1997.
3. A. BOVIER, V. GAYRARD, *The retrieval phase of the Hopfield model: A rigorous analysis of the overlap distribution*, WIAS-Preprint No. 161, Berlin 1996; erscheint in: Probab. Theor. Rel. Fields, **107** (1996).
4. A. BOVIER, V. GAYRARD, in Vorbereitung.

5. A. BOVIER, V. GAYRARD, *An almost sure central limit theorem for the Hopfield model*, WIAS-Preprint No. 283, Berlin 1996; eingereicht in: Markov Proc. Rel. Fields (1996).
6. CH. M. NEWMAN, D. L. STEIN, *Thermodynamic chaos and the structure of short-range spin glasses*, erscheint in: Mathematics of spin glasses and neural networks, A. Bovier und P. Picco (Hrsgb.), Progress in Probability, Birkhäuser, Boston, 1997.
7. CH. KÜLSKE, *Metastates in disordered mean field models: Random field and Hopfield models*, WIAS-Preprint No. 260, Berlin 1996; erscheint in: J. Stat. Phys. (1997).
8. A. BOVIER, V. GAYRARD, CH. KÜLSKE, *Convergence properties of Gibbs measures in a Hopfield type model*, in Vorbereitung.

Mikroskopische Theorie der Phasentrennung

Bearbeiter: D. Ioffe

Kooperation: E. Bolthausen (Universität Zürich), J.-D. Deuschel (TU Berlin), G. Giacomin (Universität Zürich), C.-E. Pfister (EPF Lausanne), R. S. Schonmann (UCLA, Los Angeles)

Die rigorose Analyse von kristallinen Gleichgewichtsformen („Wulff-Konstruktion“) aus der mikroskopischen Theorie wechselwirkender Teilchen ist in den letzten Jahren zunehmend als wichtiges Aufgabenfeld der Statistischen Mechanik entdeckt worden. Bisher liegen befriedigende Ergebnisse allerdings erst für zweidimensionale Modelle vor, und das einzige Beispiel, für das eine vollständige Behandlung des Phänomens der Phasentrennung durchgeführt wurde, ist das zweidimensionale Ising-Modell bei sehr tiefen Temperaturen (durch Dobrushin, Kotecký und Schlosman). In [1] haben wir diese Ergebnisse im wesentlichen auf die gesamte Tieftemperaturphase ausgeweitet. Es wird dabei gezeigt, daß im kanonischen Ensemble die Phasen sich entlang einer einzigen großen Kontur, deren Form asymptotisch durch die Wulff-Konstruktion bestimmt ist, entmischen. Unser Zugang benutzt allerdings noch immer die exakt bekannte Form der Zweipunkt-Korrelationsfunktion im zweidimensionalen Ising-Modell und ist somit auf die spezifische Situation in diesem exakt lösbaren Modell beschränkt. Von dieser Beschränkung wollen wir uns in Zukunft lösen. So sollen in [2] die analytisch geometrischen Eigenschaften makroskopischer Kristalle aus der Struktur zugrundeliegender lokaler Grenzwertsätze im mikroskopischen Modell hergeleitet werden. Bisher konnte dazu für die selbstvermeidende Irrfahrt in zwei Dimensionen gezeigt werden, daß das Analogon des „Wulff-shape“ für alle unterkritischen Temperaturen ein konvexer analytischer Körper ist.

Das einfachste nichttriviale dreidimensionale mikroskopische Modell eines kristallinen Substrates auf einer Oberfläche ist ein dreidimensionales Gas Gaußscher Tröpfchen unter der Nebenbedingung konstanten Volumens. Dieses Modell wurde in [3] untersucht. Dabei wurde als zugrundeliegende Wahrscheinlichkeitsverteilung das Maß

$$\mathbb{P}_N(d\phi) = \frac{1}{Z_N} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{\langle x,y \rangle} (\phi(x) - \phi(y))^2\right) \prod_x (d\phi(x) + e^J \delta_0(d\phi(x)))$$

angenommen, wobei J eine mikroskopische Konstante ist, die die Differenz zwischen den Kristall-Wand- bzw. Gas-Wand-Potentialen angibt. Wir haben gezeigt, daß für große Werte von J die geeignet skalierten typischen mikroskopischen Konfigurationen scharf um die Lösung des deterministischen Variationsproblems

$$\int |\nabla u|^2 + \Delta_f |\text{supp} u| \longrightarrow \min$$

für festes Volumen konzentriert sind. Dabei ist $\Delta_f = \Delta_f(J)$ eine positive Konstante. In einer etwas einfacheren Situation, nämlich in dem Fall, wo die Grundfläche des Tropfens festgehalten wird, wurde auch eine Klasse nicht-Gaußscher Modelle untersucht [4]. Das hier bewiesene Resultat läßt sich als eine höherdimensionale Verallgemeinerung eines Prinzips Großer Abweichungen im Pfadraum interpretieren. Dabei ist die Ratenfunktion genau die Oberflächenenergie,

$$\Sigma(u) = \int \sigma(\nabla u) dx,$$

wobei σ die richtungsabhängige Oberflächenspannung des Modells ist. Daraus ergibt sich ein rigoroser Beweis für die Konzentration mikroskopischer Oberflächen um die Fläche minimaler Energie unter der Nebenbedingung konstanten Volumens.

Das Projekt wurde durch die EU (CHRX-CT93-0411) und NSF gefördert.

Literatur

1. D. IOFFE, R. S. SCHONMAN, *2D Ising model: The DKS theory up to T_c* , in Vorbereitung.
2. D. IOFFE, C.-E. PFISTER, *Orstein-Zurnike behaviour of connectivities and analyticity of two-dimensional shapes*, in Vorbereitung.
3. E. BOLTHAUSEN, D. IOFFE, *Harmonic crystal on the wall: A microscopic approach*, WIAS-Preprint No. 269, Berlin 1996; erscheint 1997 in: Commun. Math. Phys.
4. J.-D. DEUSCHEL, D. IOFFE, G. GIACOMIN, *On a multidimensional sample path LD principle and related droplet construction*, in Vorbereitung.

Elektronentransport in ungeordneten Materialien

Bearbeiter: A. Liemant

Kooperation: L. Brehmer (Universität Potsdam)

Die interdisziplinäre Zusammenarbeit mit der Universität Potsdam wurde fortgeführt. Ein wesentlicher Teil dieser Zusammenarbeit ist die theoretische Behandlung des Ladungstransportes in amorphen Festkörpern. Ausgangspunkt der Untersuchungen ist die Annahme, daß auf mikroskopischer Ebene die Leitfähigkeit amorpher Materialien auf einen Hoppingtransport der Elektronen zurückgeführt werden kann. Die Elektronen springen auf einem ungeordneten Gitter von räumlich und energetisch lokalisierten Zuständen (x, E) gemäß einer gegebenen Sprungrate unter Berücksichtigung des Pauliprinzips, das Doppelbesetzungen ausschließt. Ungeordnet heißt, daß sowohl die räumlichen Positionen als auch die Energiezustände der Gitterpunkte zufällig verteilt sind (zufälliges Medium). Das eigentliche Ziel ist die Beantwortung der folgenden Fragen: Können makroskopische elektrische Leitungseigenschaften mathematisch streng aus dem komplizierten mikroskopischen Hoppingmechanismus hergeleitet werden? Wie hängt dann die makroskopische Leitfähigkeit von den mikroskopischen Parametern (zufälliges Medium, Sprungrate) ab?

Notwendige Bedingungen an die mikroskopische Struktur sind die Homogenität des zufälligen Mediums, die hinreichende Kleinheit der Sprungdistanzen und eine gewisse Symmetrie der Sprungraten. Eine wesentliche Vereinfachung liegt vor, wenn bereits auf mikroskopischer Ebene der Elektronenstrom als ein „Gradient“ dargestellt werden kann (Gradientenbedingung), wie es bei einem periodischen Gitter der Fall ist. In einem zufälligen Medium jedoch ist die Gradientenbedingung im allgemeinen nicht erfüllt. In diesem physikalisch interessanteren Fall sind die grundlegenden Fragen noch ungelöst. Geschlossene Ausdrücke in Termen der mikroskopischen Modellparameter sind jedenfalls im allgemeinen nicht zu erwarten. Für langreichweitige Sprungraten haben wir für einen sonst recht allgemeinen Ansatz eine (Mean Field) Approximation für die makroskopischen Transportkoeffizienten berechnet. Wir erhalten für die elektrische Leitfähigkeit $\sigma(h)$ den geschlossenen Ausdruck

$$\sigma(h) \approx \frac{N^2}{2d} S^2 \langle v \rangle,$$

mit $S^2 = \int |x|^2 w(|x|) dx$ und

$$\langle v \rangle = \iint s(E, Q) ((1 + \exp(\beta(\zeta - E)))(1 + \exp(\beta(Q - \zeta)))^{-1} g(E)g(Q) dE dQ.$$

Es ist $w(|y - x|)s(E, Q) \exp(\beta \mathfrak{F} \cdot (y - x)/2)$ die Rate für einen Sprung von (x, E) nach (y, Q) , β die inverse Temperatur, ζ das chemische Potential, N die räumliche Konzentration der lokalisierten Zustände, h die relative Elektronenkonzentration, d die Raumdimension, $g(E)$ die Energiezustandsdichte und \mathfrak{F} ein äußeres Feld.

Literatur

1. A. LIEMANT, L. BREHMER, *A mean field approximation for hopping transport in disordered materials*, WIAS-Preprint No. 294, Berlin 1996.

Katalytische Verzweigungsstrukturen

Bearbeiter: K. Fleischmann

Kooperation: D. A. Dawson (Fields Institute, Toronto), A. M. Etheridge (Queen Mary and Westfield College, London), A. Klenke (Universität Erlangen-Nürnberg), G. Leduc (Université du Québec, Montréal), C. Mueller (University of Rochester), V. A. Vatutin (Steklov Mathematical Institute, Moskau)

Eine ausführliche Beschreibung der Motivation für dieses Forschungsgebiet wurde bereits im Jahresforschungsbericht 1995, S. 133, gegeben. Dort wurde auch berichtet, daß im vergangenen Jahr eine stetige Super-Brownsche Bewegung in einem Super-Brownschen Medium konstruiert wurde. Intuitiv gesehen, beschreibt dies eine Population von Teilchen, die sich im \mathbb{R}^d chaotisch bewegen und kritisch binär verzweigen. Die Verzweigung ist allerdings nur in Gegenwart von Katalysatoren möglich, die sich selbst auch chaotisch bewegen und kritisch binär verzweigen. Das Hauptgewicht lag in diesem Jahr auf dem Studium des Langzeitverhaltens dieses stochastischen Prozesses im katalytischen Medium. Initiiert wurde dies bereits in [1] (unterstützt von der DFG; Fl 270/1-1). Dort wurde gezeigt, daß im Eindimensionalen Persistenz gilt (das heißt, daß im Langzeitlimit kein Verlust von Intensitäten auftritt). Dies ist ein neuartiger Effekt gegenüber (niedrigdimensionalen) Verzweigungsmodellen im konstanten Medium. In [2] konnte dann bestätigt werden, daß der dreidimensionale Fall auch persistent ist. Dies wurde vermutet, da hier der Katalysatorenprozeß eine Grenzverteilung besitzt, so daß mit einem nahezu stationären Medium eine gewisse Analogie zum konstanten Medium vorliegt.

Die Überraschung besteht aber nun darin, und das ist das Hauptergebnis in diesem Jahr, daß auch in der kritischen Dimension $d = 2$ Persistenz vorliegt [4]. Obwohl in dieser Dimension der Katalysatorenprozeß lokal ausstirbt (wie in $d = 1$), kommen (im Unterschied zu $d = 1$) zu späten Zeitpunkten immer wieder größer und größer werdende Katalysatorenklumpen zurück, die dann vorrangig die vorhandene Population (lokal) vernichten (kritische Verzweigung mit unendlicher Rate degeneriert zum Killen). Deshalb wurde beispielsweise auf der Tagung über Verzweigungsprozesse in Oberwolfach 1995 massiv für ein Aussterben des Prozesses „plädiert“. Wir haben nun nachgewiesen, daß diese Intuition trügerisch ist. Hinzu kommt, daß uns eine überraschend einfache Beweisführung gelang. Die Kernaussage besteht darin, daß in allen Dimensionen die Verteilungsgesetze der zufälligen (bezüglich des katalytischen Mediums) Varianzen relativ kompakt sind, im Unterschied zum klassischen Fall, bei dem in niederen Dimensionen die Varianzen unbeschränkt wachsen, und die Populationen (lokal) sterben. Diese relative Kompaktheit folgt aus dem Langzeitverhalten der L^1 -Norm der Lösung einer gewissen Reaktions-Diffusions-Gleichung, für die ein einfaches Vergleichsargument gefunden wurde.

In [5] wird darüber hinaus gezeigt, daß auch in der kritischen Dimension die Grenzpopulation eindeutig bestimmt ist, d. h. daß Konvergenz in Verteilung vorliegt.

Über eine Dualitätsbeziehung können die oben erwähnten Forschungsergebnisse als ein probabilistischer Beitrag zum Studium einer Klasse von katalytischen Reaktions-Diffusions-Gleichungen verstanden werden. Reaktionen sind hier nur in Gegenwart eines Katalysators möglich. Dieser ist zeitlich und räumlich stochastisch veränderlich, typischerweise räumlich nur in „singulären Mengen“ vorhanden und obendrein einem stochastischen Verzweigungsmechanismus unterworfen. In der Sprache dieser katalytischen Reaktions-Diffusions-Gleichungen geben die vorgestellten Resultate Auskunft über das Langzeitverhalten der L^1 -Norm der Lösungen. Im Unterschied zum

Fall einer konstanten Reaktionsrate geht die L^1 -Norm für $d = 1, 2$ nicht gegen Null.

Eine weitere Aktivität [3] bestand in diesem Jahr darin, einen Beitrag zur allgemeinen Strukturtheorie von Superprozessen zu leisten. Verzweigungsprozesse in katalytischen Medien können als spezielle Superprozesse verstanden werden, bei denen die Verzweigung eines typischen Teilchens durch ein stetiges additives Funktional gesteuert wird. Wir wollen die stetige Abhängigkeit des Verteilungsgesetzes des Superprozesses von diesem Verzweigungsfunktional nachweisen. Als Anwendung ergibt sich hieraus eine Reihe von sehr allgemeinen Regularitäts- und Approximationssätzen.

Um zu einem Verständnis des Einflusses des katalytischen Mediums auf Verwandtschaftsbeziehungen der Reaktoren zu kommen, wurde begonnen, reduzierte Lebensbäume für subkritische Galton-Watson-Prozesse in zufälligen Medien zu untersuchen [6].

Literatur

1. D. A. DAWSON, K. FLEISCHMANN, *A continuous super-Brownian motion in a super-Brownian medium*, erscheint in: Journ. Theoret. Probab., 1997.
2. D. A. DAWSON, K. FLEISCHMANN, *Longtime behavior of a branching process controlled by branching catalysts*, WIAS-Preprint No. 261, Berlin 1996; eingereicht in: Stoch. Proc. Appl.
3. D. A. DAWSON, K. FLEISCHMANN, G. LEDUC, *Continuous dependence of a class of superprocesses on branching parameters, and applications*, in Vorbereitung.
4. A. M. ETHERIDGE, K. FLEISCHMANN, *Persistence of a two-dimensional super-Brownian motion in a catalytic medium*, WIAS-Preprint No. 277, Berlin 1996, eingereicht bei: Probab. Theory Relat. Fields.
5. K. FLEISCHMANN, A. KLENKE, *Convergence to a non-trivial equilibrium for two-dimensional catalytic super-Brownian motion*, WIAS-Preprint No. 305, Berlin 1996.
6. K. FLEISCHMANN, V. A. VATUTIN, *Reduced subcritical Galton-Watson processes in a random environment*, WIAS-Preprint No. 306, Berlin 1996.

Stochastische Teilchensysteme und Approximation der Boltzmann-Gleichung

Bearbeiter: W. Wagner

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

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

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

mit

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

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

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

$$\left(x_i(t), v_i(t) \right), \quad i = 1, \dots, n, \quad t \geq 0, \quad (3)$$

mit deren Hilfe das Verhalten des realen Gases approximiert wird. Hier bezeichnen $x_i(t) \in D \subset \mathcal{R}^3$ und $v_i(t) \in \mathcal{R}^3$ jeweils die Position und die Geschwindigkeit des i -ten Teilchens zur Zeit t .

Die Forschungsarbeit läßt sich inhaltlich in die folgenden beiden Richtungen unterteilen:

1. Untersuchung des asymptotischen Verhaltens ($n \rightarrow \infty$) stochastischer Teilchensysteme (3) vom Boltzmann-Typ (unabhängige Bewegung und paarweise Wechselwirkung);
2. Entwicklung und Testung stochastischer Partikelverfahren zur numerischen Behandlung der Boltzmann-Gleichung (1).

Eine wichtige Frage im Zusammenhang mit der praktischen Anwendbarkeit von stochastischen Teilchensystemen (3) besteht in der Untersuchung des Konvergenzverhaltens bei wachsender Teilchenzahl n . In den vergangenen Jahren wurden hierbei für den Fall eines fixierten endlichen Zeitintervalls wichtige Ergebnisse erzielt (siehe [1]). Gegenwärtig steht die Untersuchung des stationären Falls ($t \rightarrow \infty$) im Mittelpunkt des Interesses. In der Arbeit [2] konnte dazu ein erstes wesentliches Ergebnis erzielt werden. Es gelang, die Ordnung des Fehlers bei der Approximation

der stationären Lösung der Gleichung (1) durch ein stochastisches Teilchensystem (3) zu bestimmen. Das Ergebnis besagt

$$\|p_1^{(n)} - g\|_{L_1} \leq \frac{\text{const}}{n},$$

wobei $p_1^{(n)}$ die Marginaldichte der stationären Verteilung des Teilchensystems und g die stationäre Lösung der Boltzmann-Gleichung ist.

Bei der numerischen Behandlung kinetischer Gleichungen mittels stochastischer Partikelverfahren treten stochastische Fluktuationen auf, d. h. die zu berechnenden Werte werden durch zufällige Schwankungen überlagert. Deshalb besteht in vielen Anwendungsbereichen, wie z. B. bei der Berechnung makroskopischer Größen hinter einem umströmten Körper, ein wichtiges Problem in der Konstruktion von Verfahren mit reduzierten Fluktuationen. Für die Boltzmann-Gleichung (1) wurde in den Arbeiten [3], [4] ein neuer Zugang zu diesem Problem der Varianzreduktion entwickelt. Er basiert auf der Benutzung eines Systems von Teilchen mit variablen Gewichten, welches eine künstliche Steuerung des Teilchenstromes ermöglicht. In [5], [6] wurde (zunächst am Beispiel einer Modellgleichung) gezeigt, daß der Anteil von Teilchen in einem vorgegebenen Bereich des Geschwindigkeitsraumes künstlich erhöht werden kann, ohne dadurch die Konvergenzeigenschaften der makroskopischen Größen zu beeinträchtigen. Dadurch wurde eine wichtige Voraussetzung zur Behandlung des Varianzreduktionsproblems im räumlich inhomogenen Fall geschaffen.

Literatur

1. W. WAGNER, *A functional law of large numbers for Boltzmann type stochastic particle systems*, Stochastic Anal. Appl., **14** (1996), pp. 591–636.
2. S. CAPRINO, M. PULVIRENTI, W. WAGNER, *Stationary particle systems approximating stationary solutions to the Boltzmann equation*, WIAS-Preprint No. 264, Berlin 1996.
3. S. RJASANOW, W. WAGNER, *A stochastic weighted particle method for the Boltzmann equation*, J. Comput. Phys., **124** (1996), pp. 243–253.
4. S. RJASANOW, W. WAGNER, *Stochastic systems of weighted particles approximating the spatially inhomogeneous Boltzmann equation*, Z. Angew. Math. Mech., **76** (1996), pp. 215–218.
5. S. RJASANOW, W. WAGNER, *Numerical study of a stochastic weighted particle method for a model kinetic equation*, J. Comput. Phys., **128** (1996), pp. 351–362.
6. S. RJASANOW, W. WAGNER, *Stochastic interacting particle systems as a numerical tool*, WIAS-Preprint No. 278, Berlin 1996.

4.6 Forschungsgruppe Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik

4.6.1 Zusammenfassung

Mit dem Vordringen stochastischer Modellbildungen bei der Untersuchung von Anwendungsproblemen wächst der Bedarf an effektiven statistischen Verfahren. Die Forschungsgruppe befaßt sich mit Arbeiten zur angewandten, algorithmisch orientierten Wahrscheinlichkeitstheorie und Mathematischen Statistik, die konstruktive und theoretische Aspekte statistischer und numerischer Aufgabenstellungen beinhalten und ergänzt werden durch Komplexitätsuntersuchungen. Im Vordergrund stehen dabei Anwendungen in den Wirtschafts- und Ingenieurwissenschaften. Insbesondere geht es um die Behandlung inverser und schlecht gestellter Probleme mit Methoden der nichtparametrischen Statistik, um die Numerik und Statistik stochastischer Differentialgleichungen und um die Effizienz stochastischer Algorithmen. Die Forschungsgruppe soll an konkreten interdisziplinären Anwendungsprojekten mitwirken und an der Entwicklung effizienter und problemorientierter Software arbeiten.

Nichtparametrische statistische Verfahren haben sich in der Vergangenheit als sehr erfolgreich bei der stochastischen Modellierung in Wirtschafts- und Ingenieurwissenschaften erwiesen. Sie werden daher derzeit intensiv untersucht. Auch *stochastische numerische Verfahren* sind aktueller Gegenstand weltweiter Forschungen; Monte-Carlo-Methoden werden üblicherweise dann eingesetzt, wenn herkömmliche Methoden auch bei Einsatz modernster Rechentechnik nicht mehr durchführbar sind.

Die Forschungstätigkeit der Gruppe orientiert sich derzeit an den Anwendungsfeldern

- Statistische Clusteranalyse mit Anwendungen (z. B. in der Biometrie)
- Stochastische Algorithmen für kinetische Gleichungen,
- Modellierung stochastischer Einflüsse in Biologie, Hydrologie, Seismologie und Kommunikationstechnik,
- Statistische Ökonometrie.

Im Bereich der Mathematischen Statistik ist die Zusammenarbeit mit dem interdisziplinären Sonderforschungsbereich 373 *Quantifikation und Simulation ökonomischer Prozesse* an der Humboldt–Universität von besonderer Bedeutung.

4.6.2 Projekte

Statistische Software

Bearbeiter: H.-J. Mucha, R. Siegmund-Schultze (FG 7), G. Reinhardt, J. Fuhrmann (FG 3)

Kooperation: G. Nakhaeizadeh, U. Grimmer, H. Kauderer (Forschungszentrum Daimler Benz AG Ulm), K. Dübon (Mercedes Benz AG Stuttgart)

Förderung: Daimler Benz AG Ulm

Seit 1995 wird die Windows-Software *ClusCorr* zur Clusteranalyse, Klassifikation und multivariaten grafischen Darstellung umfangreicher und hochdimensionaler Datenmengen entwickelt. Das Verfahrensinventar wird ständig verbessert und erweitert. So wurden z. B. Verfahren zur nichtparametrischen Dichteschätzung für den ein- und zweidimensionalen Fall aufgenommen. Für umfangreiche Datenmengen wird die WARPing-Technik zur zeitlich effektiven Dichteschätzung als Standardvariante empfohlen.

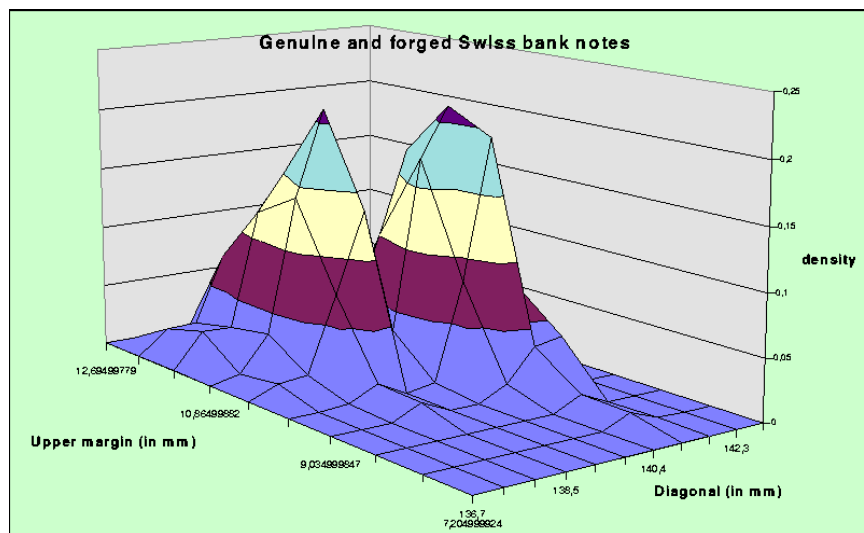


Abb. 1: 2-dimensionale Dichteschätzung

ClusCorr unter Microsoft EXCEL wurde auf der CeBIT 96 in Hannover und auf der Innovationsmesse in Leipzig vorgestellt. Hierbei wurde einer größeren Anzahl von potentiellen Anwendern und Interessenten statistische Beratung gegeben. *ClusCorr* zielt auf einen breiten Anwenderkreis, der theoretisch und praktisch in Lehre, Ausbildung, Forschung und Wirtschaft mit statistischer Datenanalyse befaßt ist. Den Schwerpunkt dieser Software bilden Clusteranalyse-Methoden, 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.

Auf der Konferenz IFCS-96 (Fifth Conference of the International Federation of Classification Societies) wurde ein Vortrag über adaptive Klassifikation gehalten und eine Software-Demonstration zu *ClusCorr* durchgeführt. Im Juni 1996 wurde auf Einladung des Forschungszentrums der Daimler Benz AG ein Workshop zur Clusteranalyse veranstaltet. Über den aktuellen Entwicklungsstand von *ClusCorr* wurde auch auf der vom WIAS organisierten Herbsttagung der

Gesellschaft für Klassifikation vorgetragen. Mit der Statistik-Software *ClusCorr* waren neben der Beratungstätigkeit auch Einnahmen aus Verkäufen verbunden.

Ausgangspunkt des Teilprojektes *Data Mining Software Clementine* war die erfolgreiche Anwendung adaptiver Clusteranalyse-Methoden zur Lösung von Klassifikationsproblemen und als vorbereitende statistische Datenanalyse für Machine Learning / Knowledge Discovery Verfahren aus dem Bereich Credit Scoring und Data Mining. Die Ergebnisse adaptiver distanzbasierter Modelle können z. B. in neuronale Netze eingespeist werden. Ein (sehr willkommener) Nebeneffekt ist hierbei die Zeitreduzierung in der Lernphase des neuronalen Netzes um ein Vielfaches. Der lokal adaptive Distanzzugang bietet zusätzlich die Möglichkeit, hochdimensionale alphanumerische und numerische Daten graphisch darzustellen.

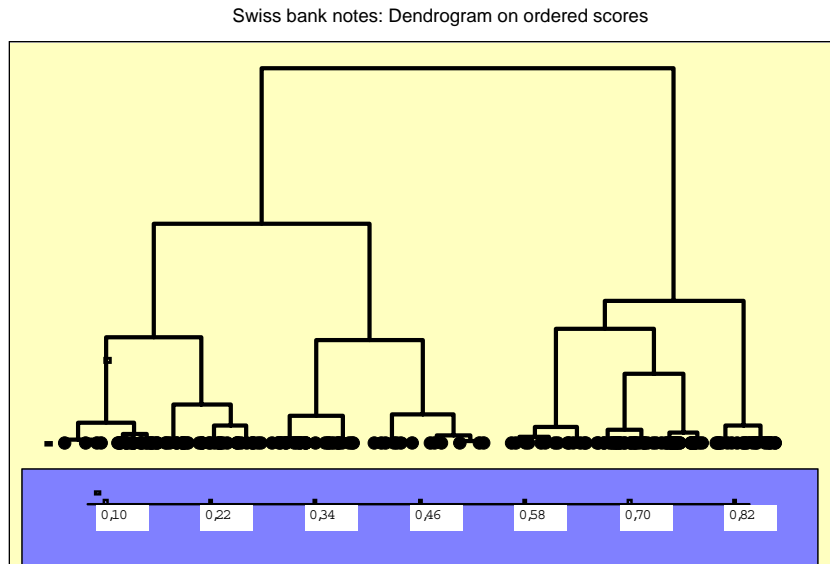


Abb. 2: Ergebnisausgabe der hierarchischen Clusteranalyse in *Clementine*

Während des ersten Arbeitsaufenthalts im Forschungszentrum der Daimler Benz AG in Ulm im September wurde mit der Realisierung des Clusteranalyse-Projekts für die Data Mining Software Clementine begonnen. Die Verarbeitung von Massendaten erfordert jedoch sehr effiziente numerische Algorithmen und eine aufwendige Grafik. Aus diesem Grunde begann eine intensive abteilungsübergreifende Zusammenarbeit im WIAS. Erste vielbeachtete Ergebnisse konnten auf der Herbsttagung der Gesellschaft für Klassifikation, die im WIAS stattfand, vorgestellt werden. Daraufhin entwickelte sich eine breitere Kooperation mit dem Forschungszentrum der Daimler Benz AG. Auf einem weiteren Arbeitstreffen in Ulm wurden Vorträge gehalten und eine erste Betaversion des gesamten Projekts realisiert, das die Portierung der adaptiven Clusteranalyse mit multivariater Grafik auf der Grundlage der OpenGL-basierten Toolbox *gtools* des WIAS, S. 68, in die Data Mining Software Clementine vorsieht. Die wissenschaftliche Zusammenarbeit konzentriert sich insbesondere auf die Anpassung adaptiver Clusteranalyse-Modelle an die Erfordernisse der statistischen Analyse von Massendaten und auf die Implementierung und Nutzung effektiver numerischer Algorithmen zur Lösung von Approximations- und Optimierungsproblemen in Klassifikationsmodellen und zur graphischen Ergebnisausgabe.

Das Teilprojekt *Distanzbasiertes Kredit Scoring* entstand 1995 auf Initiative von Herrn K. Dübon

(Mercedes Benz AG Stuttgart, Abt. Finanzcontrolling). Ausgangspunkt war die Fragestellung, ob (adaptive) Clusteranalyse-Methoden für Klassifikationsaufgaben aus dem Bereich Kredit Scoring und Data Mining als Alternative zu Maschine Learning / Knowledge Discovery-Verfahren eingesetzt werden können oder/und als „sinnvolle“ vorbereitende Datenanalyseschritte für die obengenannten Verfahren geeignet sind.

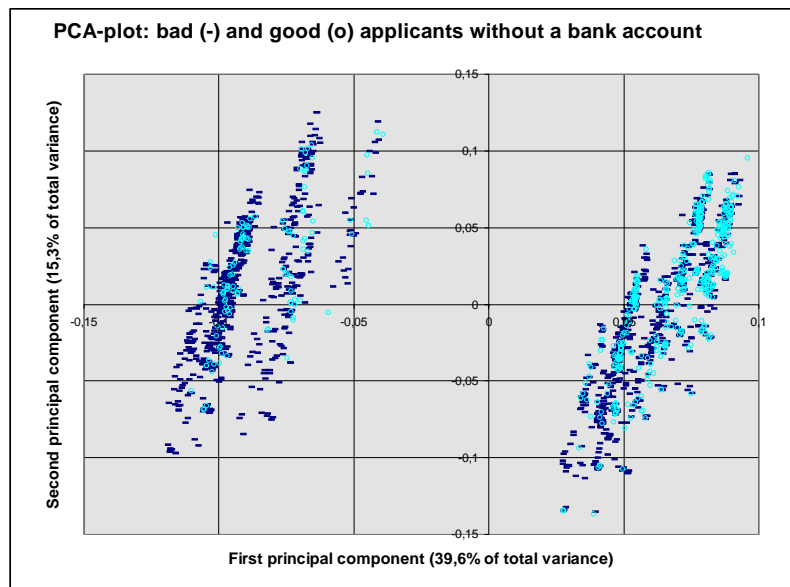


Abb. 3: Datenvisualisierung durch lokal adaptive Distanzen

Hierbei liegt der Untersuchungsschwerpunkt auf der Verarbeitung von qualitativen (kategorialen) und quantitativen (ordinalen, metrischen) Informationen mit dem Ziel, möglichst optimale Entscheidungsregeln hinsichtlich der Fehlerrate abzuleiten. Zum Beispiel ist über die Annahme oder Ablehnung beantragter Kredite mit minimaler Fehlerrate zu entscheiden. Die Aktivitäten werden in Zusammenarbeit mit der Gruppe Maschinelles Lernen (Daimler Benz AG) weitergeführt. Der Hauptschwerpunkt der wissenschaftlichen Zusammenarbeit verlagert sich zunehmend auf die Untersuchung und Berücksichtigung dynamischer Aspekte sowie auf Stabilitätsuntersuchungen durch Simulationsstudien.

Literatur

1. H.-H. BOCK, H.-J. MUCHA, *Classification and Multivariate Graphics: Models, Software and Applications*, WIAS-Report Nr. 10, Berlin 1996.
2. H.-J. MUCHA, *Clusteranalyse mit Mikrocomputern*, Akademie Verlag, Berlin 1992.
3. R. BRÜGGEMANN, H.-J. MUCHA, *Anwendungen und Probleme der Hassediagrammtechnik*. In: H. H. Bock, H.-J. Mucha (Hrsg.), *Classification and Multivariate Graphics: Models, Software and Applications*, WIAS-Report Nr. 10, Berlin 1996.

Dynamische stochastische Algorithmen

Bearbeiter: P. Mathé, A. Mader

Kooperation: H. Babovsky (TU Ilmenau)

Bei der numerischen Simulation praxisrelevanter Probleme der Gasdynamik stoßen deterministische Verfahren auf große Probleme. Diese in der Komplexität nichtlinearer kinetischer Gleichungen begründeten Schwierigkeiten werden durch stochastische Partikelmethode umgangen (siehe z. B. [1]). Solche Algorithmen sind für *Evolutionsprobleme* in den letzten Jahren untersucht und mathematisch dadurch gerechtfertigt worden, daß für sie geeignete Gesetze der großen Zahlen hergeleitet wurden (siehe z. B. [2]). Für *stationäre Probleme* werden derzeit verschiedene Ansätze verfolgt (siehe z. B. [3]). Bisher konnten die oft auftretenden systematischen Defekte nicht beseitigt werden. Die Ergebnisse aus [4] sollen durch Testreihen weiter untermauert werden. Dazu wurde die Entwicklung eines Programmes begonnen, mit dem die Teilchenbewegungen zwischen zwei eng beieinanderliegenden Platten simuliert werden. Derzeit werden für dieses Programm noch geeignete Parameter getestet. An einer Visualisierung mittels OpenGL und den gltools wird ebenfalls gearbeitet.

Nach Berechnungen zur stationären Boltzmann-Gleichung in einem einfachen Urnenmodell wurden zunächst Untersuchungen an einfachen Mehrgeschwindigkeitsmodellen vorgenommen. Parallel dazu wird ein Programm zur Simulation dieser Modelle entwickelt. Nach ersten Tests sollen der Wechsel zu komplizierteren Modellen und eine geeignete Visualisierung eingearbeitet werden.

Angeregt durch einen Arbeitsaufenthalt bei der Arbeitsgruppe Technomathematik der Universität Kaiserslautern ist geplant, die Simulationen für verteilte Berechnungen zu programmieren. Ausgangspunkt dafür sind die seit Beginn der Arbeit an den Codes benutzte Listentechnik und die in [5] beschriebenen Parallelisierungsschemata. Portabilität und die spätere Pflege sollen durch Angleichung an die aktuellen C++-Standards erleichtert werden.

Für komplexe Optimierungsprobleme, die mit den Verfahren der klassischen Numerik nicht behandelt werden können, gibt es verschiedene Möglichkeiten, durch Einführen zufälliger Parameter akzeptable Näherungslösungen zu erhalten. Einen vielversprechenden Ansatz beinhaltet das Konzept des *Simulated Annealing*, vgl. [8].

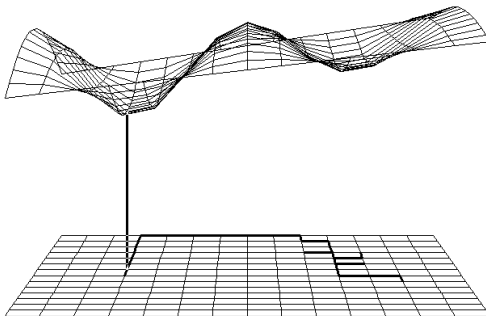


Abb. 1: Sample-Trajektorie

Es existieren derzeit erst wenige mathematische Resultate, die das Phänomen Simulated Annealing annähernd erklären können. Im Projekt werden Optimierungsprobleme behandelt, die der klassischen Situation entsprechen, in der eine (zu minimierende) Funktion über einem Bereich des \mathbb{R}^n gegeben ist. Dadurch ist es möglich, die Effizienz herkömmlicher Verfahren mit der stochastischer Verfahren zu vergleichen.

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

- die Geschwindigkeit der Abkühlung,

- die Relaxationszeit der Metropolissschritte.

Untersuchungen zum letzteren Punkt, d. h. zum Mischen von Markov-Ketten (bei fester Temperatur), bildeten den Schwerpunkt der diesjährigen Arbeit. Zuerst wurde untersucht, inwieweit die Produktstruktur von Gittern ausgenutzt werden kann, um die Konvergenz von Markov-Ketten gegen ihre invariante Verteilung zu steuern. In [6] konnte gezeigt werden, daß in höherdimensionalen Gittern unter Ausnutzung der Produktstruktur Konvergenz gegen die invariante Verteilung möglich ist, ohne die Mehrzahl der Zustände zu besichtigen.

In [7] wird dieses Ergebnis ausgenutzt, um für Metropolis-Ketten einen ähnlichen Effekt nachzuweisen, falls die zugehörige Energiefunktion in niederdimensionale Anteile zerfällt.

Zukünftige Untersuchungen sollen darauf gerichtet sein, derartige Resultate für das Verhalten inhomogener Markov-Ketten nachzuweisen. Gleichzeitig soll die Effizienz von *Simulated Annealing* an praktischen Problemen, insbesondere dynamischen Systemen untersucht werden.

Literatur

1. C. CERCIGNANI, *Mathematical models in rarefied gas dynamics*, Surv. Math. Ind., **1** (1991), pp. 119-153.
2. H. BABOVSKY, *A convergence proof for Nanbu's simulation method for the full Boltzmann equation*, SIAM J. Numer. Anal., **26** (1989), pp. 45-65.
3. A. V. BOBYLEV, J. STRUCKMEIER, *Numerical simulation of the stationary one-dimensional Boltzmann equation by particle methods*, Bericht der Arbeitsgruppe Technomathematik (Forschung) 128, FB Mathematik, Universität Kaiserslautern, 1995.
4. H. BABOVSKY *Simulation of kinetic boundary layers*, WIAS-Preprint No. 140, Berlin 1995.
5. S. DIETRICH, I. D. BOYD, *Scalar and parallel optimized implementation of the Direct Simulation Monte Carlo method*, J. Comp. Phys., **126** (1996), pp. 328-342.
6. P. MATHÉ, *Efficient mixing of product walks on product groups*, WIAS-Preprint No. 284, Berlin 1996.
7. P. MATHÉ, *Relaxation of product Markov chains on product spaces*, Manuskript, Dezember 1996.
8. G. WINKLER, *Image Analysis, Random Fields and Dynamic Monte Carlo Methods*, Appl. Math., Vol. **27**, Springer, Berlin, Heidelberg, 1995.

Entscheidungstheorie für nichtparametrische Experimente

Bearbeiter: M. Nussbaum, V. Spokoiny

Kooperation: I. Grama (Akademie der Wissenschaften, Moldawien), P. Greenwood (University of British Columbia, Kanada), G. Golubev, V. Pukhalski (Institut für Probleme der Informationsübertragung Moskau, Rußland)

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

Die grundlegende Aufgabe der asymptotischen Theorie statistischer Experimente ist die Approximation allgemeiner statistischer Modelle durch einfachere; es entsteht eine Theorie, die sich abstrakter Konzepte bedient und von großer Tragweite für die Statistik ist. Ein zentrales Thema der Forschungsgruppe in den letzten Jahren war in diesem Zusammenhang die asymptotische Äquivalenz nichtparametrischer Experimente zu Gaußschen Folgen im Sinne des Defizienzabstandes. Nachdem hierzu ein Durchbruch bei der Schätzung der Wahrscheinlichkeitsdichte erzielt werden konnte (vgl. [1]), steht die Verwirklichung eines größeren Programms für die zukünftigen Untersuchungen an; dieses beinhaltet den Nachweis globaler Gaußscher Approximationen in allen Modellen, in denen bisher lokale asymptotische Normalität nachgewiesen werden konnte. Eine unmittelbare Anwendung solcher Approximationen ist die „automatische“ Übertragung asymptotischer Minimax-Konstanten, vgl. [2].

Ein wichtiger Schritt konnte mit der Behandlung eines nichtgaußschen Regressionsmodells vollzogen werden (vgl. [3]). Die gewählte Form eines durch eine Exponentialfamilie und eine glatte Funktion determinierten Regressionsmodells ist in der neueren statistischen Theorie als „nonparametric generalized linear model“ bekannt; zentraler Punkt des Resultates ist die Möglichkeit einer globalen Approximation des Experiments mit Hilfe einer varianzstabilisierenden Transformation der Exponentialfamilie. Dies verallgemeinert in anschaulicher Weise die in [1] aufgezeigte Rolle der Quadratwurzel-Transformation beim Poissonprozeß. Mit derselben Methodik ergibt sich in [5] die globale *white noise* Approximation beim Problem der Spektraldichteschätzung eines Gaußschen stationären Prozesses, auf Basis der log-Transformation der Spektraldichte. Dieses Resultat beinhaltet allerdings zusätzlich die Möglichkeit der *konstruktiven Realisierung* der Äquivalenz, im Gegensatz zu den als Existenzsätze aufzufassenden Resultaten in [1] und [3]. Der Charakter als Existenzsatz ist bedingt durch den Einsatz der Ungarischen Konstruktion (KMT-Ungleichung), die in der für das Regressionsmodell geeigneten Fassung in [4] bereitgestellt wurde.

Die Resultate zur nichtparametrischen Autoregression [6] sind aufzufassen als Ausgangspunkt für ein vertieftes Studium von statistischen Experimenten abhängiger Beobachtungen (Punktprozesse, Diffusionsprozesse). Die dafür entwickelte Methodik des *coupling* von Likelihood-Prozessen anhand der Skorokhod-Einbettung wurde bislang nur in Vorträgen vorgestellt (s. [7]); enge Zusammenhänge bestehen zu den Arbeiten für nichtparametrische Zeitreihenmodelle (s. Teilprojekt *Statistische Ökonometrie*, Literaturangaben [3], [4]).

Grundlegende Resultate zum Teilprojekt *Large deviation principle für statistische Experimente* finden sich in der Arbeit [8]. Es wurde gezeigt, daß das *large deviation principle* für typische statistische Modelle gilt: Stichproben von unabhängigen identisch verteilten Zufallsgrößen, Regressionsmodelle, Dichtemodelle, etc. Eine allgemeine Methode zur Lösung statistischer

Aufgaben bei Gültigkeit dieses Prinzips wurde entwickelt, z. B. für das Testen zweier oder mehrerer zusammengesetzter Hypothesen, das Aufstellen von Konfidenzintervallen etc. Die Arbeiten [9] und [10] stehen damit in engem Zusammenhang.

Ein weiteres Teilprojekt betraf die *nichtparametrische Schätzung unglatter Funktionale*. Die existierende Literatur zur Schätzung von Funktionalen unterscheidet zwei typische Fälle: entweder das Schätzen eines glatten Funktionalen (wie z. B. das Integral einer unbekanntem Funktion, die im Rauschen beobachtet wird) oder das Schätzen eines singulären Funktionalen (wie der Wert der Funktion in einem Punkt). Im Fall eines glatten Funktionalen wird typischerweise die optimale Schätzrate $n^{-1/2}$, erreicht, wohingegen ein singuläres Funktional nur mit der nichtparametrischen Rate $n^{-m/(2m+1)}$ geschätzt werden kann (wenn m die Glattheit der Funktion ist.). A. P. Korostelev stellte in [11] das Problem der Schätzung der L_1 -Norm $\int |f(t)|dt$; das behauptete Ergebnis hierfür (Konvergenzgeschwindigkeit der singulären Art) stellte sich jedoch als fehlerhaft heraus. Eine Korrektur und eine gründliche Untersuchung des Falles unglatter Funktionale wurde in [12] vorgenommen.

Literatur

1. M. NUSSBAUM, *Asymptotic equivalence of density estimation and Gaussian white noise*, Ann. Statist., **24** (6) (1996).
2. M. NUSSBAUM, *The Pinsker bound: A review*, WIAS-Preprint No. 281, Berlin 1996.
3. I. GRAMA, M. NUSSBAUM, *Asymptotic equivalence of nonparametric generalized linear models*, WIAS-Preprint No. 289, Berlin 1996.
4. I. GRAMA, M. NUSSBAUM, *A nonstandard Hungarian construction for partial sums*, Manuskript.
5. G. GOLUBEV, M. NUSSBAUM, *Asymptotic equivalence of spectral density estimation and Gaussian white noise*, Manuskript.
6. M. NUSSBAUM, *Diffusion approximation for nonparametric autoregression*, erscheint in: Prob. Theor. Related Fields.
7. M. NUSSBAUM, *Asymptotic equivalence for counting process experiments via Skorokhod embedding*, Vortrag, Ecole Normale Supérieure, Paris, 9. 12. 1996.
8. A. PUHALSKII, V. SPOKOINY, *On large deviation efficiency in statistical inference*, erscheint in: Bernoulli.
9. M. S. ERMAKOV, *On large and moderate deviations of empirical bootstrap measure*, WIAS-Preprint No. 271, Berlin 1996.
10. M. S. ERMAKOV, *On distinguishability of two nonparametric sets of hypotheses*, WIAS-Preprint No. 273, Berlin 1996.
11. A. P. KOROSTELEV, *On the accuracy of estimation of non-smooth functionals of regression*, Theory Probab. Appl., **35** (1990), pp. 768–770.
12. O. LEPSKI, A. NEMIROVSKI, V. SPOKOINY, *On estimation of nonsmooth functionals*, WIAS-Preprint No. 297, Berlin 1996.

Numerik stochastischer Differentialgleichungen

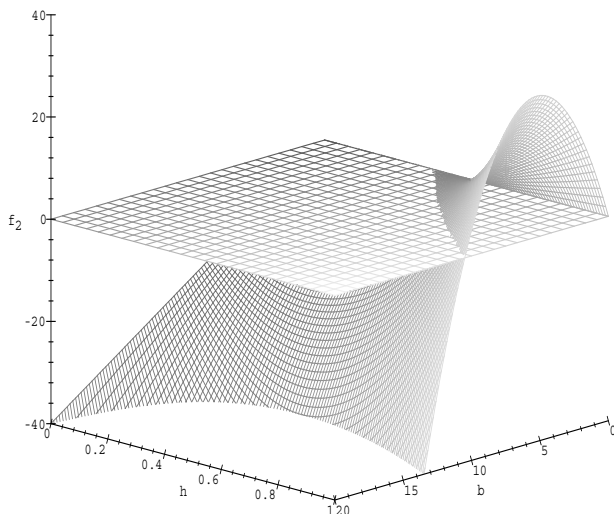
Bearbeiter: G. N. Milstein, H. Schurz

Kooperation: Karmeshu (Jawaharlal Nehru Universität, Neu Delhi, Indien), B. L. Ryashko (Ural-Staatsuniversität, Ekaterinburg, Rußland)

Stochastische (gewöhnliche) Differentialgleichungen (SDE) und die damit verbundenen stochastischen dynamischen Systeme spielen eine immer größere Rolle bei der Modellierung, Analyse und Simulation ingenieurtechnischer oder wirtschaftstheoretischer Probleme in der Praxis. In diesem Projekt steht deren qualitatives und statistisches Verhalten im Mittelpunkt. Es werden stochastisch-numerische Verfahren zur Lösung von SDE entwickelt, verbessert und implementiert.

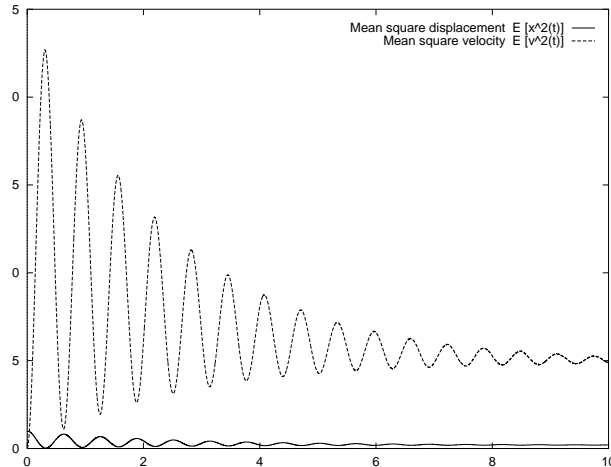
Stochastische Verfahren zur Lösung von Randwertaufgaben für partielle Differentialgleichungen hängen eng mit der numerischen Integration von Systemen von SDE zusammen. Die bekannten Algorithmen zur numerischen Integration von SDE basieren auf Zeitdiskretisationen. Zur approximativen Lösung von Randwertproblemen in beschränkten Gebieten sind neue Methoden erforderlich, die auf räumlichen Diskretisierungen aufbauen und auf das Studium spezieller Markovscher Ketten führen. Frühere Untersuchungen konzentrierten sich auf Randwertaufgaben für parabolische Differentialgleichungen; analoge Probleme wurden auch für elliptische Randwertaufgaben betrachtet, bei deren Lösung neue Schwierigkeiten entstehen. In der Arbeit [1] werden Fragen der starken Approximation von Lösungen von SDE in beschränkten Gebieten behandelt. In der Arbeit [2] werden Methoden der schwachen Approximation entwickelt; die zugehörigen Algorithmen basieren auf der Konstruktion geeigneter Markovketten. Untersucht werden Fragen der Konvergenz, der Approximationsgüte und der numerischen Komplexität dieser Verfahren. Außerdem wird in [2] ein Problem für elliptische Differentialgleichungen mit kleinem Parameter bei den höheren Ableitungen betrachtet.

Der Stabilität von Gleichgewichtszuständen unter zufälligen Störungen sind zahlreiche Arbeiten gewidmet. Wichtige Ergebnisse auf diesem Gebiet hängen mit den Begriffen des Ljapunov-Exponenten (Khasminskii), des Ljapunov-Momentexponenten (Arnold) und des Stabilitätsindex (Arnold-Khasminskii) zusammen. Diese Konzepte können auf die Stabilitätsproblematik von invarianten Mannigfaltigkeiten übertragen werden, vgl. [3]. Einige numerische Verfahren zum Auffinden des Ljapunov-Exponenten und des Stabilitätsindex werden in [4] dargestellt.



Stabilitätsfunktion $f_2(h, b)$ für eine implizite Theta-Methode bei variierender Schrittweite $h > 0$ und zeitlich veränderlicher Reibungsintensität $b > 0$ zur Diskretisierung eines stochastischen Oszillators mit konstanter Eigenfrequenz und multiplikativem, zufälligen Rauschen (s. [5]).

In den Arbeiten [8], [9] wurde kürzlich eine bemerkenswerte Übereinstimmung zwischen dem asymptotischen Verhalten von stetigen stochastischen Systemen und diskreten Systemen gefunden. Dabei gelang es, zwei implizite Verfahren aus der Vielfalt von numerischen Methoden (s. z. B. [7]) zu finden, welche keinen asymptotischen Bias im Vergleich zur exakten Lösung bilinearer Systeme von SDE aufweisen, wenn die Integrationszeit gegen unendlich strebt. Dieses sind die *implizite Trapezregel* und die *Mittelpunktsregel* im autonomen Fall.



Stochastische adäquate Equilibrisierung der durch die Trapezregel diskretisierten Auslenkungs- und Geschwindigkeitskomponenten eines zufällig gestörten Oszillators mit additivem Gaußschen Rauschen.

Dabei spielt die Wahl der Schrittweite keine Rolle; außerdem muß nur die Übereinstimmung gewisser Momente garantiert sein. Zum Beweis wurden die Theorie positiver Operatoren und Standard-Fixpunkttechniken herangezogen. Explizite Verfahren sind i. a. *nicht* zur adäquaten Widerspiegelung des asymptotischen Wahrscheinlichkeitsgesetzes stetiger Dynamiken durch diskrete Dynamiken geeignet (siehe einfachste Beispiele in [6] und [9]). Dieses Resultat sollte für alle diejenigen Nutzer unserer Techniken von großem Interesse sein, die Genauigkeit in der Langzeitintegration stochastischer Systeme benötigen, wie z. B. bei der Berechnung von *Ljapunov-Exponenten* (s. [9]), *stationären Maßen*, *first exit times* in der statistischen Physik und Mechanik, *parametrischen Schätzern* in der asymptotischen Statistik oder bei der Auswertung von *Zinsstrukturkurven* im stochastischen Finanzwesen (s. [9]).

Literatur

1. G. N. MILSTEIN, *The simulation of phase trajectories of a diffusion process in a bounded domain*, Stochastics and Stochastics Reports, **56** (1996), pp. 103–126.
2. G. N. MILSTEIN, *Random walk for elliptic equations and boundary layers*, WIAS-Preprint No. 255, Berlin 1996.
3. G. N. MILSTEIN, *Stability index for invariant manifolds of stochastic systems*, WIAS-Preprint No. 244, Berlin 1996.
4. G. N. MILSTEIN, *Evaluation of moment Lyapunov exponents for second order linear autonomous SDE*, WIAS-Preprint No. 216, Berlin 1996; erscheint in: Random Comput. Dynamics.
5. B. L. RYASHKO, H. SCHURZ, *Mean square stability analysis of some linear stochastic systems*, WIAS-Preprint No. 275, Berlin 1996; erscheint in: J. Dyn. Sys. Applic.

6. H. SCHURZ, *Asymptotical preservation of probabilistic laws through Euler methods for Ornstein-Uhlenbeck processes*, WIAS-Preprint No. 274, Berlin 1996.
7. H. SCHURZ, *Lecture notes on numerical analysis of stochastic differential equations*, Humboldt-Universität zu Berlin, Technische Universität Berlin, Universität Innsbruck, 1994–1996.
8. H. SCHURZ, *The invariance of asymptotic laws of some stochastic systems under discretization*, WIAS-Preprint No. 280, Berlin 1996.
9. H. SCHURZ, *Stability, stationarity, and boundedness of some implicit numerical methods for stochastic differential equations and applications*, WIAS-Report No. 11, Berlin 1996.
10. P. E. KLOEDEN, E. PLATEN, H. SCHURZ, M. SØRENSEN, *On effects of discretization on estimators of drift parameters for diffusion processes*, WIAS-Preprint No. 292, Berlin 1996.
11. KARMESHU, H. SCHURZ, *Moment evolution of the outflow-rate from nonlinear conceptual reservoirs*, Proc. Int. Conf. on Hydrology and Water Resources, ed. V. P. Singh and B. Kumar, New Dehli, Dec. 1993, Surface Water-Hydrology **1**, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, pp. 403–413, 1996.
12. H. SCHURZ, *Asymptotical mean square stability of an equilibrium point of some linear numerical solutions*, Stoch. Anal. Appl. **14** (3), pp. 313–354, 1996.
13. H. SCHURZ, *Numerical regularization for SDEs: Construction of nonnegative solutions*, Dyn. Sys. Appl. **5**, pp. 323–352, 1996.
14. H. SCHURZ, *Modelling and analysis of stochastic innovation diffusion*, in: Proceedings of ICIAM'95, Hamburg (R. M. O. Mahrenholz, K. Marti, eds.), ZAMM **76** (Suppl. 3), Applied Stochastics and Optimization, (1996), pp. 366–369.

Statistische Ökonometrie

Bearbeiter: M. Neumann, V. Spokoiny

Kooperation: W. Härdle, O. Lepski, S. Sperlich (Humboldt-Universität zu Berlin), A. Youditsky (INRIA, Rennes, Frankreich), A. Nemirovski (Technion, Haifa, Israel), R. Liptser (Universität Tel-Aviv, Israel), R. Dahlhaus (Universität Heidelberg), J.-P. Kreiß (Universität Braunschweig)

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

Ein Schwerpunkt der Arbeit war die Entwicklung und Begründung von Bootstrap-Methoden für Probleme aus der nichtparametrischen Zeitreihenanalyse. Das Bootstrap ist eine Methode zur Schätzung von Verteilungen und daraus abgeleiteter Parameter. Klassische Anwendungsfelder sind die Bestimmung von Konfidenzintervallen und -bändern sowie die Bestimmung von kritischen Werten von Tests. Im Gegensatz zu parametrischen statistischen Problemen erlauben einige Problemstellungen in der nichtparametrischen Statistik eine asymptotische Vernachlässigung der Abhängigkeitsstruktur. In der Arbeit [3] wurde eine starke Approximation eines lokal polynomialen Schätzers in einem nichtparametrischen autoregressiven Modell durch einen Schätzer derselben Art in einem entsprechenden Regressionsmodell hergeleitet. Der Beweis basierte auf Skorokhod-Einbettungen der zu dyadischen Intervallen gehörenden Partialsummenprozesse in Wiener-Prozesse. Dieses Ergebnis, welches gleichzeitig eine Charakterisierung der asymptotischen Äquivalenz zwischen diesen Modellen liefert, erlaubte die Anwendung des „Wild bootstrap“-Verfahrens in diesem Kontext. Als eine Anwendung wurden simultane Konfidenzbänder für die Autoregressionsfunktion konstruiert.

Während die asymptotische Vernachlässigbarkeit der Abhängigkeit in erster Linie auf strukturellen Merkmalen des datengenerierenden Prozesses, nämlich der Martingalstruktur der Innovationen, beruhte, wurde in [4] eine wesentliche Verallgemeinerung auf allgemeine schwach abhängige Prozesse für den Fall der Dichteschätzung erreicht. Hier wurden sowohl schwach abhängige Beobachtungen mit einer stationären Dichte als auch unabhängige Beobachtungen mit derselben Dichte in einen gemeinsamen Poissonprozeß eingebettet. Als Resultat wurde eine Approximation eines Kernschätzers der stationären Dichte durch einen entsprechenden Schätzer im i.i.d.-Modell gewonnen. Dies bildete den Ausgangspunkt für die Entwicklung von Bootstrap-Methoden zur Konstruktion von Konfidenzbändern und nichtparametrischen Tests.

Im Berichtszeitraum wurden außerdem Projekte zu Waveletmethoden in der Zeitreihenanalyse fortgeführt. Ergänzend zu früheren Arbeiten (s. [1]) wurde der Vergleich zwischen multivariaten Standard-Waveletbasen und anisotropen Basen in [2] vertieft.

In der angewandten Datenanalyse werden häufig Modellannahmen gemacht und anschließend die relevanten Parameter geschätzt. In der angewandten ökonomischen Literatur dominieren sogenannte Probit- und logistische Regressionsmodelle. Dabei wird die grundlegende Annahme gemacht, daß die Link- und Indexfunktionen eine bekannte Form haben. Eine wichtige Aufgabenstellung in der Statistik ist die Überprüfung solcher Modellannahmen.

Nichtparametrische oder semiparametrische Methoden bieten weit mehr Flexibilität als parametrische Ansätze. Zum Beispiel wird nicht vorausgesetzt, daß die Linkfunktion bekannt ist. Andererseits sind aber parametrische Modelle häufig nützlicher für eine weitere Datenanalyse. Daher werden Methoden benötigt, um parametrische gegen nicht- oder semiparametrische Modelle zu testen.

Die Anwendung bereits existierender Ergebnisse trifft in der Praxis auf das Problem, daß die vorgeschlagenen Tests Informationen über Glattheitseigenschaften der Modellfunktion benötigen, die normalerweise unbekannt sind. Diese Schwierigkeit motiviert die Entwicklung adaptiver nichtparametrischer Tests.

Ein typisches Beispiel eines solchen Problems wird in [5] untersucht. Man betrachte eine unbekannt Funktion (Signal), die im additiven Rauschen beobachtet wird. Die einfache Hypothese „kein Signal“ wird gegen eine zusammengesetzte nichtparametrische Alternative getestet. Sowohl optimale Testmethoden als auch die optimale Testrate hängen von Glattheitseigenschaften des Signals ab. Eine adaptive, auf Wavelets basierende Testmethode wird konstruiert, welche die fast optimale Testrate liefert, ohne Informationen über unbekannt Eigenschaften des Signals zu benötigen. Dieses Problem wurde in [6] weiterentwickelt, wobei die Testmethode verallgemeinert und gleichzeitig vereinfacht wurde.

In der ökonomischen Modellierung besteht ein spezielles Interesse an der Analyse von Komponenten. Dieses Problem wurde im Rahmen der Zusammenarbeit mit W. Härdle und S. Sperlich (SFB 373, Humboldt-Universität zu Berlin) untersucht. Übliche ökonomische Modelle sind multivariat, und die Anzahl der Beobachtungen reicht oftmals nicht aus, um eine rein nichtparametrische Schätzung mit entsprechender Genauigkeit zu erhalten. Um dieser Schwierigkeit zu begegnen, nimmt man eine spezielle Struktur des Modells an, z. B. eine „single-index“ oder additive Gestalt. Diese Annahmen sind aber häufig im globalen Sinne nicht adäquat. Andererseits kann man erwarten, daß das untersuchte Modell eine lokale Struktur besitzt, welche sich von Punkt zu Punkt verändert.

In [7] wurde, zunächst für den eindimensionalen Fall, eine Methode entwickelt, die bezüglich der unbekannt lokalen Struktur adaptiv ist. Es ist geplant, diese Methoden bei der Bildverarbeitung und der Analyse stochastischer Modelle einzusetzen.

Literatur

1. M. H. NEUMANN, R. VON SACHS, *Wavelet thresholding in anisotropic function classes and application to adaptive estimation of evolutionary spectra*, erscheint in: *Annals of Statistics*, **27**, No. 1, 1997.
2. M. H. NEUMANN, *Multivariate wavelet thresholding: A remedy against the curse of dimensionality?*, WIAS-Preprint No. 239, Berlin 1996.
3. M. H. NEUMANN, J.-P. KREISS, *Bootstrap confidence bands for the autoregression function*, WIAS-Preprint No. 263, Berlin 1996.
4. M. H. NEUMANN, *A characterization of the asymptotic equivalence of density estimation under weak dependence and independence*, Manuskript, 1996.
5. V. SPOKOINY, *Adaptive hypothesis testing using wavelets*, *Ann. Statist.*, **24**, No. 6 (1996).
6. V. SPOKOINY, *Adaptive and spatially adaptive testing of a nonparametric hypothesis*, WIAS-Preprint No. 234, Berlin 1996.
7. V. SPOKOINY, *Estimation of a function with discontinuities via local polynomial fit with an adaptive window choice*, WIAS-Preprint No. 291, Berlin 1996.

4.7 Forschungsgruppe Differenzierbare Dynamik und Ergodentheorie

4.7.1 Zusammenfassung

Die Theorie der dynamischen Systeme, soweit sie Gegenstand der Arbeit in der Forschungsgruppe ist, hat vielfältige Motivationen. Einmal gilt es, Beiträge zu interessanten und mathematisch anspruchsvollen Problemen zu liefern, die in Zusammenhang mit der Modellierung von Evolutionsprozessen relevant geworden sind. Hierher gehört vor allem die Analyse von geometrischen und maßtheoretischen Strukturen der differenzierbaren Dynamik mit ihren dimensionsartigen numerischen Invarianten. Zum anderen wurde der Frage nachgegangen, wie sich die Anwendung von Begriffen und Methoden der Dynamik auf globale Probleme der Differentialgeometrie und harmonischen Analysis ausbauen und vertiefen läßt.

Als herausragendes Ergebnis zum ersten Forschungsthema ist ein Beweis der Eckmann-Ruelle-Vermutung (in Zusammenarbeit mit der Pennsylvania State University) zu nennen, durch den sehr allgemein die Existenz der lokalen Dimension von invarianten Maßen gesichert wird. Die Fortschritte beim zweiten Thema beziehen sich u. a. auf den Beweis wichtiger Teile von bisher nur vermuteten Zusammenhängen zwischen Dynamik und globaler Analysis.

Ein von der Forschungsgruppe am WIAS veranstalteter internationaler Workshop galt vorrangig geometrischen und maßtheoretischen Grundlagenfragen der Dynamik und damit dem ersten Themenkreis.

4.7.2 Projekte

Geometrie von Basismengen

Bearbeiter: H. G. Bothe

Seit der grundlegenden Arbeit [3] von S. Smale spielen Basismengen in der geometrischen Theorie der hyperbolischen dynamischen Systeme eine wichtige Rolle. Obwohl mit Hilfe der Markov-Zerlegungen leicht zu zeigen ist, daß es nur abzählbar viele topologische Typen von Basismengen gibt, ist mit Ausnahme der expandierenden Attraktoren [4], [2] ihre geometrische Beschreibung bisher nicht gelungen. Insbesondere ist das von Smale formulierte Problem ungelöst, ob jeder hyperbolische Attraktor bis auf topologische Äquivalenz lokal das kartesische Produkt einer Cantormenge mit einer Zelle ist.

In dem Projekt werden frühere Untersuchungen [1] zu expandierenden Basismengen wieder aufgenommen. Diese Basismengen sind dadurch ausgezeichnet, daß sie die stabilen Mannigfaltigkeiten ihrer Punkte in Cantormengen schneiden. Die lokale Struktur ist dann durch ihre Schnitte mit den unstabilen Mannigfaltigkeiten bestimmt. Es gelang, diese Schnitte als Limesmengen von Folgen bestimmter Graphen zu erfassen und damit einer geometrischen Beschreibung zugänglich zu machen.

Literatur

1. H. G. Bothe, *An example of a strange basic set*, Preprint P-MATH-23/87 des Karl-Weierstraß-Instituts der Akademie der Wissenschaften der DDR.
2. H. G. Bothe, *Expanding attractors with stable foliations of class C^0* , Ergodic Theory Related Topics, Proceedings, Güstrow 1990, pp. 36–61; Lecture Notes in Mathematics 1514 (1992), pp. 747–817.
3. S. Smale, *Differentiable dynamical systems*, Bull. Amer. Math. Soc., **73** (1967), pp. 747–817.
4. R. F. Williams, *Expanding attractors*, Publ. math. IHES, **43** (1974), pp. 169–203.

Einzugsbereiche hyperbolischer Attraktoren

Bearbeiter: H. G. Bothe

In [1] konnte gezeigt werden, daß eindimensionale hyperbolische Attraktoren Λ in mindestens vierdimensionalen Mannigfaltigkeiten unter schwachen Voraussetzungen durch ihre innere Struktur die Topologie ihres Einzugsbereiches bestimmen und daß sich diese Einzugsbereiche als kartesisches Produkt einer offenen Teilmenge G_Λ der dreidimensionalen Sphäre \mathbb{S}^3 mit einem Raum \mathbb{R}^n ergeben. Jetzt konnte in wichtigen Fällen aus der inneren Struktur von Λ auf den topologischen Typ von G_Λ geschlossen werden. Es ergab sich, daß G_Λ ein offener Henkelkörper, das Komplement eines unendlich verknöteten Bündels aus endlich vielen geschlossenen Kurven oder eine Mannigfaltigkeit sein kann, die in dem Sinne ausgefranst ist, daß sie bei jeder topologischen Einbettung in \mathbb{S}^3 einen nicht lokal zusammenhängenden Rand haben muß.

Literatur

1. H. G. Bothe, *How hyperbolic attractors determine their basins*, *Nonlinearity*, **9** (1996), pp. 173–190.
2. H. G. Bothe, *Topology of the basins of hyperbolic attractors*, WIAS-Preprint No. 311, Berlin 1997.

Probleme der Theorie der dynamischen Zeta-Funktionen

Bearbeiter: A. Juhl

Kooperation: S. Patterson, U. Bunke, M. Olbrich (Georg-August-Universität Göttingen), D. Mayer (Technische Universität Clausthal), P. Perry (University of Kentucky at Lexington), A. Deitmar (Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg)

Das Ziel dieses Projektes ist die Untersuchung der Dynamik des geodätischen Flusses Riemannscher Mannigfaltigkeiten negativer Krümmung. Der geodätische Fluß dieser Mannigfaltigkeiten ist ein Modell der hyperbolischen Hamiltonschen Dynamik. Die hier betrachteten Systeme sind stark chaotisch. Die diesen Dynamiken zugeordneten Zeta-Funktionen sind eng mit den verschiedenen Aspekten der chaotischen Dynamik verbunden. Im Fall des geodätischen Flusses von lokal-symmetrischen Räumen sind die Zeta-Funktionen meromorphe Funktionen einer komplexen Variablen, und das Hauptproblem der Theorie besteht in der Beschreibung ihrer Nullstellen und Polstellen. Für die Untersuchung der Zeta-Funktionen stehen die Methoden der harmonischen Analysis und der hyperbolischen Dynamik zur Verfügung, und seit Ruelle's Arbeit [5] ist es eines der herausfordernden Probleme dieses Gebietes, die Verbindungen der beiden Methoden zu verstehen. Der Unterschied zwischen den beiden Methoden sei durch die Tatsache veranschaulicht, daß im Fall des geodätischen Flusses von hyperbolischen Mannigfaltigkeiten unendlichen Volumens der Einsatz der harmonischen Analysis extrem kompliziert ist, wohingegen die Ruellesche Methode der Transfer-Operatoren vom kompakten Fall fast direkt auf den allgemeineren Fall unendlichen Volumens ausgedehnt werden kann.

Es war das Anliegen dieses Langzeitprojektes, die Verbindungen zwischen den verschiedenen Zugängen zu verstehen und auf dieser Grundlage den geodätischen Fluß hyperbolischer Mannigfaltigkeiten unendlichen Volumens zu untersuchen. Der grundlegende methodische Ansatz ist hierbei der einer Kohomologie-Theorie der Zeta-Funktionen, wie sie von vorangegangenen Ergebnissen zu einer kohomologischen Theorie der Zeta-Funktionen ([3],[7]) nahegelegt wurden. Hierzu war es jedoch notwendig, die in [3] eingesetzten Methoden, die auf der Theorie der unendlich-dimensionalen Darstellungen Liescher Gruppen basieren, durch einen alternativen Zugang von differential-geometrischer/dynamischer Natur zu ersetzen. Somit war das Hauptproblem die Suche nach einer Beschreibung der Nullstellen und Polstellen der Zeta-Funktionen durch Invarianten, die der Dynamik auf dem unterliegenden Phasenraum kanonisch zugeordnet sind.

In den Jahren 1994/1995 fand der Bearbeiter eine derartige Charakterisierung im Fall der Zeta-Funktionen kompakter hyperbolischer Räume mit Hilfe von Differentialformen mit distributiven Koeffizienten (Ströme), die ein System von partiellen Differentialgleichungen erfüllen, welches kanonisch durch die unterliegende hyperbolische Hamilton-Struktur bestimmt ist. Diese Gleichungen ersetzen die Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungs-Bedingungen im vollständig integrierbaren Fall. Weiterhin stellte es sich heraus, daß die neue Theorie der Ströme ein natürlicher Teil einer Hodge-Theorie der stabilen Blätterung des Phasenraumes ist. Obwohl diese Hodge-Theorie in vieler Hinsicht der Hodge-Theorie elliptischer Komplexe ähnelt, zeigen sich hier viele neue Erscheinungen. Insbesondere ist die technische Seite der Theorie völlig andersartig als im elliptischen Fall.

Diese Ergebnisse führten auf die Formulierung eines Systems von Vermutungen zur Beschreibung der Singularitäten der Zeta-Funktionen von hyperbolischen Mannigfaltigkeiten unendlichen

Volumens. Der neue Aspekt im Fall unendlichen Volumens ist der, daß die für die Singularitäten verantwortlichen Ströme ihren Träger nur im stabilen Basin des Flusses haben.

Zu Beginn des Jahres 1996 fanden U. Bunke und M. Olbrich eine Beschreibung der Singularitäten der Zeta-Funktionen durch die Gruppen-Kohomologie von Γ auf endlichen Keimen holomorpher Familien von Hyperfunktionen auf der Limesmenge einer Kleinschen Gruppe Γ . Diese Beschreibung entspricht einer Vermutung von Patterson ([8],[2]). Der Beweis erforderte die Entwicklung neuer Techniken. Hierbei waren die Ergebnisse in [5] wichtig.

Diese Ergebnisse waren nun eine ideale Grundlage für einen Test der von uns entwickelten Vermutungen, und mit Hilfe einer neuen Methode zur Konstruktion invarianter Distributionen auf den Limesmengen war es möglich, die Verträglichkeit aller bisher vorliegenden Ergebnisse mit den Vermutungen zu beweisen. Damit sind nun wichtige Teile der Vermutungen bewiesen. Insbesondere ist jetzt klar, wie die Resonanzen des Laplace-Operators der hyperbolischen Mannigfaltigkeit mit Distributionen auf der Limesmenge verbunden sind und was diese mit den Strömen auf dem stabilen Basin zu tun haben. Analog dazu steht auch der topologische Teil der Singularitäten der Zeta-Funktionen mit Differentialformen auf der Limesmenge in Verbindung. Das gesamte Material dieser Theorien und ihrer Verbindungen zu den klassischen Theorien ist in der Monographie [4] dargestellt.

Bei allem Fortschritt ist jedoch gegenwärtig z. B. die vollständige Untersuchung der Zeta-Funktion

$$Z_R = \prod_c (1 - e^{-s|c|})$$

des geodätischen Flusses einer Kleinschen Mannigfaltigkeit noch nicht möglich, da viele technische Probleme noch ungelöst sind. Die in [4] formulierten Prinzipien geben jedoch die Leitlinien für die weitere Untersuchung dieser (und anderer) Funktionen.

Literatur

1. U. Bunke, M. Olbrich, *Selberg Zeta and Theta functions. A differential operator approach*, Mathematical Research, vol. **83**, Akademie-Verlag, 1995.
2. U. Bunke, M. Olbrich, *Γ -cohomology and the Selberg zeta function*, J. Reine Angew. Math., **467** (1995), pp. 199–219.
3. A. Juhl, *Index-Theorie und hyperbolische Dynamik*, Habilitationsschrift, Humboldt-Universität zu Berlin, 1993.
4. A. Juhl, *An introduction to the cohomological theory of dynamical zeta functions*, in Vorbereitung.
5. S. Patterson, *On Ruelle's zeta function*, Festschrift in honor of I. I. Piatetski-Shapiro on the occasion of his sixtieth birthday (S. Gelbart, R. Howe, and P. Sarnak, eds.), Weizmann Science Press, Jerusalem, 1990, pp. 163–184.
6. S. Patterson, *Two conjectures on Kleinian groups*, Vortragsmanuskript, Warwick, März 1993.
7. P. Perry, S. Patterson, *The divisor of zeta functions for Kleinian groups*, erscheint in: Invent. Math.

8. D. Ruelle, *Zeta functions for expanding maps and Anosov flows*, Invent. Math., **34** (1976), pp. 231–242.

Dimension hyperbolischer Maße - die Eckmann-Ruelle-Vermutung

Bearbeiter: J. Schmeling

Kooperation: L. Barreira (Instituto Superior Técnico, Lissabon), Y. Pesin (Pennsylvania State University, Department of Mathematics, University Park), S. Troubetzkoy (University of Alabama at Birmingham, Department of Mathematics)

Förderung: Deutsche Akademie der Naturforscher Leopoldina

In diesem Projekt befassen wir uns mit dem lange Zeit offenen grundlegenden Problem der Existenz der punktweisen Dimension invarianter Maße. Dieses Problem wurde explizit von L.-S. Young auf ihrer Rede auf dem Internationalen Mathematikerkongreß 1994 in Zürich hervorgehoben und ist als Eckmann-Ruelle-Vermutung allgemein bekannt. Es kann auf folgende Weise formuliert werden. Sei M eine kompakte glatte Riemannsche Mannigfaltigkeit und $f: M \rightarrow M$ ein $C^{1+\alpha}$ -Diffeomorphismus mit einem invarianten Maß μ .

Vermutung 1 (Eckmann-Ruelle) *Falls alle Lyapunov-Exponenten von μ verschieden von 0 sind, existiert der folgende Grenzwert*

$$d(x) := \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\log \mu(B(x, r))}{\log r}$$

für μ -fast alle Punkte.

Der obere Grenzwert wird die *punktweise Dimension* von μ in X genannt. Die Existenz des Grenzwertes impliziert den grundlegenden Fakt, daß *alle* Dimensionscharakteristiken des Maßes übereinstimmen. Dieser gemeinsame Wert ist eine fundamentale Größe der fraktalen Struktur von μ . Damit spielt die Eckmann-Ruelle-Vermutung in der Dimensionstheorie eine analoge Rolle zum Satz von Shannon-McMillan-Breiman in der Entropietheorie.

Da hyperbolische Maße beim Studium physikalischer Modelle chaotischer Systeme mit fraktaler Struktur eine wesentliche Rolle spielen, kann man die Eckmann-Ruelle-Vermutung auch als Basis derartiger Studien betrachten.

Die Eckmann-Ruelle-Vermutung ist insofern scharf, daß man keine der Voraussetzungen abschwächen kann und bezieht sich somit auf die breitestmögliche Klasse von Maßen.

In [1] ist es L. Barreira, Y. Pesin und mir gelungen, die Eckmann-Ruelle-Vermutung in voller Allgemeinheit zu beweisen. Außerdem konnten S. Troubetzkoy und ich ein analoges Resultat für Endomorphismen erzielen [2].

Literatur

1. L. Barreira, Ya. Pesin, J. Schmeling, *Dimension of hyperbolic measures - A proof of the Eckmann-Ruelle conjecture (announcement)*, ERA-AMS, **2** (1996), No. 1.
2. J. Schmeling, S. Troubetzkoy, *On the existence of the pointwise dimension for regular hyperbolic invariant measures for endomorphisms*, in Vorbereitung.

Starrheit multifraktaler Spektren

Bearbeiter: J. Schmeling

Kooperation: L. Barreira (Instituto Superior Técnico, Lissabon), Y. Pesin (Pennsylvania State University, Department of Mathematics, University Park)

Beim Studium chaotischer Systeme trifft man oft auf invariante Mengen mit komplizierter geometrischer Struktur. Im allgemeinen sind diese Mengen nicht selbstähnlich, können aber in Teilmengen zerlegt werden, von denen jede eine Skalierungssymmetrie besitzt. Diese Zerlegung wird *multifraktale Zerlegung* genannt und ist ein wesentlicher Bestandteil der multifraktalen Analysis dynamischer Systeme. Die physikalischen Daten, die durch numerische Simulationen gewonnen werden, enthalten „verborgene“ Informationen über die multifraktale Zerlegung. Um diese Informationen in eine für die multifraktale Analysis nützliche Form zu bringen, benutzt man die sogenannten *multifraktalen Spektren*. Da gewöhnlich die verfügbaren Daten nur durch „physikalische“ Observable erhalten werden können, ist es ein wichtiges und herausforderndes Problem, Informationen über das dynamische System aus den „rohen“ Daten zu gewinnen. Wir konnten für eine gewisse Klasse von dynamischen Systemen zeigen, daß eine endliche Zahl von „unabhängigen“ multifraktalen Spektren ausreicht, um die Dynamik vollständig zu beschreiben. Dieses Phänomen nennen wir **multifraktale Starrheit**.

Literatur

1. L. Barreira, Ya. Pesin, J. Schmeling, *On a general concept of multifractality: Multifractal spectra for dimensions, entropies, and Lyapunov exponents. Multifractal rigidity*, WIAS-Preprint No. 298, Berlin 1996; erscheint in: *Chaos*, **7** (1997), no. 1.
2. L. Barreira, Ya. Pesin, J. Schmeling, *Multifractal spectra and multifractal rigidity for horseshoes*, erscheint in: Jubiläumsband zum 60. Geburtstag von D. V. Anosov.
3. L. Barreira, Ya. Pesin, J. Schmeling, *Thermodynamic formalism for multifractal rigidity of conformal dynamics*, in Vorbereitung.
4. J. Schmeling, *On the completeness of multifractal spectra*, WIAS-Preprint No. 300, Berlin 1996.

Glattheit von invarianten Blätterungen

Bearbeiter: J. Schmeling

Kooperation: B. Hasselblatt (Tufts University, Boston)

Eine wichtige Frage in der Theorie dynamischer Systeme ist die Untersuchung invarianter Blätterungen. Obwohl die Existenz gewisser invarianter Blätterungen unter relativ schwachen Hyperbolizitätsbedingungen gewährleistet ist, kann deren Regularität (Glattheit) nicht durch eine Verschärfung der Hyperbolizitätsbedingungen erzielt werden. Den beiden Bearbeitern des Projektes ist es unabhängig voneinander gelungen, eine scharfe Abschätzung des Hölderexponenten der Blätterungen anzugeben und nachzuweisen, daß für eine „typische“ Abbildung dieser Exponent erreicht wird. Eine natürliche weitergehende Frage ist die nach der Größe der Menge derjenigen Punkte, in denen kein besserer Hölderexponent möglich ist. Obwohl B. Hasselblatt und A. Wilkinson gezeigt haben, daß diese Menge für Anosov-Systeme groß im Sinne des Lebesgue-Maßes ist, ist es uns gelungen, für Axiom A-Systeme ein Kriterium anzugeben, bei dessen Erfüllung die Hausdorff-Dimension kleiner als die Dimension der gesamten invarianten Menge ist. Dieses Kriterium wird natürlich nicht von Anosov-Systemen erfüllt. Genauer haben wir eine Formel der Hausdorff-Dimension der Menge der Punkte gefunden, die einen vorgegebenen Hölderexponenten für die Blätterung annehmen. Diese Formel ermöglicht es, verschiedene Fragestellungen aus der Theorie der dynamischen Systeme über die Größe gewisser Mengen zu beantworten.

Literatur

1. B. Hasselblatt, J. Schmeling, *Estimations of the Hausdorff dimension of the set of non-Lipschitz points for invariant foliations*, in Vorbereitung.

Irreguläre Orbits

Bearbeiter: J. Schmeling

Kooperation: L. Barreira (Instituto Superior Técnico, Lissabon)

Beim numerischen Studium dynamischer Systeme sind wir an dem asymptotischen Verhalten *typischer Orbits* in bezug auf ein invariantes Maß interessiert. Diese Untersuchungen führen zu wichtigen Informationen über die beobachtbaren Eigenschaften eines dynamischen Systems bezüglich dieses Maßes. Außerdem enthalten typische Orbits bezüglich verschiedener Maße (z. B. Maß der maximalen Entropie, SRB-Maß) ergänzende Informationen. Wir glauben, daß diese verschiedenen Informationen zusammengesetzt werden können, um das gesamte dynamische System widerzuspiegeln. Jedoch können dazu eine große Anzahl typischer Orbits (jeder bezüglich eines anderen Maßes) vonnöten sein.

In diesem Projekt zeigen wir, daß überraschenderweise die gesamte Information des dynamischen Systems in der Menge der irregulären (nicht typischen) Orbits enthalten ist. Insbesondere besitzt diese Menge volle topologische Entropie und Hausdorff-Dimension. Weil die irregulären Orbits zu einer Menge vom totalen Maß 0 gehören, ist es schwierig, solche Orbits durch zufällige Auswahl zu finden. Demzufolge wäre unser Resultat von geringem Interesse für Anwender ohne einen Algorithmus zur Generierung irregulärer Orbits. Wir geben einen solchen Algorithmus an, indem wir aus einer Anzahl von typischen Punkten bezüglich verschiedener Maße irreguläre Orbits konstruieren.

Literatur

1. L. Barreira, J. Schmeling, *Any set of regular points has full Hausdorff dimension and full topological entropy*, WIAS-Preprint No. 299, Berlin 1996.

5 Wissenschaftlich-technische Dienste

5.1 Bibliothek

Zur wissenschaftlichen Infrastruktur des Instituts gehört neben Rechentechnik und Fachinformation die Bibliothek, deren Profil sich an den wissenschaftlichen Zielsetzungen und den Aufgabenstellungen des Instituts orientiert. Neben einem adäquaten Bestandsaufbau tritt zunehmend die Mitnutzung von Beständen anderer Bibliotheken durch Leihverkehr bzw. Einwegbereitstellung in den Vordergrund. Beide Grundaufgaben vollziehen sich dank des Einsatzes moderner Kommunikations- und verfügbarer Fachinformationstechniken auf einer soliden Datenbasis. Dies ist (was die elektronische Ausprägung anbelangt) ein bleibendes Ergebnis unserer Mitarbeit in Förderprojekten des BMBF auf dem Gebiet der Fachinformation: DMV-Projekt (1992-1995); NDF-Projekt (1994-1996).

Der Bestandsaufbau folgt dem Grundsatz, daß in Auswahl vorrangig Literatur zur Angewandten Analysis und Stochastik erworben wird. Wichtige Standardwerke auf Gebieten der Mathematischen Physik und der Numerischen Analysis und Informatik werden nach Möglichkeit ebenfalls beschafft, soweit sie nicht nur kurzfristig erforderlich sind.

Der Schwerpunkt der Nutzung fremder Bestände liegt zwar naturgemäß bei den jeweiligen Wissenschaftsdisziplinen, denen die Anwenderprojekte zuzurechnen sind, aber auch die Bestandslücken bei unseren mathematischen Beständen der Vergangenheit und - was schwerer wiegen wird - der Zukunft erfordern den bibliothekarischen Aufwand. Für die Arbeit der wissenschaftlichen Mitarbeiter ist dies eine unverzichtbare Bibliotheksdienstleistung.

Die Bibliothek steht als wissenschaftliche Spezialbibliothek auch der Fachöffentlichkeit zur Verfügung.

Das Institut hat der grundlegenden Bedeutung von Fachliteratur und Fachinformation für seine wissenschaftlichen Aufgabenstellungen und -lösungen auf den ausgewählten Arbeitsfeldern in den Bereichen Angewandte Analysis und Stochastik dadurch Rechnung getragen, daß es kontinuierlich die wichtigste Originalliteratur erworben sowie Recherchen in Fremddatenbanken durchgeführt hat.

Für die Bibliothek sind gegenwärtig die folgenden Bereiche für die Anwendung moderner Mittel und Methoden auf der Basis der im Institut installierten Rechen- und Kommunikationstechnik (Hard-, Net- und Software) zu benennen:

- CD-ROM-Recherchen (Online-Recherchen vorwiegend in der Fachinformation),
- Einsatz eines Bibliothekssystems,
- Weiterführung einer noch separaten bibliographischen Preprint-Datenbank (Fremd-Preprints),
- passive Nutzung von Internetdiensten (z. B. Verlags-Server, Bibliothekskataloge, Server anderer wissenschaftlicher Einrichtungen),
- Benutzung von e-Mail und \LaTeX .
- Die Ablösung der analogen Kopiertechnik durch digitale ist eingeleitet, um auch elektronische Literaturbereitstellung zu ermöglichen.

5.2 Fachinformation

Die Fachinformation des WIAS bietet – außer einer Reihe weiterer Recherchemöglichkeiten – die Online-Nutzung bibliographischer Datenbanken an. Neben Retrieval in mathematischen und eng verwandten Datenbanken sind auf Grund der Zielstellung des WIAS, projektorientierte Forschung zu betreiben, auch Recherchen in Datenbanken aus anderen naturwissenschaftlichen Disziplinen sowie aus Wirtschafts- und Ingenieurwissenschaften erforderlich und möglich.

Innerhalb der letzten Jahre wurden zwei zentrale Recherchestationen sukzessive aufgebaut, wovon eine (im Lesesaal der Bibliothek) von allen Mitarbeitern genutzt werden kann. Die Nutzung der neuen Informations- und Kommunikationstechnologien wurde im WIAS eingeführt und gesichert. Zur stabilen Gewährleistung der Fachinformationsversorgung und ihrer Planbarkeit werden Nutzungsvereinbarungen mit Datenbank Anbietern abgeschlossen. Der Hauptpartner ist STN/FIZ Karlsruhe.

Während des auslaufenden Förderprojekts wurde der Fachinformationsbeauftragte durch einen zentralen Rechercheur unterstützt. Beide standen allen Mitarbeitern zu individuellen Konsultationen zur Verfügung.

Komplexe Recherchen werden in der Regel zentral bei der Fachinformation durchgeführt. Es sind aber auch Recherchemöglichkeiten an den Wissenschaftler-Arbeitsplätzen realisiert.

Die individuelle oder geführte Nutzung der angebotenen Datenbanken ermöglicht es den (wissenschaftlichen) Mitarbeitern, sich effektiv über das veröffentlichte Wissen weltweit zu orientieren, mindestens solange auch der Zugriff auf die relevante Literatur möglich ist. Beides sind wesentliche Voraussetzungen zur Gestaltung von Kooperationen und zum sparsamen Einsatz von Ressourcen.

Die Online-Dienste werden durch Offline-Nutzung kostenpflichtiger Datenbanken auf CD-ROM (weitgehend im Netzbetrieb) ergänzt. Individuell und von der Fachinformation unterstützt findet eine angemessene und effektive Nutzung der weltweiten Netzdienste (Internet) statt.

Die Akzeptanz der modernen Rechertechnologien ist ausgeprägt. Die Verfügbarkeit und Nutzung sind insgesamt unverzichtbar geworden.

Als Arbeitsstil hat sich die Integration der elektronischen Literaturrecherche in die wissenschaftliche Arbeit allgemein herausgebildet: von der bibliographischen spontanen Nachschau über das kleine Orientierungsretrieval bis zu wiederholten umfassenden Recherchen bei der Projektvorbereitung und -durchführung reicht der alltägliche Gebrauch, der durch die geschaffenen Hard-, Net- und Softwarevoraussetzungen und die erlangte Recherchierqualifikation ermöglicht wurde. Auch 1996 bildete die Teilnahme des WIAS an dem BMBF-Verbundvorhaben „Nutzung naturwissenschaftlich-technischer Datenbanken durch außeruniversitäre Forschungseinrichtungen in den neuen Bundesländern – NDF-Projekt“ für die Arbeit der Fachinformation eine wesentliche Basis.

Daneben setzt sich das Zusammenwirken der Fachinformationsbeauftragten der mathematischen Fachbereiche und Institute in Deutschland in IuK-Arbeitskreisen der DMV fort. Damit ist das WIAS in die Kommunikation und die abgestimmte Weiterentwicklungen auf diesem Gebiet der wissenschaftlichen Infrastruktur integriert und berücksichtigt sie zum Nutzen des Instituts.

Das WIAS ist im Netz mit einem eigenen Informationsangebot präsent, das auf der Basis der Empfehlungen für ein Math-Net strukturiert ist, um eine horizontale Vernetzung zu ermöglichen. Der Server vom Typ Hyper-G wurde von der Fachinformation aufgebaut und wird dort kontinuierlich betreut. Derzeit enthält er außer den üblichen Informationen über das Institut (Profil, Veranstaltungen etc.) vor allem die Preprints des WIAS zum weltweiten unbeschränkten

Zugriff in den derzeit üblichen Formaten.

URL: <http://www.wias-berlin.de> .

5.2.1 Projekte

Nutzung naturwissenschaftlich-technischer Datenbanken durch Forschungseinrichtungen in den neuen Bundesländern

Bearbeiter: Th. Cierzynski (Fachinformationsbeauftragter), R. Tribiahn (Rechercheur)

Kooperation: 20 außeruniversitäre Forschungseinrichtungen,
Projektträger „Fachinformation“ in Darmstadt,
Scientific Consulting Dr. Schulte-Hillen in Köln,
STN International/FIZ Karlsruhe

Förderung: BMBF-Förderprogramm: Verbundvorhaben „Nutzung naturwissenschaftlich-technischer Datenbanken durch Forschungseinrichtungen in den neuen Bundesländern“

Im Berichtsjahr, dem letzten Projektjahr, stand insbesondere bei den nicht-mathematischen Datenbanken die zentrale Recherche im Vordergrund. Die Ergebnisse wurden von den Wissenschaftlern intensiv weiterverarbeitet, die Dienste der Fachinformation von ihnen sehr gut angenommen. Außer der bibliographischen Information aus den verfügbaren Datenbanken werden häufig Kongreßinformationen, Wirkungsstätten und Verbindungsdaten von ermittelten Autoren etc. und sonstige allgemeine Fachinformationen gesucht.

Das für die Problemanalyse in den Projekten erforderliche tiefe Eindringen in das jeweilige Fachgebiet der Anwendung ist durch die unmittelbare Zugänglichkeit zu entsprechenden Literaturdatenbanken ganz wesentlich unterstützt worden. Das Kennenlernen und die Einschätzung der Relevanz unter den erleichternden Bedingungen des Förderprojekts hat den effektiven Einsatz der modernen elektronischen Retrievalmöglichkeiten nachhaltig befördert.

5.3 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-Informationsdienste (HyperG, WWW, FTP).

Als Rechentechnik sind folgende Geräte installiert (in Klammern stehen die entsprechenden Zahlen des Jahres 1995) :

- 53 (60) PC (1 x 80386, 35 x 80486, 17 x Pentium) mit MS-DOS und MS Windows
- 2 (2) DEC VAX (1x 3600, 1 x 4000-300) unter OpenVMS
- 34 (31) 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 255 4/232, 1 x 400 4/166, 2 x 1000 4/233) unter DEC UNIX (33), OpenVMS (1)
- 19 (15) Silicon Graphics (5 x Indy, 8 x Indigo, 3 x Indigo2, 1 x Challenge S, 1 x Crimson, 1 x Onyx) unter IRIX
- 6 (10) SUN (5 x SPARC 10, 1 x SUNserver 630) unter SunOS
- 1 (1) HP (1 x HP 9000/715) unter HP UX
- 2 (2) 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 1996 :

1. ATM-Backbone

Das 1995 installierte Backbone, bestehend aus einem ATM-Switch (ASX200) sowie 6 Access-Switches (LAX20) der Firma Fore hat sich voll bewährt. Die Stabilität und Leistungsfähigkeit sind wesentlich verbessert. Leider konnten noch keine Server direkt an das ATM angeschlossen werden, da die erforderliche Standardisierung der LAN-Emulation länger auf sich warten ließ als geplant.

2. Client-Server Architektur

Die Client-Server Architektur wurde durch Einsatz eines dedizierten Mail-, NIS- und DNS-Servers (SGI Indy R5000) weiterentwickelt. Dadurch ist es möglich, alle Architekturen unabhängig voneinander zu betreiben. Außerdem wurde ein HyperG-, WWW- und FTP-Server (SGI Challenge S) installiert.

3. Grafiklabor

Für das Grafiklabor wurde der Thermosublimationsdrucker Tektronix 440 beschafft. Damit ist die Ausgabe photorealistischer Bilder auf Papier und Folien möglich.

4. Netzmanagement

Der Anschluß des Instituts an das Berliner MAN hat sich leider stark verzögert. Ursache dafür waren unvorhersehbare Schwierigkeiten beim Bau des Kabelkanals. Bis zum Ende des Jahres 1996 soll die LWL-Verbindung zum MAN hergestellt werden, sodaß damit gerechnet werden kann, daß zum Beginn des Jahres 1997 der Betrieb des Breitbandanschlusses aufgenommen werden kann.

5. Compute-Server

Es wurde die Beschaffung eines Compute-Servers beschlossen. Zur Realisierung dieses Beschlusses wurde eine Kommission aus vier Mitarbeitern des Instituts gebildet. Diese entwickelte ein Paket von Testprogrammen, mit denen die Rechner verschiedener Hersteller verglichen wurden. In die engere Wahl kamen:

- (a) DEC 8x00
- (b) HP-Convex SPP2000
- (c) IBM SP/2
- (d) SGI Origin 2000
- (e) SUN Enterprise

Nach ausführlichen Diskussionen in der Kommission und im Beirat Rechentechnik, sowie einer Abstimmung mit dem ZIB, hat sich das Institut für die SGI Origin 2000 mit 8 Prozessoren entschieden.

6. PC-Software

Alle PCs des Instituts wurden mit aktueller Software ausgestattet (Windows 95, Office 95, Scientific Workplace etc.). Dabei wurde bei Bedarf die Hardware entsprechend erweitert (Platten, RAM, Graphik).

7. Zugang zu den WIAS-Rechnern

Um den Mitarbeitern bessere Möglichkeiten zur Nutzung der Institutsrechner zu geben, wurden die dafür erforderlichen Komponenten (Netblazer, leistungsfähige Modems) beschafft. Damit ist die Nutzung von PPP, SLIP sowie Terminalemulation über eine einheitliche Schnittstelle möglich.

6 Publikationen, wissenschaftliches Leben

6.1 Veröffentlichungen

Monographien

V. G. SPOKOINY, A. SHIRYAEV, *Statistical Experiments and Decisions. Asymptotic Theory*, Encyclopaedia of Math. Sciences, **92**, Springer-Verlag, Berlin, 1996.

M. BROKATE, J. SPREKELS, *Hysteresis and Phase Transitions*, Applied Mathematical Sciences, vol. **121**, Springer-Verlag, New York, 1996.

H. STEPHAN, *Nichtgleichgewichtsprozesse: Direkte und inverse Probleme*, Berichte aus der Mathematik, Shaker Verlag, Aachen, 1996.

referierte Aufsätze

G. ALBINUS, *Thermodynamics of Energy Models of Semiconductor Devices*, Z. Angew. Math. Mech., **76** (1996), Suppl. 2, pp. 289–292.

G. ALBINUS, CL. HERRMANN, G. RICHTER, *Refinement of bandwidth-limited diode laser spectroscopy by adiabatic chirp*, Spectrochimica Acta Part A, **52** (1996), pp. 955–958.

H. BABOVSKY, *Diffusion limits for flows in thin layers*, SIAM J. Appl. Math., Vol. **56** (1996), pp. 1280–1294.

—, *Inverse problems in kinetic theory*, Z. Angew. Math. Mech. (ZAMM), Vol. **76** S2 (1996), pp. 471–472.

—, *Recognition of ring pairs in the data analysis of Cherenkov detectors*, J. Comp. Appl. Math., Vol. **72** (1996), pp. 227–234.

—, *Limit theorems for deterministic Knudsen flows between two plates*, Math. Models Methods Appl. Sci., Vol. **6** (1996), pp. 503–520.

H. G. BOTHE, *How hyperbolic attractors determine their basin*, Nonlinearity **9** (1996), No. 5, pp. 1173–1190.

A. BOVIER, V. GAYRARD, *An almost sure large deviation principle for the Hopfield model*, Ann. Probab., **24** (1996), pp. 1444–1475.

A. BOVIER, CH. KÜLSKE, *There are no nice interfaces in 2 + 1 dimensional SOS-models in random media*, J. Stat. Phys., **83** (1996), pp. 751–759.

N. BUBNER, *Landau-Ginzburg Model for a Deformation-Driven Experiment on Shape Memory Alloys*, Contin. Mech. Thermodyn., **8** (5) (1996), pp. 293–308.

—, *A Mathematical Model for Deformation-Driven Experiments on Shape Memory Alloys*, Z. Angew. Math. Mech., **76** (1996), Suppl. 5, pp. 79–80.

- J. ELSCHNER, S. PRÖSSDORF, I. H. SLOAN, *The qualocation method for Symm's integral equation on a polygon*, Math. Nachr., **177** (1996), pp. 81–108.
- J. ELSCHNER, E. P. STEPHAN, *A discrete collocation method for Symm's integral equation on curves with corners*, J. Comput. Appl. Math., **75** (1996), pp. 131–146.
- J. T. COX, K. FLEISCHMANN, A. GREVEN, *Comparison of interacting diffusions and application to their ergodic theory*, Probab. Theory Relat. Fields, **105** (1996), pp. 513–528.
- S. N. EVANS, K. FLEISCHMANN, *Cluster formation in a stepping stone model with continuous, hierarchically structured sites*, Ann. Probab., vol. **24** (1996), No. 4, pp. 1926–1952.
- K. FLEISCHMANN, J. GÄRTNER, I. KAJ, *A Schilder type theorem for super-Brownian motion*, Canad. J. Math., **48** (1996), pp. 542–568.
- K. FLEISCHMANN, A. GREVEN, *Time-space analysis of the cluster-formation in interacting diffusions*, Electronic Journal of Probability, **1** (1996), pp. 1–46.
- H. GAJEWSKI, K. GÄRTNER, *On the Discretization of van Roosbroeck's Equations with Magnetic Field*, Z. Angew. Math. Mech., **76** (1996), pp. 247–265.
- H. GAJEWSKI, K. GRÖGER, *Reaction-diffusion processes of electrically charged species*, Math. Nachr., **177** (1996), pp. 109–130.
- H. GAJEWSKI, F. HERZEL, B. HEINEMANN, *Small-Signal Analysis by Means of Transient Excitations and its Applications in Bipolar Transistor Modelling*, Intern. Journal of High Speed Electronics and Systems, **7** (1996), pp. 1–4.
- 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), pp. 1155–1164.
- A. GLITZKY, K. GRÖGER, R. HÜNLICH, *Free energy and dissipation rate for reaction diffusion processes of electrically charged species*, Appl. Anal., **60** (1996), pp. 201–217.
- K. GRÖGER, *Boundedness and continuity of solutions to second order elliptic boundary value problems*, Nonlinear Anal., **26** (1996), pp. 539–549.
- F. GRUND, *Sparse-matrix-techniques for vector computer*, Z. Angew. Math. Mech., **76** (1996), Suppl. 1, pp. 411–412.
- D. HÖMBERG, *A numerical simulation of the Jominy end-quench test*, Acta mat., **44** (11) (1996), pp. 4375–4385.
- R. MODEL, R. HÜNLICH, *Parameter sensitivity in near infrared imaging*, Proc. SPIE, **2626** (1995), pp. 56–65.
- , *Optical Imaging of Highly Scattering Media*, Z. Angew. Math. Mech., **76** (1996), Suppl. 1, pp. 483–484.

R. MODEL, R. HÜNLICH, M. ORLT, M. WALZEL, *NIR imaging in random media using time domain data*, Proc. SPIE, **2925** (1996), pp. 77–88.

D. IOFFE, *Extremality of the disordered state for the Ising model on general trees*, Progr. Probab., **40** (1996), Birkhäuser, Boston, pp. 3–14.

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

R. KORNHUBER, *Monotone Multigrid Methods for Variational Inequalities II*, Numer. Math., **72** (1996), pp. 481–499.

—, *A Posteriori Error Estimates for Elliptic Variational Inequalities*, Computers Math. Applic., **31** (1996), pp. 49–60.

W. DAHMEN, A. KUNOTH, K. URBAN, *A wavelet-Galerkin method for the Stokes equations*, Computing, **56**, No. 3 (1996), pp. 259–302.

S. MAIER, R. LAUTERBACH, E. REISSNER, *A systematic study of heteroclinic cycles in dynamical systems with broken symmetries*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A, **126** (1996), pp. 885–909.

P. MATHÉ, *On the existence of unbiased Monte Carlo estimators*, J. Approx. Theory, **85** (1996), pp. 1–15.

G. N. MILSTEIN, *Application of numerical integration of stochastic equations for the solution of boundary value problems with Neumann boundary condition*, Theory Probab. Appl., **41** (1996), pp. 210–218.

—, *The simulation of the phase trajectories of a diffusion process in a bounded domain*, Stochastics Stochastics Rep., **56** (1996), pp. 103–126.

—, *Evaluation of moment Lyapunov exponents for second order stochastic systems*, Random Comput. Dynamics, Vol. **4** (1996), No. 4, pp. 301–315.

M. H. NEUMANN, *Automatic bandwidth choice and confidence intervals in nonparametric regression*, Ann. Statist., **23** (1996), pp. 1937–1959.

M. NUSSBAUM, *Asymptotic equivalence of density estimation and Gaussian white noise*, Ann. Statist., **24** (1996), No. 6, pp. 2399–2430.

P. HALL, J. POLZEHL, *On the dimension of the boundary of clumps in a multi-type Boolean model*, Ann. Statist., **24** (1996), No. 4, pp. 1521–1535.

YU. DEMJANOVICH, A. KOSHELEV, G. LEONOV, S. PRÖSSDORF, *S. G. Michlin (1908 – 1990)*, Math. Nachr., **177** (1996), pp. 5–7.

W. MCLEAN, S. PRÖSSDORF, *Boundary element collocation methods using splines with multiple knots*, Numer. Math., **74** (1996), pp. 419–451.

A. RATHSFELD, *Error estimates and extrapolation for the numerical solution of Mellin convolution equations*, IMA J. Numer. Anal., **16** (1996), pp. 217–255.

J. REHBERG, H. WENZEL, U. BANDELOW, H. J. WÜNSCHE, *Mechanisms of Fast Pulsations in Two-Section DFB Lasers*, IEEE Journal of Quantum Electronics, **32** (1) (1996), pp. 69–78.

—, *Spectral properties of a System Describing Fast Pulsating DFB Lasers*, Z. Angew. Math. Mech., **77** (1) (1996), pp. 75–77.

A. R. CHAMPNEYS, J. HÄRTERICH, B. SANDSTEDTE, *A non-transverse homoclinic orbit to a saddle-node equilibrium*, Ergodic Theory Dynamical Systems, **16** (1996), pp. 431–450.

A. R. CHAMPNEYS, YU. A. KUZNETSOV, B. SANDSTEDTE, *A numerical toolbox for homoclinic bifurcation analysis*, Internat. J. Bifur. Chaos Appl. Sci. Engrg., **6** (1996), pp. 867–887.

B. FIEDLER, B. SANDSTEDTE, A. SCHEEL, C. WULFF, *Bifurcation from relative equilibria of noncompact group actions: Skew products, meanders, and drifts*, Doc. Math. J. DMV, **1** (1996), pp. 479–505.

L. BARREIRA, YA. PESIN, J. SCHMELING, *Dimension of hyperbolic measure – A proof of the Eckmann-Ruelle conjecture (announcement)*, ERA-AMS **2** (1996), No. 1.

V. MAZ'YA, G. SCHMIDT, *On approximate approximations using Gaussian kernels*, IMA J. Numer. Anal., **16** (1996), pp. 13–29.

H. SCHURZ, *Asymptotical mean square stability of an equilibrium point of some linear numerical solutions with multiplicative noise*, J. Stoch. Anal. Appl., **14** (1996), pp. 313–354.

—, *Numerical regularization for SDEs: Construction of nonnegative solutions*, J. Dyn. Syst. Appl., **5** (1996), pp. 323–352.

V. SPOKOINY, *Adaptive hypothesis testing using wavelets*, Ann. Statist., **24** (1996), No. 6, pp. 2477–2498.

P. COLLI, J. SPREKELS, *Remarks on the existence for the one-dimensional Frémond model of shape memory alloys*, Z. Angew. Math. Mech., **76** (1996), Suppl. 2, pp. 413–416.

W. HORN, PH. LAURENÇOT, J. SPREKELS, *Global Solutions to a Penrose-Fife Phase-Field model Under Flux Boundary Conditions for the Inverse Temperature*, Math. Methods Appl. Sci., **19** (1996), pp. 1053–1072.

W. HORN, J. SOKOŁOWSKI, J. SPREKELS, *A control problem with state constraints for a phase-field model*, Control Cybernet., vol. **25** (1996), No. 6, pp. 1137–1153.

W. HORN, J. SPREKELS, S. ZHENG, *Global existence of smooth solutions to the Penrose-Fife model for Ising ferromagnets*, Adv. Math. Sci. Appl., **6** (1996), pp. 227–241.

S. RJASANOW, W. WAGNER, *A stochastic weighted particle method for the Boltzmann equation*, J. Comput. Phys., **124** (1996), pp. 243–253.

S. RJASANOW, W. WAGNER, *Stochastic systems of weighted particles approximating the spatially inhomogeneous Boltzmann equation*, Z. Angew. Math. Mech., **76** (1996), pp. 215-218.

S. RJASANOW, W. WAGNER, *Numerical study of a stochastic weighted particle method for a model kinetic equation*, J. Comput. Phys., **128** (1996), pp. 351-362.

W. WAGNER, *A functional law of large numbers for Boltzmann type stochastic particle systems*, Stochastic Anal. Appl., **14** (1996), pp. 591-636.

Beiträge zu Sammelwerken

G. ALBINUS, *Nonlinear Galerkin Methods for Evolution Equations with monotone Operators*, in: Proceedings of the 6th International Colloquium on Differential Equations, Plovdiv, Bulgaria, August 18-23, 1995 (D. Bainov, ed.), vol. **1**, Sofia, 1996, pp. 1-14.

R. ANTONOVA, I. BREMER, *Projektionsverfahren zur Simulation von Copolymerisationsprozessen*, in: Bericht zum Statusseminar „Anwendungsorientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik“ des BMBF, Forschungs- und Ingenieurzentrum der BMW AG, München, 26. Oktober 1995, Springer.

H. G. BOTHE, J. SCHMELING, *Die Hausdorff-Dimension in der Dynamik*, Felix Hausdorff zum Gedächtnis (E. Brieskorn, ed.), Braunschweig, Wiesbaden.

A. BOVIER, *Interfaces in random media*, in: Proceedings of the Workshop on Large deviations and statistical mechanics (P. Eichelsbacher, M. Löwe, eds.), (1996).

J. ELSCHNER, *Collocation and quadrature methods for Symm's integral equation on curves with corners*, in: Proceedings ICIAM '95 Hamburg, ZAMM, **76** (1996), Suppl. 1, pp. 11-14.

J. FUHRMANN, *On numerical solution methods for nonlinear parabolic problems*, in: Proceedings „Modelling and Computation in Environmental Sciences“, Stuttgart.

—, *Outlines of a modular algebraic multigrid method*, in: Proceedings Conference „Algebraic Multilevel Iteration Methods“ (O. Axelsson, B. Polman, eds.), Katholische Universität Nijmegen, Nijmegen, Niederlande, 1996, pp. 141-152.

H. GAJEWSKI, H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, H. STEPHAN, H. WENZEL, *Modellierung und Simulation von Quantum-Well-Halbleiterlasern*, in: Mathematik - Schlüsseltechnologie für die Zukunft (K.-H. Hoffmann, W. Jäger, Th. Lohmann, H. Schunck, eds.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996, pp. 281-292.

H. GAJEWSKI, K. ZACHARIAS, *A Mathematical Model of Emulsion Polymerization*, in: Scientific Computing in Chemical Engineering (F. Keil, W. Mackens, H. Voß, J. Werther, eds.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996, pp. 60-67.

F. GRUND, J. BORCHARDT, D. HORN, T. MICHAEL, H. SANDMANN, *Differential-algebraic systems in the chemical process simulation*, in: Scientific Computing in Chemical Engineering (F. Keil, W. Mackens, H. Voss, J. Werther, eds.), Springer-Verlag, Berlin, 1996, pp. 68-74.

F. GRUND, T. MICHAEL, L. BRÜLL, F. HUBBUCH, R. ZELLER, J. BORCHARDT, D. HORN, H. SANDMANN, *Numerische Lösung großer strukturierter DAE-Systeme in der chemischen Prozeßsimulation*, in: *Mathematik – Schlüsseltechnologie für die Zukunft* (K.-H. Hoffmann, W. Jäger, Th. Lohmann, H. Schunk, eds.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996, pp. 91–103.

S. HANDROCK-MEYER, *Identifiability of distributed physical parameters*, in: *Parameter Identification and Inverse Problems in Hydrology, Geology and Ecology* (J. Gottlieb, P. DuChateau, eds.), Kluwer Academic Publishers, 1996, pp. 225–231.

—, *Some remarks about utilization of wavelets for solving ill-posed problems*, in *Proceedings ICIAM '95 Hamburg*, ZAMM, **76** (1996), Suppl. 5, pp. 421–424.

G. HEBERMEHL, F.-K. HÜBNER, *Portabilität und Adaption von Software der linearen Algebra für Distributed Memory Systeme*, in: *Proceedings Workshop „Software Engineering im Scientific Computing“* (W. Mackens, S. M. Rump, eds.), Hamburg, 06.-08. Juni 1995, Vieweg, Braunschweig, 1996, pp. 135–142.

G. HEBERMEHL, R. SCHLUNDT, *Numerical Solutions for the Simulation of Monolithic Microwave Integrated Circuits*, in: *Book of Abstracts 9th Conference „European Consortium for Mathematics in Industry“*, Technical University of Denmark, Lyngby/Copenhagen, Dänemark, June 25-29, 1996, pp. 559–561.

D. HÖMBERG, *Mathematical models for the phase transitions in carbon steel*, in: *Progress in Industrial Math. at ECMI'94* (H. Neunzert, ed.), John Wiley & Sons and B. G. Teubner, 1996, pp. 358–369.

—, *Controlling the heat treatment of steel*, in: *Proc. SOR 95* (P. Kleinschmidt et al., eds.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996, pp. 178–183.

D. HORN, *Entwicklung einer Schnittstelle für einen DAE-Solver in der chemischen Verfahrenstechnik*, in: *Proceedings Workshop „Software Engineering im Scientific Computing“* (W. Mackens, S. M. Rump, eds.), Hamburg, 06.-08. Juni 1995, Vieweg, Braunschweig, 1996, pp. 249–255.

R. HÜNLICH, A. GLITZKY, J. GRIEPENTROG, W. RÖPKE, *Zu einigen Fragen der Modellierung und Simulation bei der Entwicklung von SiGe-Heterojunction-Bipolartransistoren*, in: *Mathematik - Schlüsseltechnologie für die Zukunft* (K.-H. Hoffmann, W. Jäger, Th. Lohmann, H. Schunck, eds.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996, pp. 303–313.

W. DAHMEN, B. KLEEMANN, S. PRÖSSDORF, *Multiscale methods for the solution of the Helmholtz and Laplace equations*, in: *Boundary Element Methods, Reports from the Final Conference of the Priority Research Programme 1989-1995 of the German Research Foundation*, Oct. 2-4, 1995 in Stuttgart (W. Wendland, ed.), Springer-Verlag, 1996.

W. DAHMEN, B. KLEEMANN, S. PRÖSSDORF, R. SCHNEIDER, *Multiscale methods for pseudodifferential equations*, in: *Proceedings ICIAM '95 Hamburg*, ZAMM, **76** (1996), Suppl. 1, pp. 7–10.

W. DAHMEN, A. KUNOTH, R. SCHNEIDER, *Operator equations, multiscale concepts and complexity*, in: *Lectures in Applied Mathematics* (J. Renegar, M. Shub, S. Smale, eds.), American Mathematical Society, Vol. **32** (1996), pp. 225–261.

A. KUNOTH, *Some remarks on stable multiscale bases for the numerical solution of elliptic partial differential equations*, in: Virtual Proceedings of the 9th Int. GAMM-Workshop on Parallel Multigrid Methods (G. Haase, U. Langer, eds.), 1996, 21 Seiten.

R. LAUTERBACH, *Symmetry Breaking in Dynamical Systems*, in: Nonlinear Dynamical Systems and Chaos, (Broer, v. Gils, Hoveijn, Takens, eds.), Progr. Nonlinear Differential Equations Appl., **19** (1996), pp. 121-143, Birkhäuser.

P. MATHÉ, *Optimal reconstruction of stochastic evolutions*, in: LAM: Proceedings of the 1995 Summer Seminar on Mathematics of Numerical Analysis: Real Number Algorithms (J. R. et al., eds.), American Mathematical Society.

H. J. MUCHA, *Distance based credit scoring*, in: Classification and Multivariate Graphics: Models, Software and Applications (H. H. Bock, H. J. Mucha, eds.), Tagungsreport Nr. 10, WIAS, Berlin.

H. J. MUCHA, *ClusCorr: Cluster analysis and multivariate graphics under MS EXCEL*, in: Classification and Multivariate Graphics: Models, Software and Applications (H. H. Bock, H. J. Mucha, eds.), Tagungsreport Nr. 10, WIAS, Berlin.

D. PETERHOF, L. RECKE, B. SANDSTEDE, *On frequency locking of self-pulsating two-section DFB lasers*, in: Self-Organization in Activator-Inhibitor Systems: Semiconductors, Gas-Discharge and Chemical Active Media (H. Engel, F.-J. Niedernostheide, H.-G. Purwins, E. Schöll, eds.), Wissenschaft & Technik-Verlag.

B. KLEEMANN, A. RATHSFELD, R. SCHNEIDER, *Multiscale methods for boundary integral equations and their application to boundary value problems in scattering theory and geodesy*, in: Boundary Elements: Implementation and Analysis of Advanced Algorithms. Proceedings of the 12th GAMM-Seminar, Kiel, January 19 to 21, 1996, Notes on Numerical Fluid Mechanics, Vol. **54** (1996) (W. Hackbusch, G. Wittum, eds.), Vieweg-Verlag, Braunschweig/Wiesbaden.

R. J. RUMPEL, *On the qualitative behaviour of nonlinear oscillators with dry friction*, in: Proceedings ICIAM 95, ZAMM **76** (1996) S2, p. 665 ff.

B. N. KHOROMSKIJ, G. SCHMIDT, *Asymptotically optimal interface solvers for the biharmonic Dirichlet problem on convex polygonal domains*, in: Proceedings ICIAM '95 Hamburg, ZAMM **76** (1996), Suppl. 1, pp. 231–234.

N. N. NEFEDOV, K. R. SCHNEIDER, A. SCHUPPERT, *Jumping behavior of the reaction rate of fast bimolecular reactions*, in: Proceedings ICIAM 95, ZAMM **76** (1996) S2, pp. 69–72.

K. R. SCHNEIDER, *On the existence of travelling waves in reaction-diffusion systems*, Proceedings of the First World Congress of Nonlinear Analysts, Tampa, Florida, August 19-26, 1992 (V. Lakshmikanthan, ed.), Walter de Gruyter Berlin - New York, 1996.

KARMESHU, H. SCHURZ, *Moment evolution of the outflow-rate from nonlinear conceptual reservoirs*, in: Surface-Water Hydrology (V. P. Singh, B. Kumar, eds.), Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, pp. 403–413.

H. SCHURZ, *Modelling and analysis of stochastic innovation diffusion*, in: Proceedings of ICIAM'95, Hamburg (R. M. O. Mahrenholz, K. Marti, eds.), ZAMM **76** (Suppl. 3), Applied Stochastics and Optimization, (1996), pp. 366–369.

6.2 Preprints, Reports

6.2.1 WIAS-Preprint-Serie

Preprints 1996¹

- [213] Björn Sandstede: Stability of N -fronts bifurcating from a twisted heteroclinic loop and an application to the FitzHugh–Nagumo equation.
- [214] Jürgen Sprekels, Songmu Zheng, Peicheng Zhu: Asymptotic behavior of the solutions to a Landau–Ginzburg system with viscosity for martensitic phase transitions in shape memory alloys.
- [215] Yuri I. Ingster: On some problems of hypothesis testing leading to infinitely divisible distributions.
- [216] Grigori N. Milstein: Evaluation of moment Lyapunov exponents for second order linear autonomous SDE.
- [217] Hans Günter Bothe: Shift spaces and attractors in non invertible horse shoes.
- [218] Gianfranco Chiocchia, Siegfried Pröbldorf, Daniela Tordella: The lifting line equation for a curved wing in oscillatory motion.
- [219] Pavel Krejčí, Jürgen Sprekels: On a system of nonlinear PDE's with temperature-dependent hysteresis in one-dimensional thermoplasticity.
- [220] Boris N. Khoromskij, Siegfried Pröbldorf: Fast computations with the harmonic Poincaré–Steklov operators on nested refined meshes.
- [221] Anton Bovier, Véronique Gayraud: Distribution of overlap profiles in the one-dimensional Kac–Hopfield model.
- [222] Jürgen Sprekels, Dan Tiba: A duality-type method for the design of beams.
- [223] Wolfgang Dahmen, Bernd Kleemann, Siegfried Pröbldorf, Reinhold Schneider: Multiscale methods for the solution of the Helmholtz and Laplace equation.
- [224] Herbert Gajewski, Annegret Glitzky, Jens Griepentrog, Rolf Hünlich, Hans-Christoph Kaiser, Joachim Rehberg, Holger Stephan, Wilfried Röpke, Hans Wenzel: Modellierung und Simulation von Bauelementen der Nano- und Optoelektronik.
- [225] Andreas Rathsfeld: A wavelet algorithm for the boundary element solution of a geodetic boundary value problem.
- [226] Sergej Rjasanow, Wolfgang Wagner: Numerical study of a stochastic weighted particle method for a model kinetic equation.
- [227] Alexander A. Gushchin: On an information-type inequality for the Hellinger process.

¹http://hyperg.wias-berlin.de/WIAS_publ_preprints_1996

- [228] Dietmar Horn: Entwicklung einer Schnittstelle für einen DAE–Solver in der chemischen Verfahrenstechnik.
- [229] Oleg V. Lepski, Vladimir G. Spokoiny: Optimal pointwise adaptive methods in nonparametric estimation.
- [230] Bernd Kleemann, Andreas Rathsfeld, Reinhold Schneider: Multiscale methods for boundary integral equations and their application to boundary value problems in scattering theory and geodesy.
- [231] Jürgen Borchardt, Ludger Bruell, Friedrich Grund, Dietmar Horn, Frank Hubbuch, Tino Michael, Horst Sandmann, Robert Zeller: Numerische Lösung großer strukturierter DAE–Systeme der chemischen Prozeßsimulation.
- [232] Herbert Gajewski, Klaus Zacharias: Global behaviour of a reaction–diffusion system modelling chemotaxis.
- [233] Frédéric Guyard, Reiner Lauterbach: Forced symmetry breaking perturbations for periodic solutions.
- [234] Vladimir G. Spokoiny: Adaptive and spatially adaptive testing of a nonparametric hypothesis.
- [235] Georg Hebermehl, Rainer Schlundt, Horst Zscheile, Wolfgang Heinrich: Simulation of monolithic microwave integrated circuits.
- [236] Georg Hebermehl, Rainer Schlundt, Horst Zscheile, Wolfgang Heinrich: Improved numerical solutions for the simulation of monolithic microwave integrated circuits.
- [237] Pavel Krejčí, Jürgen Sprekels: Global solutions to a coupled parabolic–hyperbolic system with hysteresis in 1–d magnetoelasticity.
- [238] Georg Hebermehl, Friedrich–Karl Hübner: Portabilität und Adaption von Software der linearen Algebra für Distributed Memory Systeme.
- [239] Michael H. Neumann: Multivariate wavelet thresholding: a remedy against the curse of dimensionality?
- [240] Anton Bovier, Miloš Zahradník: The low–temperature phase of Kac–Ising models.
- [241] Klaus Zacharias: A special system of reaction equations.
- [242] Susumu Okada, Siegfried Pröbldorf: On the solution of the generalized airfoil equation.
- [243] Alexey K. Lopatin: Oscillations and dynamical systems: Normalization procedures and averaging.
- [244] Grigori N. Milstein: Stability index for invariant manifolds of stochastic systems.
- [245] Luis Barreira, Yakov Pesin, Jörg Schmeling: Dimension of hyperbolic measures – A proof of the Eckmann–Ruelle conjecture.

- [246] Leonid M. Fridman, Rainer J. Rumpel: On the asymptotic analysis of singularly perturbed systems with sliding mode.
- [247] Björn Sandstede: Instability of localised buckling modes in a one-dimensional strut model.
- [248] Björn Sandstede, Christopher K.R.T. Jones, James C. Alexander: Existence and stability of N -pulses on optical fibers with phase-sensitive amplifiers.
- [249] Vladimir Maz'ya, Gunther Schmidt: Approximate wavelets and the approximation of pseudodifferential operators.
- [250] Gottfried Bruckner, Sybille Handrock-Meyer, Hartmut Langmach: On the identification of soil transmissivity from measurements of the groundwater level.
- [251] Michael Schwarz: Phase transitions of shape memory alloys in soft and hard loading devices.
- [252] Gottfried Bruckner, Masahiro Yamamoto: On the determination of point sources by boundary observations: uniqueness, stability and reconstruction.
- [253] Anton Bovier, Véronique Gayraud: Hopfield models as generalized random mean field models.
- [254] Matthias Löwe: On the storage capacity of the Hopfield model.
- [255] Grigori N. Milstein: Random walk for elliptic equations and boundary layer.
- [256] Lutz Recke, Daniela Peterhof: Abstract forced symmetry breaking.
- [257] Lutz Recke, Daniela Peterhof: Forced frequency locking in \mathbf{S}^1 -equivariant differential equations.
- [258] Udo Krause: Idealkristalle als Abelsche Varietäten.
- [259] Nikolaus Bubner, Jürgen Sprekels: Optimal control of martensitic phase transitions in a deformation-driven experiment on shape memory alloys.
- [260] Christof Külske: Metastates in disordered mean field models: random field and Hopfield models.
- [261] Donald A. Dawson, Klaus Fleischmann: Longtime behavior of a branching process controlled by branching catalysts.
- [262] Tino Michael, Jürgen Borchardt: Convergence criteria for waveform iteration methods applied to partitioned DAE systems in chemical process simulation.
- [263] Michael H. Neumann, Jens-Peter Kreiss: Bootstrap confidence bands for the autoregression function.
- [264] Silvia Caprino, Mario Pulvirenti, Wolfgang Wagner: Stationary particle systems approximating stationary solutions to the Boltzmann equation.

- [265] Wolfgang Dahmen, Angela Kunoth, Karsten Urban: Biorthogonal spline–wavelets on the interval – Stability and moment conditions.
- [266] Daniela Peterhof, Björn Sandstede, Arnd Scheel: Exponential dichotomies for solitary–wave solutions of semilinear elliptic equations on infinite cylinders.
- [267] Andreas Rathsfeld: A wavelet algorithm for the solution of a singular integral equation over a smooth two–dimensional manifold.
- [268] Jörg Schmeling, Serge E. Troubetzkoy: Dimension and invertibility of hyperbolic endomorphisms with singularities.
- [269] Erwin Bolthausen, Dmitry Ioffe: Harmonic crystal on the wall: a microscopic approach.
- [270] Nikolai N. Nefedov, Klaus R. Schneider: Delayed exchange of stabilities in singularly perturbed systems.
- [271] Michael S. Ermakov: On large and moderate large deviations of empirical bootstrap measure.
- [272] Priscilla E. Greenwood, Jiaming Sun: On criticality for competing influences of boundary and external field in the Ising model.
- [273] Michael S. Ermakov: On distinguishability of two nonparametric sets of hypothesis.
- [274] Henri Schurz: Preservation of probabilistic laws through Euler methods for Ornstein–Uhlenbeck process.
- [275] Lev B. Ryashko, Henri Schurz: Mean square stability analysis of some linear stochastic systems.
- [276] Nikolaus Bubner, Jan Sokołowski, Jürgen Sprekels: Optimal boundary control problems for shape memory alloys under state constraints for stress and temperature.
- [277] Alison M. Etheridge, Klaus Fleischmann: Persistence of a two–dimensional super–Brownian motion in a catalytic medium.
- [278] Sergej Rjasanow, Wolfgang Wagner: Stochastic interacting particle systems as a numerical tool.
- [279] Vadim G. Bondarevsky: Energetic systems and global attractors for the 3D Navier–Stokes equations.
- [280] Henri Schurz: The invariance of asymptotic laws of stochastic systems under discretization.
- [281] Michael Nussbaum: The Pinsker bound: a review.
- [282] Pierluigi Colli, Maurizio Grasselli, Jürgen Sprekels: Automatic control via thermostats of a hyperbolic Stefan problem with memory.

- [283] Anton Bovier, Véronique Gayraud: An almost sure central limit theorem for the Hopfield model.
- [284] Peter Mathé: Efficient mixing of product walks on product groups.
- [285] Günter Albinus: Convex analysis of the energy model of semiconductor devices.
- [286] Ilja Schmelzer: Postrelativity – a paradigm for quantization with preferred Newtonian frame.
- [287] Evgenii Ya. Khruslov, Holger Stephan: Splitting of some nonlocalized solutions of the Korteweg–de Vries equation into solitons.
- [288] Björn Sandstede, Arnd Scheel, Claudia Wulff: Dynamics of spiral waves on unbounded domains using center–manifold reductions.
- [289] Ion Grama, Michael Nussbaum: Asymptotic equivalence for nonparametric generalized linear models.
- [290] Pierluigi Colli, Jürgen Sprekels: Weak solution to some Penrose–Fife phase–field systems with temperature–dependent memory.
- [291] Vladimir G. Spokoiny: Estimation of a function with discontinuities via local polynomial fit with an adaptive window choice.
- [292] Peter E. Kloeden, Eckhard Platen, Henri Schurz, Michael Sørensen: On effects of discretization on estimators of drift parameters for diffusion processes.
- [293] Erlend Arge, Angela Kunoth: An efficient ADI–solver for scattered data problems with global smoothing.
- [294] Alfred Liemant, Ludwig Brehmer: A mean field approximation for hopping transport in disordered materials.
- [295] Michael H. Neumann: Strong approximation of density estimators from weakly dependent observations by density estimators from independent observations.
- [296] Lida V. Gilyova, Vladimir V. Shaidurov: A cascadic multigrid algorithm in the finite element method for the plane elasticity problem.
- [297] Oleg Lepski, Arkadi Nemirovski, Vladimir Spokoiny: On estimation of non–smooth functionals.
- [298] Luis Barreira, Yakov Pesin, Jörg Schmeling: On a general concept of multifractality: Multifractal spectra for dimensions, entropies, and Lyapunov exponents. Multifractal rigidity.
- [299] Luis Barreira, Jörg Schmeling: Any set of irregular points has full Hausdorff dimension and full topological entropy.
- [300] Jörg Schmeling: On the completeness of multifractal spectra.

- [301] Yury Kutoyants, Vladimir Spokoiny: Optimal choice of observation window for Poisson observations.
- [302] Sanjeeva Balasuriya, Christopher K.R.T. Jones, Björn Sandstede: Viscous perturbations of vorticity conserving flows and separatrix splitting.
- [303] Pascal Chossat, Frédéric Guyard, Reiner Lauterbach: Generalized heteroclinic cycles in spherically invariant systems and their perturbations.
- [304] Klaus R. Schneider: Decomposition and diagonalization in solving large systems.
- [305] Klaus Fleischmann, Achim Klenke: Convergence to a non-trivial equilibrium for two-dimensional catalytic super-Brownian motion.
- [306] Klaus Fleischmann, Vladimir A. Vatutin: Reduced subcritical Galton-Watson processes in a random environment.

6.2.2 WIAS-Report-Serie

Reports 1996²

- [10] Hans-Joachim Mucha, Hans-Hermann Bock (Eds.): Classification and multivariate graphics: models, software and applications.
- [11] Henri Schurz: Stability, stationarity, and boundedness of some implicit numerical methods for stochastic differential equations.

6.2.3 Preprints/Reports an anderen Einrichtungen

- [1] L. BARREIRA, Y. PESIN, J. SCHMELING, *Dimension of hyperbolic measures - A proof of the Eckmann-Ruelle conjecture*, Tech. Report 43, Schwerpunktprogramm Dynamik der DFG, 1996.
- [2] T. BARSCH, A. KUNOTH, K. URBAN, *Towards object oriented software tools for numerical multiscale methods for p.d.e.s using wavelets*, Tech. Report 127, RWTH Aachen, 1996.
- [3] H. G. BOTHE, *Shift spaces and attractors in non invertible horse shoes*, Tech. Report 30, Schwerpunktprogramm Dynamik der DFG, 1996.
- [4] B. FIEDLER, B. SANDSTEDDE, A. SCHEEL, C. WULFF, *Bifurcation from relative equilibria of noncompact group actions: Skew products, meanders, and drifts*, Preprint, Freie Universität Berlin, 1996.
- [5] F. GUYARD, R. LAUTERBACH, *Forced symmetry breaking for periodic solutions*, Preprint 36/96, Schwerpunktprogramm der DFG: Dynamik, Analysis, effiziente Simulation und Ergodentheorie, 1996.

²http://hyperg.wias-berlin.de/WIAS_publications_1996

- [6] J. SCHMELING, *A dimension formula for endomorphisms - The Belykh family*, Tech. Report 29, Schwerpunktprogramm Dynamik der DFG, 1996.
- [7] J. SCHMELING, S. TROUBETZKOY, *Dimension and invertibility of hyperbolic endomorphisms with singularities*, Tech. Report 24, Schwerpunktprogramm Dynamik der DFG, 1996.

6.3 Mitherausgabe von Zeitschriften

H. G. BOTHE, Editorial Board, *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, USA.

——, Editorial Board, *Annales de l'Institut Henri Poincaré, Probabilités et Statistiques*, Editions Gauthiers-Villars, Paris, Frankreich.

——, Editorial Board, *ESAIM: Probabilités et Statistique*, elektronisches Journal, Société de Mathématiques Appliquées et Industrielles (SMAI), Paris, Frankreich.

S. PRÖSSDORF, Editorial Board, *Advances in Computational Mathematics*, Baltzer, Amsterdam.

——, Editorial Board, *Complex Variables: Theory and Applications*, Gordon and Breach Science Publishers, New York.

——, Editorial Board, *Journal of Integral Equations and Applications*, The Rocky Mountain Mathematics Consortium, Lubbock.

——, Editorial Board, *Journal of Inverse and Ill-Posed Problems*, VSP, Zeist.

——, Editorial Board, *Mathematische Nachrichten*, Akademie Verlag GmbH, Berlin.

——, Editorial Board, *Zeitschrift für Analysis und ihre Anwendungen*, Heldermann Verlag, Lemgo.

J. SPREKELS, Editorial Board, *Advances in Mathematical Sciences and Applications*, Gak-
kotōsho, Tokio.

W. WAGNER, Editorial Board, *Monte Carlo Methods and Applications*, VSP, Zeist.

6.4 Vorträge und Gastaufenthalte von Mitarbeitern

G. ALBINUS, *Ljapunovfunktion und Zeitdiskretisierung für das Energiemodell*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 17. Januar.

—, *Zur räumlichen Diskretisierung des Energiemodells*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 14. Februar.

—, *Thermodynamik des Energiemodells des Ladungsträgertransportes in Halbleitern*, Technische Universität Berlin, 14. März.

—, *A thermodynamically motivated formulation of the energy model of semiconductor devices*, GAMM-Jahrestagung, Prag, Tschechische Republik, 30. Mai.

—, *Convex analysis of the energy model*, Conference in Nonlinear Analysis, Ittingen, Schweiz, 15. Oktober.

—, *Convex analysis of the energy model*, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Institut für Integrierte Systeme, Schweiz, 18. Oktober.

—, *Konvexe Analysis des Energiemodells für Halbleiter*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 6. November.

U. BANDELOW, *Modellierung der Dynamik von DFB-Halbleiterlasern am WIAS*, Siemens AG, München, 9. Oktober.

J. BORCHARDT, *Parallelization at the level of nonlinear equations*, DAE-Meeting, WIAS, 5. Juni.

—, *Parallel structured Newton-type methods*, Bayer AG, Leverkusen, 17. Oktober.

—, *Parallelisierung numerischer Verfahren für DAE-Systeme in der chemischen Prozesssimulation*, Technische Universität Darmstadt, 3. Dezember.

H. G. BOTHE, *Knoten und Dynamik*, Kolloquiumsvortrag, Technische Universität Dresden, Institut für Analysis, 1. Juli.

—, *Dynamik nicht eindeutiger hyperbolischer Abbildungen*, Universität Göttingen, 20. November.

—, *Eindimensionale hyperbolische Attraktoren in höherdimensionalen Mannigfaltigkeiten*, Universität Göttingen, 21. November.

—, *Differenzierbare Dynamik und Ergodentheorie. Eine Einführung*, Freie Universität Berlin, Institut für Stochastik und Ökonomie, 28. November.

—, *Einzugsbereiche von Attraktoren*, Technische Universität Dresden, Institut für Analysis, 9. Dezember.

A. BOVIER, *Rigorous results on the Hopfield model*, Freiburger Stochastik Tage, Freiberg, 28. März.

—, *Ising models with long-range interaction*, Universita Karlova, Prag, Tschechische Republik, 25. April.

—, *Rigorous results on the Hopfield model II*, Workshop „Mathematics of Spin Systems with Random Interactions“, WIAS, Berlin, 24. August.

—, *Rigorous results in the replica symmetric phase of the Hopfield model*, Konferenz „Statistical Mechanics as a Branch of the Probability Theory“, Erwin-Schrödinger Institut, Wien, Österreich, 20. September.

—, *Grands déviations et concentration de mesure dans des modèles de mécanique statistique*, Université Paul Sabatier, Toulouse, Frankreich, 11. Oktober.

—, *Statistical physics models with finite long range interaction*, Konferenz „Statistical Mechanics of Large Networks“, INRIA, Rocquencourt, Frankreich, 22. Oktober.

—, *Hopfield model*, Konferenz „Statistical Mechanics of Large Networks“, INRIA, Rocquencourt, Frankreich, 24. Oktober.

—, *Neural networks and statistical mechanics*, Universita Karlova, Prag, Tschechische Republik, 31. Oktober.

I. BREMER, *Simulation von Copolymerisationsprozessen*, BMBF-Workshop, Graal Müritz, 9. Mai.

—, *Code generation for fast simulation of copolymerization processes*, ECMI 96, Lyngby, Dänemark, 26. Juni.

—, *Banach spaces for modelling polymerization processes*, Workshop „Modelling of Chemical Reaction Systems“, Heidelberg, 24. Juli.

—, *Gleichungsgenerierung, Nutzeroberfläche und die Verwendung der Momentenmethode für die Simulation der Kinetik von Polymerisationsprozessen*, BASF AG, Ludwigshafen, 17. Dezember.

G. BRUCKNER, *On the identification of soil permeability from measurements of the groundwater level*, „Third Hellenic European Conference on Mathematics and Informatics“, Athen, Griechenland, 26. September.

N. BUBNER, *First order phase transitions in a deformation-driven experiment on shape memory alloys: Existence results and the control problem*, Conference „Optimization of Nonlinear Systems and of Free Boundaries“, Konstanza, Rumänien, 1. August.

J. ELSCHNER, *Optimal order approximation methods for boundary integral equations on curves with corners*, Korean Advanced Institute of Science and Technology, Taewon, Korea, 19. Juni.

—, *A new approach to trigonometric approximation methods for boundary integral equations*, Workshop „Boundary Element Methods“, Ajou University, Suwon, Korea, 20. Juni.

—, *The h-p version of spline approximation methods for Mellin convolution equations*, Workshop on Boundary Element Methods, Ajou University, Suwon, Korea, 21. Juni.

—, *The double layer potential operator over polyhedral domains*, Seoul National University, Korea, 24. Juni.

—, *Trigonometrische Approximationsverfahren für Randintegralgleichungen*, Kolloquium des Fachbereichs Mathematik, Universität Mainz, 27. Juni.

—, *Trigonometric approximation methods for boundary integral equations on curves with corners*, 5th International Colloquium on Numerical Analysis, Plovdiv, Bulgarien, 15. August.

—, *On trigonometric approximation of Mellin convolution equations*, Conference on Analysis, Numerics and Applications of Differential and Integral Equations, Stuttgart, 11. Oktober.

K. FLEISCHMANN, *A super-Brownian motion with a locally infinite catalytic mass*, 4th World Congress of Bernoulli Society, Wien, Österreich, 30. August.

—, *Stochastische Aspekte einer Klasse von katalytischen Reaktions-Diffusions-Gleichungen*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 13. November.

J. FUHRMANN, *A framework for the solution of nonlinear parabolic equations*, Tagung „Porous Media“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 27. Februar.

—, *Algebraic multilevel methods for porous media flow problems*, 9th International GAMM-Workshop „Parallel Multigrid Methods“, Strobl, Österreich, 15. Mai.

—, *pdelib- eine modulare Toolbox für Simulationsprogramme mit KASKADE-Schnittstelle*, Workshop „Datenstrukturen für Adaptive Multilevel-FEM-Verfahren“, WIAS, Berlin, 29. Mai.

—, *Outlines of a modular algebraic multigrid method*, Conference „Algebraic Multilevel Iteration Methods“, Nijmegen, Niederlande, 15. Juni.

—, *Numerical solution of degenerate parabolic equations*, ECMI, Lyngby, Dänemark, 29. Juni.

—, *On the numerical solution of degenerates parabolic equations*, EDF-FBP Workshop „Phase Transitions and Surface Tension“, WIAS, Berlin, 12. September.

—, *OpenGL-basierte Online Graphik in KASKADE*, KASKADE-Tag, WIAS, Berlin, 20. September.

—, *Möglichkeiten von OpenGL und die OpenGL-basierte Toolbox gltools des WIAS*, Daimler Benz, Ulm, 9. Dezember.

—, *Modulare algebraische Mehrgitterverfahren*, Universität Karlsruhe, 16. Dezember.

H. GAJEWSKI, *Drift-Diffusionsprozesse in Halbleitern*, Symposium „Komplexe nichtlineare Prozesse“, Fritz-Haber-Institut, Berlin, 3. März.

—, *Analysis und Numerik von Halbleiter-Heterostrukturen*, Lehrstuhl für Technische Elektrophysik, (FORTWIHR-Seminar), Technische Universität München, 10. Dezember.

A. GLITZKY, *Clusterreaktionen bei Elektro-Reaktions-Diffusionsgleichungen in Heterostrukturen*, DMV-Jahrestagung, Jena, 20. September.

—, *Electro-reaction-diffusion in heterostructures*, Conference in Nonlinear Analysis, Ittingen, Schweiz, 15. Oktober.

J. A. GRIEPENTROG, *An application of the implicit function theorem to an energy model of the semiconductor theory*, GAMM-Jahrestagung, Prag, Tschechische Republik, 30. Mai.

F. GRUND, *Lineare Solver*, DAE-Meeting, WIAS, 29. Februar.

—, *Parallel direct sparse solver for the plant simulation code SPEEDUP*, DAE-Meeting, AspenTech, Cambridge, Großbritannien, 23. Mai.

F. GUYARD, *Forced symmetry breaking for periodic orbits*, Oberseminar „Nichtlineare Dynamik“, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, 30. Januar.

—, *Forced symmetry breaking for periodic solutions*, Seminar of the Institut Nonlinéaire de Nice, Nizza, Frankreich, 19. April.

—, *Forced symmetry breaking for periodic solutions for ODE's*, Tagung „Dynamical Systems Methods in Fluid Mechanics“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 4. Juli.

S. HANDROCK-MEYER, *Identifiability of distributed parameters for some classes of quasi-linear differential equations*, 2nd World Congress of Nonlinear Analysis, Athen, Griechenland, 10. Juli.

—, *An inverse problem from the groundwater modelling*, Conference „Inverse and Ill-Posed Problems“, Moskau, Rußland, 12. September.

G. HEBERMEHL, *Numerical solutions for the simulation of monolithic microwave integrated circuits*, ECMI, Lyngby, Dänemark, 29. Juni.

—, *Das Eigenwertproblem bei der Simulation von monolithisch integrierten Mikrowellenschaltungen*, DMV-Jahrestagung, Jena, 17. September.

D. HÖMBERG, *Ein mathematisches Modell für die Induktionswärmebehandlung*, TU Bergakademie Freiberg, 30. Januar.

—, *Mathematical models for the heat treatment of steel*, ECMI, Lyngby, Dänemark, 25. Juni.

—, *Mathematische Modellierung und Simulation des Laser-Härtens*, TU Bergakademie Freiberg, 10. Juli.

—, *Optimal control of laser hardening*, Conference „Optimization of Nonlinear Systems and of Free Boundaries“, Konstanz, Rumänien, 30. Juli.

—, *A mathematical model for the surface heat treatment of steel*, ESF-FBP Workshop „Phase Transitions and Surface Tension“, WIAS, Berlin, 9. September.

—, *Phase transitions and the heat treatment of steel*, California State University, Northridge, USA, 18. Oktober.

—, *Optimal control of induction heat treatments*, 33rd Annual Technical Meeting of the Society of Engineering Science, Tempe, USA, 23. Oktober.

—, *Mathematical models for phase transitions in steel*, Auburn University, Auburn, USA, 25. Oktober.

—, *Mathematical models for the surface heat treatment of steel*, University of Minnesota, Minneapolis, USA, 12. November.

—, *Mathematical models for the surface heat treatment of steel*, Oakland University, Rochester, USA, 26. November.

D. IOFFE, *A microscopic approach to the Winterbottom construction*, Workshop „Interface Problems in Statistical Mechanics“, Cartona, Italien, 12. Juni.

—, *Wulff construction and related limit theorem*, Minikurs, Konferenz „Large Deviations, Statistical Mechanics“, Marseille, Frankreich, 2. Juli.

—, *Winterbottom crystals: A microscopic approach*, University of California, Los Angeles, USA, 11. September.

—, *A microscopic construction of harmonic crystal shapes*, Courant Institute of Mathematical Sciences, New York, USA, 20. September.

—, *Ising model: Local limit theorems in statistical mechanical setting*, Minikurs, Sommerschule „Mathematics of phase transitions“, Prag, Tschechische Republik, 30. September, 2., 4., 9. und 11. Oktober.

—, *Large deviations and droplet construction for higher dimensional SOS models*, Tagung „Stochastische Analysis“, Mathematisches Forschungszentrum Oberwolfach, 31. Oktober.

—, *A microscopic approach to the three dimensional Winterbottom construction*, Technion Haifa, Israel, 26. November.

A. JUHL, *Currents and zeta functions*, Chalmers University of Technology, Göteborg, Schweden, 27. März.

—, *Canonical currents and the singularities of zeta functions*, International Conference „Arithmetical Aspects of Quantum Chaos“, St. Andreasberg, 19. Juni.

H.-CHR. KAISER, *Simulation of nanoelectronic devices with ToSCA including the stationary Schrödinger-Poisson system with a Kohn-Sham potential*, DMV-Jahrestagung, Jena, 17. September.

O. KLEIN, *Approximation of a Penrose-Fife system and some Stefan problems*, University of Sussex, Brighton, Großbritannien, 1. Mai.

—, *On a time-discrete scheme for a Penrose-Fife phase-field system: Existence, convergence and numerical results*, ESF-FBP Workshop „Phase Transitions and Surface Tension“, WIAS, Berlin, 12. September.

—, *Die numerische Implementation der Penrose-Fife Phasenfeldgleichungen im Rahmen von KASKADE*, KASKADE-Tag, WIAS, Berlin, 20. September.

—, *Approximation of the Stefan problem by time-discrete Penrose-Fife phase-field systems*, ESF-FBP Workshop „Computation of Free Boundaries and Optimal Shapes“, Lamoura (Jura), Frankreich, 24. September.

R. KORNUBER, *On adaptive monotone multigrid methods*, University of Sussex, Brighton, Großbritannien, 28. Februar.

—, *Adaptive monotone multigrid methods for some free boundary problems*, University of Durham, Großbritannien, 1. März.

A. KUNOTH, *On the construction of stable multiscale bases on the interval*, Istituto di Analisi Numerica del C.N.R., Pavia, Italien, 14. Februar.

—, *Stable multiscale bases on the interval – Applications and construction*, Conference „Spline Functions and the Theory of Wavelets“, Week on Wavelets and Partial Differential Equations, Montréal, Kanada, 5. März.

—, *Some aspects on the computation of stable multiscale bases and refinable integrals*, Workshop on Multiscale Methods in Numerical Analysis, Laboratoire ASCI-IDRIS, Orsay, Paris, Frankreich, 13. März.

—, *Some aspects on the computation of stable multiscale bases on the interval*, 7. Mecklenburgische Frühjahrsschule „Algorithmische Aspekte von Wavelet- und Approximationsmethoden“, Schloß Groß Plasten, Waren/Müritz, 19. März.

—, *Konstruktion biorthogonaler Wavelets auf dem Intervall für Operatorgleichungen*, Kolloquium der Institute für Informatik und Mathematik, Universität zu Lübeck, 24. April.

—, *Some remarks on stable multiscale bases for the numerical solution of elliptic partial differential equations*, 9th GAMM-Workshop on Multiscale Methods, Strobl, Österreich, 16. Mai.

—, *Some remarks on stability and moment conditions for biorthogonal spline wavelets on the interval*, 3rd International Conference „Curves and Surfaces“, Chamonix Mont Blanc, Frankreich, 27. Juni.

—, *Biorthogonale Wavelets auf dem Intervall*, Lehrstuhlseminar des Lehrstuhls für Prozeßtechnik, RWTH Aachen, 17. Juli.

—, *Biorthogonal spline-wavelets on the interval – Construction and remarks on the application in CAGD*, Department of Computer Science and Engineering, Arizona State University, Tempe, Arizona, USA, 1. Oktober.

—, *Some remarks on the construction of biorthogonal spline-wavelets on the interval*, Seminar on Applied Mathematics, Department of Mathematics, Texas A&M University, College Station, Texas, USA, 7. Oktober.

—, *Some remarks on the construction of biorthogonal spline-wavelets on the interval*, Applied Math Seminar, Department of Mathematics, University of South Carolina, Columbia, USA, 16. Oktober.

—, *Biorthogonale spline-wavelets auf dem Intervall – Bemerkungen zu ihrer Verwendung in Software-Tools*, Arbeitstreffen „Software-Entwicklung für Multiskalenverfahren“, Institut für Geometrie und Praktische Mathematik, RWTH Aachen, 18.–19. November.

—, *Konstruktion biorthogonaler Spline-Wavelets auf dem Intervall*, Fakultät für Mathematik, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, 10. Dezember.

—, *Multilevel-Vorkonditionierung für optimale Steuerungsprobleme*, Kolloquium des Graduiertenkollegs, Fakultät für Mathematik, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, 13. Dezember.

H. LANGMACH, *sxgrid – eine C-Schnittstelle für den KASKADE-Kern*, KASKADE-Tag, WIAS, Berlin, 20. September.

R. LAUTERBACH, *Dynamische Systeme und Symmetrie*, Universität Potsdam, 29. Januar.

—, *Eine komplexe Takens-Bogdanov-Singularität in einem Modell eines Mehrsektions-DFB-Lasers*, Gesamthochschule Essen, 24. April.

—, *Heterokline Zykel: Erzwungene Symmetriebrechung und Modenkopplungen*, Freie Universität Berlin, 23. Mai.

—, *Heteroclinic cycles: Forced symmetry breaking and mode couplings*, Universität Stuttgart, 28. Juni.

—, *Mode interactions and forced symmetry breaking*, Tagung „Fluid Mechanics“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 4. Juli.

—, *Forced symmetry breaking*, 2nd World Congress of Nonlinear Analysts, Athen, Griechenland, 13. Juli.

—, *Dynamik und Symmetrie*, Gesamthochschule Kassel, 19. Juli.

—, *Forced symmetry breaking*, 163. WE-Heraeus-Seminar „Physics and Dynamics between Chaos, Order and Noise“, Berlin, 29. August.

—, *Dynamik und Symmetrie zwischen Ordnung und Chaos*, Universität Augsburg, 22. November.

P. MATHÉ, *On the use of quasi-random numbers to solve SDEs*, 2nd International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing, Salzburg, Österreich, 11. Juli.

—, *Efficient mixing on product spaces*, Seminar „Continuous Algorithms and Complexity“, Dagstuhl, 21. Oktober.

—, *Möglichkeiten und Grenzen von Monte-Carlo-Verfahren der globalen Optimierung*, Institutskolloquium, TFH Wedding, Berlin, 29. Oktober.

—, *50 Jahre Monte-Carlo-Verfahren: Kein Rückblick*, Fachbereichskolloquium, Freie Universität Berlin, 12. Dezember.

T. MICHAEL, *Algebro-Differentialgleichungen in der chemischen Prozeßsimulation*, Humboldt-Universität zu Berlin, 22. Mai.

—, *Waveform-Iteration für semiexplizite DAE vom Index 1*, Technische Universität Darmstadt, 3. Dezember.

G. N. MILSTEIN, *Random walk over small spheres for elliptic equations and calculation of boundary layers*, 4th World Congress of the Bernoulli Society, Wien, Österreich, 26. August.

—, *Stability index for invariant manifolds of stochastic systems*, Universität Bremen, 17. Oktober.

H.-J. MUCHA, *Clusteranalyse*, Vorlesungsreihe „Multivariate Statistik“, Humboldt-Universität zu Berlin, 18. Januar.

—, *Adaptive cluster analysis techniques – Software and applications*, Konferenz IFCS'96, Kobe, Japan, 30. März.

—, *Clusteranalyse, Kredit Scoring*, Vortragsreihe Daimler Benz Forschungszentrum, Ulm, 24. Juni.

—, *Datenanalyse unter MS-EXCEL*, Innovationsmesse, Leipzig, 28. September.

—, *Distanzbasiertes Kredit Scoring*, Herbsttagung der Gesellschaft für Klassifikation, WIAS Berlin, 2. November.

—, *Das Clusteranalyseprojekt für die Data Mining Software Clementine*, Daimler Benz Forschungszentrum Ulm, 9. Dezember.

—, *Lernen mit qualitativen und gemischten Attributen; Ein empirischer Vergleich statistischer und neuronaler Lernalgorithmen zur Überprüfung der Kreditwürdigkeit*, 7. Tagung Geld, Finanzen, Banken und Versicherungen (GFBV'96), Karlsruhe, 12. Dezember.

W. MÜLLER, *Optimal control of batch distillation processes*, ECMI 96, Lyngby, Dänemark, 27. Juni.

—, *Optimale Steuerung von Batchdestillationsprozessen*, Forschungsseminar Optimierung, Humboldt-Universität zu Berlin, 11. Juli.

—, *Zusammenarbeit von BASF AG und WIAS zur Offline-Optimierung diskontinuierlicher Destillationsprozesse*, BASF AG, Ludwigshafen, 17. Dezember.

—, *Black-box-Optimierung mit CHEMADIS*, BASF AG, Ludwigshafen, 17. Dezember.

M. NEUMANN, *Bootstrap-Konfidenzbänder in der nichtparametrischen Regression*, „Freiberger Stochastiktage“, Freiberg, 27. März.

—, *Multivariate wavelet thresholding: A remedy against the curse of dimensionality?*, 4th World Congress of the Bernoulli Society, Wien, Österreich, 27. August.

—, *Bootstrap confidence bands in nonparametric autoregression*, Symposium on Operations Research 96, Braunschweig, 6. September.

—, *Strong approximations and bootstrap in nonparametric autoregression*, Seminar on Mathematical Statistics Paris-Berlin, Garchy, Frankreich, 4. Oktober.

—, *Strong approximations in time series models*, Louvain-la-Neuve, Belgien, 5. Dezember.

—, *Starke Approximationen in der Zeitreihenanalyse*, SFB 373, Berlin, 11. Dezember.

—, *Waveletmethoden in der nichtparametrischen Kurvenschätzung*, Universität Osnabrück, 13. Dezember.

—, *Das Bootstrap-Prinzip und Anwendungen in der Zeitreihenanalyse*, Universität Kaiserslautern, 17. Dezember.

M. NUSSBAUM, *Grundprinzipien der Asymptotischen Statistik*, Technische Universität Berlin, Vortragsreihe 11., 12., 18., 19., 25., 26. Januar.

—, *Asymptotic equivalence of nonparametric experiments via Skorokhod embedding of partial sums*, Institute for Mathematical Statistics „Eastern Regional Meeting“, Richmond, USA, 17. März.

—, *Asymptotic equivalence of statistical experiments via Martingale methods*, Universität Leiden, Niederlande, 25. April.

—, *Deficiency distance approximation for nonparametric experiments of counting processes*, Workshop „Statistics of Stochastic Processes“, Sandbjerg Manor, Dänemark, 2. Mai.

—, *Approximation of statistical experiments for ill-posed function estimation problems*, Seminar „Inverse Problems and Estimation in Function Spaces“, Baarlo, Niederlande, Vortragsreihe, 2. – 7. Juni.

—, *Nonlinear smoothing and approximation of experiments*, 59th IMS Annual Meeting, Chicago, USA, 7. August.

—, *Asymptotic equivalence of experiments: Problems and perspectives*, Seminar on Mathematical Statistics Paris-Berlin, Garchy, Frankreich, 3. Oktober.

—, *Asymptotische Äquivalenz statistischer Experimente*, Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Operations Research, 12. November.

—, *Asymptotic equivalence for counting process experiments via Skorokhod embedding*, Ecole Normale Supérieure, Paris, Frankreich, 9. Dezember.

—, *Asymptotische Äquivalenz von Experimenten: Ergebnisse und Probleme*, Wirtschaftsuniversität Wien, Österreich, 19. Dezember.

D. PETERHOF, *Untersuchungen der nichtlinearen Dynamik von Mehrsektions-DFB-Lasern*, Treffen der Teilnehmer des DFG Schwerpunktprogrammes „Strukturbildung in dissipativen kontinuierlichen Systemen“, Goslar, 16. März.

—, *Die Navier-Stokes-Gleichungen im dünnen Kugelspalt*, Oberseminar „Nichtlineare Dynamik“, Freie Universität Berlin, 9. Juli.

J. POLZEHL, *Projection pursuit discriminant analysis*, Herbsttagung der Gesellschaft für Klassifikation, WIAS, Berlin, 2. November.

S. PRÖSSDORF, *Recent results on wavelet approximation methods for integral and pseudodifferential equations*, Instituto Superior Técnico, Lissabon, Portugal, 1. Juli.

—, *Wavelets in the numerical analysis of boundary integral equations*, XIV Summer School of Computational Mathematics, Vico Equense, Italien, 21. September.

—, *Boundary element methods using splines with multiple knots*, 3rd International Conference on Functional Analysis and Approximation Theory, Acquafredda di Maratea, Italien, 27. September.

—, *New results on wavelet methods for integral equations*, Politecnico di Torino, Italien, 30. September.

—, *Boundary element collocation methods with non-smoothest splines*, Conference on Analysis, Numerics and Applications of Differential and Integral Equations, Stuttgart, 9. Oktober.

—, *Recent developments in the wavelet analysis*, Universität Linköping, Schweden, 8. November.

—, *Multiwavelets in Randelementmethoden*, Universität Stuttgart, 19. Dezember.

A. RATHSFELD, *A wavelet algorithm for the boundary element solution of a geodetic boundary value problem*, GAMM-Seminar „Boundary Elements: Implementation and Analysis of Advanced Algorithms“, Kiel, 19. Januar.

—, *Error estimates and extrapolation for the numerical solution of Mellin convolution equations*, Conference „Mathematics of Finite Elements and Applications“, Brunel University, Uxbridge, Großbritannien, 15. Juni.

—, *Wavelet algorithms for BEM*, Conference „Numerical Methods and Computational Mechanics in Science and Engineering“, University of Miskolc, Ungarn, 16. Juli.

—, *Wavelet algorithms for BEM*, 7th International Congress on Computational and Applied Mathematics, Leuven, Belgien, 25. Juli.

—, *A wavelet collocation algorithm for the solution of a two-dimensional singular integral equation*, Conference on Analysis, Numerics and Applications of Differential and Integral Equations, Stuttgart, 11. Oktober.

—, *Wavelets and the numerical solution of integral equations*, Vortragsreihe an der Universität Oulu, Finnland, 18. – 21. November.

L. RECKE, *Frequency locking of rotating wave solutions and generation of modulated wave solutions by forcings of rotating wave type*, Tagung „Nonlinear Boundary Value Problems: Existence, Bifurcation and Stability of Solutions“, Granada, Spanien, 21. September.

—, *Lösungsfortsetzung bei Gleichungen mit Äquivarianz bzw. mit erzwungener Symmetriebrechung*, Oberseminar „Nichtlineare Dynamik“, WIAS, Berlin, 22. Oktober.

—, *Reguläre Mengen und Randwertprobleme mit gemischten Randbedingungen*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 27. November.

J. REHBERG, *Resultate zum Schrödinger-Poisson-System*, Technische Universität Berlin, 22. Januar.

—, *Analysis and numerical treatment of the Schroedinger Poisson system with exchange-correlation potential in a bounded domain*, Workshop „Transport Quantique“, Institut d’Electronique et de Microélectronique du Nord, Lille, Frankreich, 21. März.

—, *The Schroedinger-Poisson system with Kohn-Sham potential - Analysis and numerical treatment*, Ninth III-V Semiconductor Device Simulation Workshop, Eindhoven University of Technology, Niederlande, 9. Mai.

—, *Das Schrödinger-Poisson-System: Vom Dunford-Kalkül zu physikalischen Abschätzungen*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 22. Mai.

—, *Neues zum Schrödinger-Poisson-System*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 20. November.

G. REINHARDT, *Visualisierung und Clusteranalyse mit AVS*, Herbsttagung der Gesellschaft für Klassifikation, WIAS, Berlin, 1. November.

—, *Numerische Aspekte bei Algorithmen der partitionierenden Clusteranalyse*, Daimler Benz, Ulm, 9. Dezember.

R. RUMPEL, *Singularly perturbed systems with sliding mode*, Samara State Academy, Samara, Rußland, 16. April.

—, *Singularly perturbed systems with sliding mode*, Moscow State University, Moskau, Rußland, 23. April.

—, *Singulär gestörte Systeme mit Unstetigkeitsflächen*, Forschungsseminar „Algebroid-Differentialgleichungen“, Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Mathematik, 8. Mai.

—, *Deterministisches Chaos: Gefahr oder Schlüssel zur Zukunft? 2.* Bucher Zukunftswerkstatt, Max-Delbrück-Zentrum, Berlin, 17. Mai.

—, *Coupled oscillators with dry friction and a small parameter*, EUROMECH Colloquium 351: „Systems with Coulomb friction“, Vadstena, Schweden, 5. August.

—, *Singulär gestörte Systeme mit trockener Reibung*, Minisymposium „Maschinen mit Reibung“, WIAS, Berlin, 28. November.

H. SANDMANN, *Numerische Lösung von DAE’s der chemischen Verfahrenstechnik*, DAE-Koordinationstreffen, Universität Rostock, Graal-Müritz, 10. Mai.

B. SANDSTEDE, *Dynamics of pulse-packets*, US-Japan Conference „Singular Perturbations and Dynamical Systems“, Calloway Garden, USA, 11. März.

—, *Interaction of pulses in dissipative systems*, CDSNS-Seminar, Georgia Institute of Technology, Atlanta, USA, 22. April.

—, *Interaction of pulses in dissipative systems*, Berliner Dynamik-Kolloquium (gemeinsames Kolloquium von WIAS, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin und Freier Universität), Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, 3. Mai.

—, *Stability of multiple-pulses*, SIAM Annual Meeting, Kansas City, USA, 23. Juli.

—, *Dynamics of pulse packets*, Nonlinear Dynamics Seminar, Princeton University, USA, 27. September.

—, *Dynamics of pulse packets*, Kolloquium, University of New Mexico, Albuquerque, USA, 15. Oktober.

—, *Interaction of pulses*, LCDS Seminar, Brown University, Providence, USA, 2. Dezember.

—, *Fronts and pulses in the FitzHugh-Nagumo equation*, Applied Mathematics Seminar, Ohio State University, Columbus, USA, 6. Dezember.

R. SCHLUNDT, *Das Randwertproblem und die Streumatrixberechnung bei der Simulation von monolithisch integrierten Mikrowellenschaltungen*, DMV-Jahrestagung, Jena, 17. September.

J. SCHMELING, *Ergodic and dimension theory of hyperbolic endomorphisms with singularities*, Pennsylvania State University, University Park, USA, 21. März.

—, *Dimension of hyperbolic measures – A proof of the Eckmann-Ruelle conjecture*, Pennsylvania State University, University Park, USA, 9. Mai.

—, *Ergodic properties of endomorphisms - A criterion for invertibility*, North Western University of Evanston, Illinois, USA, 24. April.

—, *Dimension of hyperbolic measures – A proof of the Eckmann-Ruelle conjecture*, Kolloquium des Fachbereichs Mathematik der Freien Universität Berlin, 20. Juni.

—, *Über die punktweise Dimension von Maßen*, Universität Heidelberg, 23. Juli.

—, *A proof of the Eckmann-Ruelle conjecture*, Workshop „Ergodic Theory and Dynamical Systems“, WIAS, Berlin, 27. August.

—, *A proof of the Eckmann-Ruelle conjecture*, Kolloquium des Departments of Mathematics an der University of Alabama at Birmingham, USA, 21. Oktober.

I. SCHMELZER, *Teil 1: Kontravariante Geometriebeschreibung in C++; Teil 2: Probleme der Gittergenerierung für kontravariante Geometriebeschreibung*, Gittergenerierungstag, WIAS, Berlin, 4. November.

G. SCHMIDT, *Approximate refinement equations and wavelet constructions*, Institutsseminar, Universität Linköping, Schweden, 7. März.

—, *Approximate wavelets and the approximation of pseudodifferential operators*, Conference on Analysis, Numerics and Applications of Differential and Integral Equations, Stuttgart, 11. Oktober.

K. R. SCHNEIDER, *Differential-Algebraische Systeme und Symmetrien*, Workshop „Deskriptorsysteme“, Paderborn, 18. März.

—, *Degenerate singularly perturbed systems*, 2nd World Congress of Nonlinear Analysts, Athen, Griechenland, 17. Juli.

—, *Singularly perturbed systems under almost periodic forcing*, 163. WE-Heraeus-Seminar „Physics and Dynamics between Chaos, Order and Noise“, Berlin, 27. August.

—, *The principle of exchange of stabilities in singularly perturbed systems*, Tagung „Nonlinear Boundary Value Problems: Existence, Bifurcation and Stability of Solutions“, Granada, Spanien, 19. September.

—, *Bifurcations in nonlinear control systems*, Tagung „Regelungstheorie“, Mathematisches Forschungszentrum Oberwolfach, 25. November.

—, *Stabilitätswechsel in singular gestörten Systemen*, Technische Universität Dresden, 16. Dezember.

J. SCHULT, *Multiwavelets als Ansatzfunktionen numerischer Verfahren für periodische Pseudodifferentialgleichungen*, Forschungskolloquium, Universität Rostock, 6. Dezember.

H. SCHURZ, *Some aspects of stochastic numerical analysis for stochastic differential equations*, Humboldt-Universität zu Berlin, 6. Februar.

—, *Convergence, stability and boundedness of numerical methods for stochastic dynamical systems*, „Freiberger Stochastiktag“, Freiberg, 28. März.

—, *Anwendungen und Probleme in der stochastischen Analysis dynamischer Systeme*, WIAS-Kolloquium „Angewandte Mathematik“, Berlin, 1. April.

—, *Stochastic innovation diffusion with applications in marketing and finance*, Humboldt-Universität zu Berlin, 18. April.

—, *Numerical solution of SDEs through computer experiments*, Institut für Mechanik, Universität Innsbruck, Österreich, 23. Mai.

—, *Numerical regularization of SDEs and some applications to modelling of interest rates*, Workshop „Monte Carlo Methods in Finance“, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Schweiz, 18. Juni.

—, *Stochastic Taylor expansions for SDEs*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2. Juli.

—, *Mean square analysis of nonlinear SDEs under nonclassical assumptions*, 2nd World Congress of Nonlinear Analysts, Athen, Griechenland, 15. Juli.

—, *Implizite Methoden für stochastische Differentialgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 3. Dezember.

M. SCHWARZ, *Phase transitions of SMA's in soft- and hard loading devices*, ESF-Workshop „Damage and Free Boundaries“, Moissac, Frankreich, 20. März.

V. SPOKOINY, *Testing of components of additive models*, ENSAE, Paris, Frankreich, 10. Februar.

—, *Nonparametric hypothesis testing and estimating non-smooth functionals*, Universität Paris VI, Frankreich, 15. Februar.

—, *Adaptive hypothesis testing using wavelets*, Universität Paris XIII, Frankreich, 17. Februar.

—, *Pointwise adaptive methods in nonparametric estimation and hypothesis testing*, 4th World Congress of the Bernoulli Society, Wien, Österreich, 26. August.

—, *On large deviation efficiency in statistical inference*, 4th World Congress of the Bernoulli Society, Wien, Österreich, 27. August.

—, *On structure adaptive estimation*, Seminar on Mathematical Statistics Paris-Berlin, Garchy, Frankreich, 1. Oktober.

—, *Large deviation principle in statistics*, Universität Tel-Aviv, Israel, 12. November.

J. SPREKELS, *On a system of nonlinear PDE's with temperature-dependent hysteresis*, ESF-Workshop „Damage and Free Boundaries“, Moissac, Frankreich, 21. März.

—, *Temperature-dependent hysteresis in one-dimensional thermoplasticity*, ESF-Workshop „Lower Dimensional Interfaces: Ginzburg-Landau Equations and the Evolution of Point and Line Singularities“, SFB 256, Bonn, 29. Mai.

—, *Temperature-dependent hysteresis in one-dimensional thermoplasticity*, ESF-Workshop „Models of hysteresis“, Levico, Italien, 26. Juni.

—, *Phase field models for diffusive phase transitions and hysteresis phenomena*, 4th International Summer School on Evolution Equations, Prag, Tschechische Republik, Vortragsreihe, 15., 16., 18. Juli.

—, *Identification of distributed parameters - An overview*, PTB Euroconference „Advanced Mathematical Tools in Metrology III“, Berlin, 28. September.

—, *A thermodynamic theory of hysteresis operators in thermoplasticity*, 5th International Conference on Evolution Equations and Their Applications to Technology, Hiroshima, Japan, 30. Oktober.

W. WAGNER, *Stochastic particle methods for Boltzmann type equations*, Tagung „Analytische und numerische Approximationsmethoden für Probleme der Plasmaphysik, der Physik verdünnter Gase und von Halbleitern“, Mathematisches Forschungszentrum Oberwolfach, 16. Mai.

—, *Stochastic interacting particle systems as a numerical tool*, 2nd International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing, Salzburg, Österreich, 2. Juli.

—, *Convergence results for stochastic particle systems related to the Boltzmann equation*, Tagung „Nonlinear equations in many-particle systems“, Mathematisches Forschungszentrum Oberwolfach, 3. Dezember.

Postervorträge

F. GRUND, *Direct linear solver for vector and parallel computer*, Second SIAM Conference „Sparse Matrices“, Coeur d’Alene, Idaho, USA, 9. – 11. Oktober.

D. PETERHOF, *Analytische Untersuchungen der nichtlinearen Dynamik von Mehrsektions-DFB-Lasern*, 157. WE-Heraeus-Seminar „Selbstorganisation in Aktivator-Inhibitor-Systemen: Halbleiter, Gasentladung und chemisch reagierende Systeme“, Bad Honnef, 4. – 6. März.

6.4.1 Arbeitsaufenthalte von Mitarbeitern

H. BABOVSKY, Gastprofessur, Technische Hochschule Ilmenau, 1. Januar – 30. September.

J. BORCHARDT, Bayer AG, Leverkusen, im Rahmen des BMBF-Projektes entsprechend Förderkennzeichen 03-GA7FVB-5, 28. – 31. Mai und 14. – 17. Oktober.

A. BOVIER, Centre de Physique Théorique - CNRS, Marseille, Frankreich, im Rahmen des EU-Projektes CHRX-CT93-0411, 13. – 27. März.

—, Universita Karlova, Fakultät für Mathematik, Prag, Tschechische Republik, im Rahmen des EU-Projektes CHRX-CT93-0411, 27. März – 1. April und 30. Oktober – 3. November.

—, Universität Zürich, Institut für Angewandte Mathematik, Schweiz, im Rahmen des EU-Projektes CHRX-CT93-0411, 26. September – 8. Oktober.

—, Université Paul Sabatier, Département de Mathématiques, Toulouse, Frankreich, im Rahmen des EU-Projektes CHRX-CT93-0411, 9. – 13. Oktober.

J. ELSCHNER, Ajou University, Department of Mathematics, Suwon, Korea, 17. – 25. Juni.

J. FUHRMANN, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Institut für Angewandte Mathematik, 22. – 26. Januar.

F. GRUND, Bayer AG, Leverkusen, im Rahmen des BMBF-Projektes entsprechend Förderkennzeichen 03-GA7FVB-5, 13. – 16. Februar und 11. – 14. Juni.

—, Cray Research, München, im Rahmen des BMBF-Projektes entsprechend Förderkennzeichen 03-GA7FVB-5, 16. – 18. März.

—, AspenTech, Cambridge, Großbritannien, im Rahmen des BMBF-Projektes entsprechend Förderkennzeichen 03-GA7FVB-5, 18. – 23. Mai.

F. GUYARD, Institut Non Linéaire de Nice (INLN), Nizza, Frankreich, 7. – 19. April und 18. – 27. September.

D. HÖMBERG, California State University, Mathematical Physics Institute, Northridge, USA, 17. – 20. Oktober.

—, Auburn University, Department of Discrete and Statistical Sciences, Auburn, USA, 24. – 28. Oktober.

—, University of Minnesota, Institute for Mathematics and its Applications, Minneapolis, USA, 28. Oktober – 24. November.

—, Oakland University, Department of Mathematical Sciences, Rochester, USA, 24. – 27. November.

D. HORN, Bayer AG, Leverkusen, im Rahmen des BMBF-Projektes entsprechend Förderkennzeichen 03-GA7FVB-5, 28. – 31. Mai.

D. IOFFE, Universität Zürich, Institut für Angewandte Mathematik, Schweiz, 21. – 25. Mai.

—, University of California, Department of Mathematics, Los Angeles, USA, 24. August – 22. September.

—, Universita Karlova, Fakultät für Mathematik, Prag, Tschechische Republik, 28. September – 10. Oktober.

—, Technion Haifa, Israel, 22. – 29. November.

A. JUHL, Chalmers University of Technology, Göteborg, Schweden, 5. Februar – 12. April.

O. KLEIN, University of Sussex, Centre for Mathematical Analysis and Its Applications, Brighton, Großbritannien, 29. April – 3. Mai.

R. KORNHUBER, University of Sussex, Brighton, Großbritannien, 26. Februar – 3. März.

A. KUNOTH, RWTH Aachen, Institut für Geometrie und Praktische Mathematik, 5. – 20. Januar, 31. Januar – 3. Februar, 17. – 19. März, 7. – 9. Mai, 12. – 21. Juni, 8. – 19. Juli, 4. – 31. August, 10. – 14. September, 4. – 20. November, 25. November – 6. Dezember.

—, Istituto di Analisi Numerica (I.A.N.-C.N.R.), Pavia, Italien, 10. – 15. Februar.

—, Research Triangle Park, Raleigh, North Carolina, USA, 22. Februar – 2. März.

—, Texas A&M University, Department of Mathematics, College Station, USA, 17. – 24. Oktober.

—, TU Chemnitz-Zwickau, Fakultät für Mathematik, 10. – 13. Dezember.

R. LAUTERBACH, Universität Stuttgart, 23. – 28. April.

—, Institut Non Linéaire de Nice (INLN), Nizza, Frankreich, 7. – 19. April und 28. November – 6. Dezember.

—, Universität Augsburg, 20. – 23. November.

H.-J. MUCHA, Daimler-Benz Forschungszentrum Ulm, 8. – 13. Dezember.

M. NEUMANN, Katholische Universität Louvain-la-Neuve, Belgien, 1. – 6. Dezember.

—, Universität Kaiserslautern, 15. – 20. Dezember.

M. NUSSBAUM, Rijksuniversiteit Leiden, Niederlande, 14. – 27. April und 8. – 20. September.

—, Universität Paris 7, Frankreich, 5. – 10. Dezember.

S. PRÖSSDORF, Instituto Superior Técnico, Departamento de Matematica, Lissabon, Portugal, 25. Juni – 3. Juli.

—, Politecnico di Torino, Dipartimento di Matematica, Italien, 28. September – 1. Oktober.

—, Linköping University, Department of Mathematics, Schweden, 4. – 10. November.

A. RATHSFELD, University of Mansoura, Mathematics Department, Ägypten, 5. – 12. August.

- , University of Oulu, Department of Mathematics, Finland, 18. – 23. November.
- G. REINHARDT, Daimler-Benz Forschungszentrum, Ulm, 8. – 13. Dezember.
- R. RUMPEL, Samara State University, Moscow State University, Rußland, 8. – 21. April.
- B. SANDSTEDE, Brown University, Providence, USA, als Feodor-Lynen-Stipendiat der Alexander von Humboldt-Stiftung, 1. September 1995 – 31. Dezember 1996.
- J. SCHMELING, Pennsylvania State University, Department of Mathematics, University Park, USA, gefördert durch Leopoldina, 14. März – 31. Mai.
- , Universität Heidelberg, Institut für Angewandte Mathematik, 15. – 26. Juli.
- , Pennsylvania State University, Department of Mathematics, University Park, USA, gefördert durch Leopoldina, 9. September – 30. November.
- G. SCHMIDT, Linköping University, Department of Mathematics, Schweden, 26. Februar – 9. März.
- H. SCHURZ, Technische Universität Innsbruck, Institut für Mechanik, Österreich, 5. Mai – 8. Juni.
- , Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Schweiz, 16. – 22. Juni.
- V. SPOKOINY, Universität Paris 6, Frankreich, 4.– 19. Februar.
- W. WAGNER, Universität Kaiserslautern, Fachbereich Mathematik, 31. Januar – 4. Februar.
- , Universität Saarbrücken, Fachbereich Mathematik, und Universität Kaiserslautern, Fachbereich Mathematik, 22. – 27. September.

6.5 Vorlesungen und Seminare

H. BABOVSKY, Vorlesung *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen*, Technische Universität Ilmenau, 2 SWS, Wintersemester 1995/96.

—, Vorlesung *Algorithmen und Programmierung*, Technische Universität Ilmenau, 2 SWS, Wintersemester 1995/96.

—, Vorlesung *Logik und Zahlen*, Technische Universität Ilmenau, 2 SWS, Wintersemester 1995/96.

H. G. BOTHE, Vorlesung *Anschauliche Topologie*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1996.

—, Vorlesung *Geometrische Topologie*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1996/97.

A. BOVIER, Vorlesung *Ausgewählte Kapitel der Mathematischen Statistischen Mechanik*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1996/97.

H. GAJEWSKI, Vorlesung *Nichtlineare partielle Differentialgleichungen*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1996.

—, Vorlesung *Nichtlineare partielle Differentialgleichungen II*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1996/97.

K. GRÖGER, Vorlesung *Funktionalanalysis*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1995/96.

—, Vorlesung *Nichtlineare Funktionalanalysis*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Sommersemester 1996.

—, Forschungseminar *Angewandte Analysis*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1995/96, Sommersemester 1996.

—, Seminar *Funktionenräume*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1996.

—, Vorlesung *Evolutionsgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1996/97.

A. JUHL, Forschungsseminar *Harmonische Analysis*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1995/96.

—, Vorlesung *Zeta functions for geodesic flows*, Chalmers University of Technology Göteborg, 2 SWS, 5. Februar – 12. April 1996.

R. LAUTERBACH, Vorlesung *Klassische Mechanik und Hamiltonsche Systeme - Teil I*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1995/96.

—, Vorlesung *Klassische Mechanik und Hamiltonsche Systeme - Teil II*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1996.

—, Vorlesung *Partielle Differentialgleichungen*, Freie Universität Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1996/97

P. MATHÉ, Vorlesung *Die Brownsche Bewegung*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1995/96.

—, Vorlesung *Stochastische numerische Verfahren*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1996/97.

M. NUSSBAUM, Seminar *Mathematische Statistik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1996, Wintersemester 1996/97.

—, Seminar *Kurvenschätzung und Resampling*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1996, Wintersemester 1996/97.

—, Vorlesung *Grundprinzipien der asymptotischen Statistik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1996.

R. RUMPEL, Vorlesung und Übung *Informatik für Ingenieure I*, Fachhochschule für Technik und Wirtschaft Berlin, 6 SWS, Sommersemester 1996, Wintersemester 1996/97.

K. R. SCHNEIDER, Vorlesung *Bifurkationstheorie*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1995/96.

—, Seminar *Störungsmethoden der angewandten Mathematik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1996.

—, (gemeinsam mit H. Schurz) Seminar *Mathematische Modellierung*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1996/97.

—, Seminar *Nichtlineare Dynamik*, (gemeinsam mit Prof. B. Fiedler, Freie Universität Berlin, und Dr. K. Gatermann, Konrad-Zuse-Zentrum), Wintersemester 1995/96 am Konrad-Zuse-Zentrum, Sommersemester 1996 an der Freien Universität, Wintersemester 1996/97 am Weierstraß-Institut, einmal wöchentlich mit 1-2 Gastvorträgen.

H. SCHURZ, Vorlesung *Analytische und numerische Methoden für stochastische Differentialgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1995/96.

—, Vorlesung *Analysis of stochastic dynamical systems*, Universität Innsbruck, Österreich, 4 SWS, Sommersemester 1996.

—, Vorlesung *Numerik stochastischer Differentialgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1996/97.

J. SPREKELS, Vorlesung *Numerische Mathematik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1995/96.

—, Vorlesung *Analysis I*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1996/97.

W. WAGNER, Vorlesung *Stochastische Verfahren in der Numerik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1995/96.

—, Vorlesung *Grundlagen der Monte-Carlo-Methode*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1996/97.

K. WILMAŃSKI, Vorlesungsreihe für das Graduiertenkolleg *Methoden und Fragen der Modernen Kontinuumsmechanik*, Technische Universität Dresden, 4. – 8. November.

H. GAJEWSKI, K. GRÖGER, R. HÜNLICH, J. SPREKELS, Mitglieder des Graduiertenkollegs *Geometrie und nichtlineare Analysis*.

A. BOVIER, K. FLEISCHMANN, M. NUSSBAUM, Mitglieder des Graduiertenkollegs *Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis*.

6.6 Dissertationen, Habilitationen und Rufe

Habilitationen

V. SPOKOINY, Habilitationsschrift: *Statistical experiments and decisions: Asymptotic theory*, Humboldt-Universität zu Berlin, 13. Juni.

J. SCHMELING, Habilitationsschrift: *Ergoden- und Dimensionstheorie hyperbolischer Endomorphismen mit Singularitäten*, Freie Universität Berlin, 10. Juli.

Rufe

H. BABOVSKY, C4-Professur an der Technischen Hochschule Ilmenau, 1. September.

H. G. BOTHE, Honorarprofessur an der Freien Universität Berlin, 20. Juni.

6.7 Eigene Tagungen und Veranstaltungen des WIAS

WORKSHOP „DATENSTRUKTUREN FÜR ADAPTIVE MULTILEVEL-FEM-METHODEN“³

Berlin, 29. – 31. Mai

Organisation: Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, WIAS

Sponsoring: Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, WIAS

Dieser auf die Initiative von R. Kornhuber organisierte Workshop mit 12 Vorträgen und insgesamt 28 Teilnehmern aus deutschen Forschungseinrichtungen, insbesondere Stuttgart, Augsburg und Berlin, war ein Forum der Darstellung und Diskussion von Konzepten zur programmtechnischen Umsetzung adaptiver Multilevel-Finite-Elemente-Verfahren, wie sie in modernen Paketen zur numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen verwendet werden. Dieses Arbeitsfeld wird noch zu selten durch Ereignisse im wissenschaftlichen Leben widergespiegelt, obwohl das Fachgebiet „Wissenschaftliches Rechnen“ ohne ernsthafte Anstrengungen in diesem Bereich nicht existieren könnte. Unter anderem deshalb hielten die Teilnehmer diesen Workshop für sehr wertvoll.

WORKSHOP „MATHEMATICS OF SPIN SYSTEMS WITH RANDOM INTERACTIONS“

Berlin, 19. – 25. August

Organisation: WIAS

Sponsoring: Europäische Union, WIAS

Dieser thematisch eng umrissene Workshop gab einen umfassenden Überblick über den derzeitigen Stand der mathematischen Forschung auf dem Gebiet der Spin-Gläser und verwandter Modelle aus dem Bereich der neuronalen Netze. Die große Dynamik spiegelte sich in einer Vielzahl neuer und teilweise bahnbrechender Resultate wider, die auf diesem Treffen vorgestellt wurden. Herauszuheben sind hier neue Ergebnisse zum Sherrington-Kirkpatrick Modell, dem Hopfield Modell, zur Dynamik von Spin-Gläsern, sowie neue probabilistische Formalismen zur Beschreibung der Gibbs Zustände in ungeordneten Systemen. Bei 20 meistens einstündigen Vorträgen blieb reichlich Zeit für informellen Erfahrungsaustausch, wobei insbesondere die Wechselwirkung zwischen Mathematikern und Physikern äußerst erfreulich und für beide Seiten nützlich war. Die ca. 40 Teilnehmer aus Europa und den USA zeugten für das wachsende Interesse an dieser Thematik, insbesondere innerhalb der Stochastik. Die Veranstaltung hat die Erwartungen der Organisatoren in jeder Hinsicht übertroffen.

WORKSHOP „ERGODIC THEORY AND DYNAMICAL SYSTEMS“

Berlin, 26. – 31. August

Organisation: WIAS

Sponsoring: Deutsche Forschungsgemeinschaft, WIAS

Der Workshop war das bedeutendste Treffen zu diesem Gebiet 1996 in Europa. Er war die vierte in einer Reihe ähnlicher Veranstaltungen, die in der Regel jährlich abwechselnd in Polen und in Deutschland abgehalten werden. Die ursprüngliche Ausrichtung auf die deutsch-polnische Zusammenarbeit hat sich schrittweise erweitert, zunächst durch die Einbeziehung Israels und Frankreichs in den engeren Interessentenkreis und hat schließlich einer gesamteuropäischen Beteiligung Platz gemacht, wobei sich auch starkes außereuropäisches Interesse besonders in Israel zeigt.

³<http://www.wias-berlin.de/~amfem>

Der durch die Interessen der Teilnehmer bestimmte Rahmen war recht weit gespannt. Hervorzuheben sind die folgenden Gebiete: Abstrakte Ergodentheorie, höherdimensionale Wirkungen (\mathbb{Z}^d -Operationen) mit ihren Bezügen zur Algebra und Quantisierung, Dimensionstheorie von invarianten Mengen und invarianten Maßen, Komplexe Dynamik auch in höheren Dimensionen, differenzierbare Dynamik und thermodynamischer Formalismus, physikalisch motivierte Systeme.

Die Mehrzahl der 82 Teilnehmer waren international bekannte Vertreter des Gebietes. Daneben nahm wie geplant auch eine Reihe jüngerer Interessenten teil, denen die Möglichkeit gegeben wurde, ihre Ergebnisse vorzustellen und zu diskutieren.

Es wurden 51 Vorträge gehalten, darunter auch solche, die einen Überblick zu einem allgemein interessierenden Gebiet boten.

WORKSHOP „ASYMPTOTIC METHODS IN STOCHASTIC DYNAMICS AND NONPARAMETRIC STATISTICS“

Berlin, 2.– 4. September

Organisation: WIAS, Universität Heidelberg

Sponsoring: Deutsche Forschungsgemeinschaft, WIAS

Gegenstand des Workshops war der gemeinsame Methodenschatz der Asymptotik in Statistik und Stochastischer Dynamik. Einige Hauptvorträge gingen direkt auf diesen Zusammenhang ein und diskutierten statistische Probleme für Modelle, die auch in der Stochastischen Dynamik auftreten. Ein Höhepunkt war hier der Vortrag von R. Z. Khasminskii (Detroit). Khasminskii ist seit langem auf beiden Gebieten, Stochastische Dynamik und Asymptotische Statistik, sehr aktiv tätig und hat hier prägenden Einfluß ausgeübt. In seinem Vortrag kam dies zum Ausdruck; klassische Anwendungen der nichtparametrischen Kurvenschätzung wurden in einen allgemeinen Rahmen eingebettet, der Modelle der stochastischen Dynamik umfaßt. Die bereits klassischen Methoden der Signalschätzung im Weißen Rauschen (entwickelt insbesondere von I. A. Ibragimov und R. Z. Khasminskii, siehe ihre Monographie von 1982) wurden von I. A. Ibragimov (St. Petersburg) in seinem Vortrag für Anwendungen auf dem sich zur Zeit stark entwickelnden Gebiet der Statistik stochastischer partieller Differentialgleichungen verallgemeinert. In seinem Vortrag beschrieb L. Arnold (Bremen) sowohl historisch als auch inhaltlich-systematisch die Entfaltung der Dynamik in der stochastischen Analysis. Diese Vorträge stellten eindrucksvoll das Potential und die Tragweite des von Khasminskii initiierten Ansatzes dar. Die weiteren statistischen Vorträge boten einen guten Überblick über den gegenwärtigen Stand der asymptotischen Entscheidungstheorie. Dies betraf sowohl das Gebiet der klassischen nichtparametrischen Kurvenschätzung (D. Donoho (Stanford), P. Hall (Canberra), C. Stone (Berkeley)) als auch die Anwendung empirischer Prozeßtheorie (M. Low (Philadelphia), J. Wellner (Seattle)). Die Anwesenheit von L. Le Cam, einem der wichtigsten Wegbereiter der asymptotischen Statistik, war aufgrund des Gewichtes seiner Diskussionsbeiträge von hohem Wert für das Gelingen des Workshops. Das Konzept einer kleineren Anzahl eingeladener längerer Vorträge mit eingeladener Diskussion (Koreferat) hat sich als fruchtbar erwiesen. Insgesamt konnten viele hochrangige Teilnehmer für diesen Workshop gewonnen werden, nicht nur als Sprecher (siehe oben), sondern auch als Diskutanten (Koreferenten, von auswärts: P. Chow (Detroit), S. Olla (Paris), A. Nemirovsky (Haifa), A. Kneip (Louvain-la Neuve), S. van de Geer (Leiden), P. Groeneboom (Delft), P. Greenwood (Vancouver)) und sonstige Teilnehmer. Der Workshop war recht breit durch die Bernoulli Society als Satellitenmeeting des 4th World Congress of the Bernoulli Society in

Wien angekündigt worden.

WORKSHOP „PHASE TRANSITIONS AND SURFACE TENSION“

Berlin, 8. – 14. September

Organisation: WIAS

Sponsoring: Europäische Union, European Science Foundation, Deutsche Forschungsgemeinschaft, WIAS

Phasenübergänge spielen in fast allen Naturwissenschaften eine fundamentale Rolle; gleichzeitig bilden sie die Grundlage vieler industrieller Fertigungsprozesse. Aufgrund ihrer enormen technologischen Bedeutung sind Phasenübergänge in den letzten 15 Jahren im Rahmen der Theorie der Freien Randwertaufgaben intensiv mathematisch untersucht worden. In vielen Fällen wird die Evolution von Phasengrenzen stark von Oberflächenspannungseffekten beeinflusst. Die mathematische Untersuchung der Oberflächenspannung hat wesentlich zur Entwicklung der Theorie der Flächen vorgeschriebener mittlerer Krümmung beigetragen, einem wichtigen Zweig der Geometrischen Maßtheorie. Ziel dieses Workshops, der im Rahmen des am WIAS koordinierten HCM-Networks *Phase Transitions and Surface Tension* der EU und des ESF-Programms *Free Boundary Problems* stattfand, war eine Intensivierung der Zusammenarbeit zwischen Experten der Theorie der Phasenübergänge und der Geometrischen Maßtheorie, um damit zu einem besseren Verständnis der Rolle der Oberflächenspannung in Phasenumwandlungen zu kommen. Insgesamt nahmen 72 Wissenschaftler aus Europa, China, Japan und den USA am Workshop teil, von denen vierzig jeweils 40-minütige Vorträge gehalten wurden; zusätzlich fanden zahllose lebhaft Diskussionen statt. Dabei wurden neben wichtigen Beiträgen zur mathematischen Theorie auch zahlreiche Problemstellungen aus konkreten Anwendungen vorgestellt, u. a. zu den technologisch bedeutsamen Bereichen Supraleitung, Halbleitersimulation, Thermoviskoelastizität, Mikrostrukturbildung in Superlegierungen, dünne Flüssigkeitsfilme, Chemotaxis, Chemical Vapour Deposition, Wärmebehandlung von Stählen, Ermüdung und Schädigung von Werkstücken. Eine ganze Anzahl von Vorträgen befaßte sich mit Fragen der Numerik der jeweiligen Systeme nichtlinearer partieller Differentialgleichungen, von der Entwicklung von Algorithmen bis hin zur Implementation und Simulation konkreter Anwendungssituationen. Insgesamt war der Workshop sehr erfolgreich; besonders erfreulich war dabei, daß sich gerade einige der zahlreich vertretenen jüngeren Wissenschaftler durch hervorragende Beiträge auszeichneten.

1. KASKADE-TAG „ENTWICKLUNG UND ANWENDUNGEN DES ADAPTIVEN FINITE-ELEMENTE-CODES KASKADE“

Berlin, 20. September

Organisation: Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, WIAS

Sponsoring: WIAS

Bei der Entwicklung adaptiver Lösungsverfahren für partielle Differentialgleichungen arbeitet das WIAS auf der Basis des Codes KASKADE des Konrad-Zuse-Zentrums. Ziel dieser aus 7 Vorträgen bestehenden gemeinsamen Veranstaltung mit den Kooperationspartnern aus dem Konrad-Zuse-Zentrum war die Vorstellung von Projekten und neuen Entwicklungen auf der Basis dieses Paketes sowie, davon ausgehend, die Diskussion des Standes und der Perspektiven der Zusammenarbeit. Gäste aus verschiedenen Berliner Forschungseinrichtungen waren anwesend.

HERBSTTAGUNG DER ARBEITSGRUPPE „DATENANALYSE UND NUMERISCHE KLASSIFIKATION“

Berlin, 1. – 2. November

Organisation: WIAS

Die Arbeitsgemeinschaft „Datenanalyse und numerische Klassifikation“ der Gesellschaft für Klassifikation (GfKl) tagte am 1. und 2. November 1996 in Berlin. Die Tagung wurde auf Vorschlag des Vorsitzenden der AG H. Bock (RWTH Aachen) vom WIAS organisiert. In mehreren Vorträgen referierten auch Mitarbeiter des WIAS über verschiedene Aktivitäten auf dem Gebiet der Clusteranalyse, Klassifikation und Visualisierung. Diese sogenannte Herbsttagung hatte den Charakter einer Arbeitstagung und förderte den Austausch zwischen Wissenschaftlern unterschiedlicher Fachgebiete, die sich theoretisch und praktisch mit Klassifikationsmethoden beschäftigen. Die starke und aktive Präsenz unserer Kooperationspartner aus Ulm (Daimler-Benz-Forschung) und Stuttgart (Mercedes-Benz-Finanzmanagement) war Ausdruck der Praxisrelevanz der behandelten Themen.

„2. GITTERGENERIERUNGSTAG“

Berlin, 4. November

Organisation: WIAS

Sponsoring: WIAS

Die Vielfalt der Anwendungsprojekte des WIAS auf der Basis von partiellen Differentialgleichungen erfordert flexible Werkzeuge zur Gittergenerierung. Nicht alle Anwendungsfälle lassen sich hier von einem Code abdecken. Auf der Veranstaltung mit 5 Vorträgen von Kollegen aus Linz, Darmstadt und Cottbus ging es darum, Probleme der Gittergenerierung unter Berücksichtigung der Anwendungen, insbesondere auf dem Gebiet der numerischen Lösung der Maxwellgleichungen, anhand von konkreten Codes zu diskutieren, welche auch am WIAS verfügbar gemacht werden.

MINISYMPOSIUM „MASCHINEN MIT REIBUNG - ANALYSIS, NUMERIK, STEUERUNG“

Berlin, 28. November

Organisation: WIAS

Sponsoring: WIAS

An der Tagung nahmen 23 Personen teil, davon 14 externe Teilnehmer, meist Ingenieure. Das Anliegen des Minisymposiums bestand in der Beschreibung der Dynamik von Maschinen unter Berücksichtigung von Reibung. Im Vordergrund der Betrachtungen standen automatisch gesteuerte Werkzeugmaschinen, die aufgrund der notwendigen Präzision Anlaß zur Verfeinerung des klassischen, statischen Reibmodells (COULOMB) geben. Neben einer Darstellung des dynamischen Reibmodells wurden neue mathematische Zugänge bei der Analyse von nichtglatten dynamischen Systemen präsentiert. Die Themen der drei einstündigen Hauptvorträge waren: *Reibmodelle in der Maschinendynamik* (F. ALTPETER / ETH Lausanne), *Singulär gestörte Systeme mit trockener Reibung* (R. RUMPEL / WIAS Berlin), *Lyapunovexponenten für nichtglatte dynamische Systeme* (B. MICHAELI / Universität Köln). Es kam zu fruchtbaren Diskussionen an der Schnittstelle zwischen Mathematik und Mechanik, gekennzeichnet durch ein deutliches Interesse der Gäste aus dem ingenieurwissenschaftlichen Bereich für die Mathematik zu den genannten Reibmodellen. Es ergaben sich neue Kooperationsmöglichkeiten.

6.8 Gastaufenthalte am WIAS

M. K. AOUF, University of Mansoura, Department of Mathematics, Ägypten, 2. – 11. März.

TH. APEL, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, Fachbereich Mathematik, Chemnitz, 29. – 31. Mai.

P. BASTIAN, Universität Stuttgart, Institut für Computeranwendungen 3, 29. – 31. Mai.

R. BECK, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Numerische Analysis und Modellierung, 29. – 31. Mai.

S. BERTOLUZZA, Istituto di Analisi Numerica, Pavia, Italien, 25. März – 25. Mai.

J. BEY, Universität Tübingen, Mathematisches Institut, 29. – 31. Mai.

V. G. BONDAREVSKY, University of Minnesota, School of Mathematics, Minneapolis, USA, 13. Juni – 1. Juli.

S. CAPRINO, Università di Roma “Tor Vergata”, Dipartimento di Matematica, Rom, Italien, 16. – 21. September.

L. CAVALIER, Universität Paris 6, Fachbereich Mathematik, Frankreich, 24. – 30. November.

D. CHIBISOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Steklov Institut für Mathematik, Moskau, Rußland, 1. – 15. September.

D. CHILLINGWORTH, Universität Southampton, Fachbereich Mathematik, Großbritannien, 1. – 21. September.

P. CHOSSAT, Institut Nonlinéaire de Nice (INLN), Nizza, Frankreich, 16. – 23. März und 9. – 16. November.

P. COLLI, Università di Torino, Dipartimento di Matematica, Turin, Italien, 26. August – 14. September.

D. A. DAWSON, Fields Institute, Toronto, Kanada, 12. – 18. August.

H.-J. DIERSCH, WASY Gesellschaft für wasserwirtschaftliche Planung und Systemforschung mbH, Berlin, 29. – 31. Mai.

R. DUDUCHAVA, Georgische Akademie der Wissenschaften, Mathematisches Institut, Tiflis, Georgien, 3. – 31. Januar.

B. ERDMANN, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Wissenschaftliche Software, 29. – 31. Mai.

S. M. ERMAKOV, Universität St. Petersburg, Fakultät für Mathematik und Mechanik, Rußland, 8. Oktober – 8. November.

M. ERMAKOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Maschinentechologie, St. Petersburg, Rußland, 1. – 30. September.

A. M. ETHERIDGE, Queen Mary and Westfield College, School of Mathematical Sciences, London, Großbritannien, 1. September – 3. Oktober.

E. FRIDMAN, Universität Tel Aviv, Department Electrical Engineering/Systems, Israel, 26. März – 4. April.

L. FRIDMAN, Samara Architecture and Building Academy, Department of Mathematics, Samara, Rußland, 8. – 21. September.

B. GARAY, Universität Bielefeld, Fakultät für Mathematik, 3. – 5. Dezember.

V. GAYRARD, Centre de Physique Théorique – CNRS, Marseille, Frankreich, 12. Februar – 12. März, 17. August – 17. September, 9. Oktober – 8. Januar 1997.

M. GELBRICH, Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Mathematik, 1. Juni – 30. September.

H.-O. GEORGII, Ludwig-Maximilians Universität München, Fakultät für Mathematik, 4. – 6. Juni.

G. GIACOMIN, Universität Zürich, Institut für Angewandte Mathematik, Schweiz, 21. – 29. Februar und 9. – 19. Juli.

M. GIANFELICE, Universität Rom I, Dipartimento di Matematica, Italien, 25. November – 1. Dezember.

G. GOLUBEV, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Informationsübertragung, Moskau, Rußland, 21. Oktober – 2. Dezember.

I. G. GRAHAM, University of Bath, School of Mathematical Sciences, Großbritannien, 29. Juni – 1. Juli.

I. GRAMA, Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, Kishinev, Moldawien, 17. September – 17. Oktober.

P. GREENWOOD, University of British Columbia, Department of Mathematics, Vancouver, Kanada, 22. August – 9. Januar 1997.

E. GUTKIN, University of Southern California, Los Angeles, USA, 9. – 12. Juni.

R. HIPTMAIR, Universität Augsburg, Institut für Mathematik, 29. – 31. Mai.

K.-H. HOFFMANN, Technische Universität München, Lehrstuhl für Angewandte Mathematik, 6. – 19. September.

M. HRISTACHE, Universität Paris 6, Fachbereich Mathematik, Frankreich, 8. – 20. Dezember.

I. IBRAGIMOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, St. Petersburg, Rußland, 1. – 15. September.

T. IVANOV, Universität Linköping, Institut für Mathematik, Schweden, 4. – 16. November.

M. JÄHNISCH, Graduiertenkolleg Technische Universität Berlin, 1. Januar – 31. Dezember.

L. JÄNICKE, Brandenburgische Technische Universität, Lehrstuhl Allgemeine Elektrotechnik, Cottbus, 29. – 31. Mai.

K. JOHANNSEN, Universität Stuttgart, Institut für Computeranwendungen, 29. – 31. Mai.

M. JUNG, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, Fachbereich Mathematik, Chemnitz, 29. – 31. Mai.

L. KALACHEV, Universität Montana, Department of Mathematical Sciences, Missoula, USA, 17. – 26. Mai.

KARMESHU, Jawaharlal-Nehru-Universität, School of Computer and Systems Sciences, Neu Delhi, Indien, 1. Juni – 31. Juli.

H. KAUDERER, Forschungsinstitut der Daimler-Benz AG, Ulm, 1. – 5. November.

N. KENMOCHI, Chiba University, Department of Mathematics, Chiba, Japan, 1. – 15. September.

R. KHASHMINSKI, Wayne State University, Department of Mathematics, Detroit, USA, 26. August – 5. September.

E. YA. KHRUSLOV, Ukrainian Academy of Sciences, Physical Engineering Institute of Low Temperatures, Kharkow, Ukraine, 7. März – 4. April.

F. KICKINGER, Johannes-Kepler-Universität, Institut für Mathematik, Linz, Österreich, 3. – 5. November.

YU. KIFER, The Hebrew University, Institute of Mathematics, Jerusalem, Israel, 25. August – 1. September.

A. KLENKE, Universität Erlangen, Mathematisches Institut, 18. – 21. November.

H. KLINGBEIL, Technische Hochschule Darmstadt, Institut für Hochfrequenz-Technik, 10. – 11. November.

P. KLOEDEN, Deakin Universität, Fachbereich Mathematik, Geelong, Australien, 8. – 10. November.

A. KOMECH, Moskauer Staatliche Lomonossow-Universität, Mathematisch-Mechanische Fakultät, Moskau, Rußland, 11. – 12. Dezember.

P. KREJČÍ, Tschechische Akademie der Wissenschaften, Matematický ústav, Prag, Tschechische Republik, 15. April – 15. Mai.

M. KWAPISZ, Institute of Mathematics, Bydgoszcz, Polen, 1. – 14. Dezember.

PH. LAURENÇOT, Université de Nancy I, Département de Mathématiques, Nancy, Frankreich, 13. – 20. September.

- L. LE CAM, University of California, Department of Mathematics, Berkeley, USA, 28. August – 7. September.
- G. LEDUC, Université du Quebec, Département de Mathématiques, Montreal, Kanada, 7. Juli – 3. August.
- B. LEVIT, Universität Utrecht, Fachbereich Mathematik, Niederlande, 9. – 20. Dezember.
- M. LÖWE, Universität Bielefeld, Fakultät für Mathematik, 1. April – 30. September.
- V. G. MAZ'YA, Universität Linköping, Institut für Mathematik, Schweden, 12. – 19. Oktober.
- E. MEISTER, Technische Hochschule Darmstadt, Fachbereich Mathematik, 14. – 16. November.
- R. J. MIATELLO, National University of Cordoba, Argentinien, 13. Januar – 2. Februar.
- C. MUELLER, University of Rochester, Department of Mathematics, USA, 6. – 27. Juni.
- G. NAKHAEIZADEH, Forschungsinstitut der Daimler-Benz AG, Ulm, 1. – 3. November.
- N. NEFEDOV, Staatliche Universität Moskau, Fakultät für Physik, Rußland, 1. – 30. Juni.
- V. V. NEKRUTKIN, Universität St. Petersburg, Fakultät für Mathematik und Mechanik, Rußland, 8. Oktober – 8. November.
- A. NEMIROVSKI, Technion, Israel Institute of Technology, Haifa, Israel, 1.– 30. September.
- CH. NEWMAN, Courant Institute of Mathematical Sciences, Department of Mathematics, New York, USA, 26. Juli – 24. August.
- A. NOVICK-COHEN, Technion, Israel Institute of Technology, Department of Mathematics, Haifa, Israel, 4. – 15. September.
- N. O'CONNELL, Hewlett-Packard Laboratories, Bristol, Großbritannien, 18. – 20. November.
- K. D. OERTEL, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Wissenschaftliche Software, 29. – 31. Mai.
- YA. PESIN, Pennsylvania State University, University Park, USA, 2. – 15. Juli.
- CH. PFISTER, EPF Lausanne, Schweiz, 6. – 15. November.
- A. PISZTORA, Harvard University, Department of Mathematics, USA, 1. – 8. August.
- W. PÖLZ, Johannes-Kepler-Universität, Institut für Systemwissenschaften, Linz, Österreich, 31. Oktober – 5. November.
- N. I. POPIVANOV, Universität Sofia, Fakultät für Mathematik und Informatik, Bulgarien, 12. – 14. Juni.
- E. REISSNER, Universität Augsburg, Institut für Mathematik, 25. Februar – 1. März.
- M. RIEDLE, Philipps-Universität, Fachbereich Mathematik, Marburg, 1. – 29. März.

U. VAN RIENEN, Technische Hochschule Darmstadt, Theorie Elektromagnetischer Felder, 3. – 5. November.

S. RJASANOW, Universität Kaiserslautern, Fachbereich Mathematik, 5. – 8. März.

L. RJASHKO, Ural State University, Department of Mathematics, Ekaterinburg, Rußland, 1. August – 30. September.

R. C. ROGERS, Virginia Tech, Department of Mathematics, Blacksburg, USA, 8. – 21. September.

R. ROITZSCH, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Wissenschaftliche Software, 29. – 31. Mai.

V. G. ROMANOV, Sibirische Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, Novosibirsk, Rußland, 30. September – 2. Oktober.

K. ROTTBRAND, Technische Hochschule Darmstadt, Fachbereich Mathematik, 17. – 18. November.

U. RÜDE, Universität Augsburg, Institut für Mathematik, 29. – 31. Mai.

K. K. SABELFELD, Rechenzentrum der Sibirischen Abteilung der Russischen Akademie der Wissenschaften, Novosibirsk, Rußland, 20. November – 20. Dezember.

D. SATTINGER, Universität Minnesota, School of Mathematics, Minneapolis, USA, 12. – 16. Mai.

B. SAUSSOL, Centre de Physique Théorique – CNRS, Marseille, Frankreich, 10. – 24. Februar.

A. SCHMIDT, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Institut für Angewandte Mathematik, 29. – 31. Mai.

J. SCHÖBERL, Johannes-Kepler-Universität, Institut für Mathematik, Linz, Österreich, 1. – 5. November.

L. SCUDERI, Politecnico di Torino, Dipartimento di Matematica, Turin, Italien, 24. November – 1. Dezember.

V. SHAIUROV, Rechenzentrum der Russischen Akademie der Wissenschaften, Akademgorodok, Krasnojarsk, Rußland, 5. – 29. Oktober.

T. SHIGA, Tokyo Institute of Technology, Department of Applied Physics, Tokio, Japan, 2. – 7. November.

B. SILBERMANN, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, Fakultät für Mathematik, Chemnitz, 4. – 6. August.

V. A. SOBOLEV, Staatliche Universität Samara, Department of Differential Equations and Control Theory, Rußland, 22. April – 11. Mai.

J. SOKOŁOWSKI, Université de Nancy I, Laboratoire de Mathématiques, Institut Élie Cartan, Nancy, Frankreich, 1. – 31. August.

H. SPOHN, Ludwig-Maximilians Universität München, Fakultät für Physik, 21. – 23. Mai.

L. STALS, Universität Augsburg, Institut für Mathematik, 29. – 31. Mai.

V. STRYGIN, Staatliche Universität Voronezh, Institut für Angewandte Mathematik, Rußland, 9. – 21. Dezember.

YU. M. SUHOV, University of Cambridge, Department of Mathematics, Großbritannien, 11. – 13. Dezember.

Y. SUN, University of British Columbia, Department of Mathematics, Vancouver, Kanada, 7. September – 24. November.

I. SUSLINA, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, St. Petersburg, Rußland, 7. – 21. Dezember.

D. TIBA, Rumänische Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, Bukarest, Rumänien, 8. Januar – 9. Februar.

YU. TSCHERSKIJ, Staatliche Akademie für Bau und Architektur, Odessa, Ukraine, 15. – 16. Januar und 31. Mai – 30. Juni.

K. URBAN, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Institut für Geometrie und Praktische Mathematik, 29. – 31. Mai.

V. A. VATUTIN, Steklov Mathematical Institute, Moskau, Rußland, 25. November – 21. Januar 1997.

Y. WANG, Nankai Universität, Department of Mathematics, China, 1. April – 1. Juni.

CH. WIENERS, Universität Stuttgart, Institut für Computeranwendungen, 29. – 31. Mai.

U. WIEST, Universität Augsburg, Institut für Mathematik, 29. – 31. Mai.

R. WINKLER, Universität Wien, Institut für Algebra und Diskrete Mathematik, Österreich, 19. – 25. Februar.

M. YAMAMOTO, University of Tokyo, Department of Mathematical Sciences, Tokio, Japan, 15. – 20. April.

S. ZHENG, Fudan University Shanghai, Institute of Mathematics, Shanghai, China, 15. August – 15. September.

I. ZORIN, Universität St. Petersburg, Mathematisch-Mechanische Fakultät, St. Petersburg, Rußland, 2. – 21. April.

Stipendiaten

CH. KÜLSKE, Ruhr-Universität Bochum, 1. Januar – 31. August (DFG).

O. HRYNIV, Lvov, Ukraine, seit 11. Dezember 1996 (Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“).

D. TIBA, Rumänische Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, 1. Oktober 1996 – 30. September 1997 (Alexander von Humboldt-Stipendium).

I. SAAD ABDEL-FATTAH, University of Mansoura, Mathematics Department, Ägypten, 1. Januar – 26. April (Channel-System der ägyptischen Regierung).

6.9 Gastvorträge

A. ABOU ELNOUR, Technische Universität Hamburg-Harburg, *Determination of the semiconductor heterostructure physical properties by self-consistent solution of Poisson and Schrödinger equations*, 15. April.

F. ALABAU, Université de Bordeaux – I, Frankreich, *Asymptotic analysis of the transient Vlasov-Poisson-system in the case of a plane diode*, 4. Dezember.

TH. APEL, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, *Das Programm SPC-PMPO3D zur Lösung von Potentialproblemen auf Parallelrechnern*, 30. Mai.

F. ALTPETER, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Schweiz, *Reibmodelle in der Maschinendynamik - Beschreibung und Eigenschaften*, 28. November.

U. BANDELOW, Humboldt-Universität zu Berlin, *Beschreibung und Verhalten eines physikalischen Systems mit Verzweigungspunkten der Kodimension 3*, 19. Juni.

P. BASTIAN, Universität Stuttgart, *Towards a flexible finite element package (current state of the ug-software)*, 29. Mai.

L. BAUWENS, Katholische Universität Louvain-la-Neuve, Belgien, *Bayesian inference on GARCH models using the Gibbs sampler*, 24. April.

R. BECK, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, *Wozu objektorientierte Programmierung? Überlegungen anhand eines adaptiven Finite-Elemente-Codes in der Sprache C++*, 29. Mai.

—, *Der adaptive Finite-Elemente-Code KASKADE: Programm-Struktur und Erfahrungen aus der Praxis*, 20. September.

K. BEILENHOF, Technische Hochschule Darmstadt, *Die Finite-Differenzen Methode im Frequenzbereich – Ein numerisches Verfahren zur Analyse elektromagnetischer Feldprobleme*, 29. August.

E. BELITSER, Universität Utrecht, Niederlande, *Efficient estimation of an analytic density under random censorship*, 13. Mai.

S. BERTOLUZZA, Istituto di Analisi Numerica, Pavia, Italien, *An adaptive wavelet collocation method for the solution of partial differential equations*, 12. April.

J. BEY, Universität Tübingen, *Adaptive Verfeinerung von Tetraedergittern*, 30. Mai.

M. BÖHM, Humboldt-Universität zu Berlin, *Ein Problem mit bewegten Rändern bei der Korrosion von Betonoberflächen*, 7. Februar.

K. BÖHMER, Philipps-Universität Marburg, *Numerische Ljapunov-Schmidt Methoden für singuläre Operatorgleichungen*, 12. November.

V. G. BONDAREVSKY, University of Minnesota, Minneapolis, USA, *Navier-Stokes equations: From PDE's through dynamical systems to energetic systems. Part I*, 19. Juni.

- , *Navier-Stokes equations: From PDE's through dynamical systems to energetic systems. Part II*, 26. Juni.
- F. A. BORNEMANN, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, *Homogenisierung hochoszillatorischer Hamiltonscher Systeme*, 6. Februar.
- R. CAO, Universität Madrid, Spanien, *Bootstrap bandwidth selection in nonparametric density and hazard rate estimation with censored/truncated data*, 3. Juli.
- R. J. CARROLL, A & M University Texas, USA, *Local estimating equations*, 6. November.
- , *Generalized linear mixed models and measurement error*, 20. November.
- L. CAVALIER, Universität VI, Paris, Frankreich, *Asymptotically efficient estimation in the problem of tomography*, 27. November.
- J. T. CHAYES, University of California, Los Angeles, USA, *Birth of the infinite cluster: Finite size scaling in percolation*, 12. Juni.
- V. CHEPYCHOV, Staatliche Universität Moskau, Rußland, *Fractal dimension estimates for attractors of evolution equations*, 29. Oktober.
- D. CHILLINGWORTH, University of Southampton, Großbritannien, *Bifurcation from a critical circle with degeneracies*, 16. September.
- C. K. CHUI, Texas A&M University, College Station, USA, *Wavelets for image processing*, 13. September.
- J. DANIELSSON, Universität Reikjavik, Island, *Tail-Index and quantile estimation on the highest frequency dater*, 22. Mai.
- K. DRESSLER, TECMATH GmbH, Kaiserslautern, *Mathematische Methoden bei der Festigkeitsauslegung von Fahrzeugen*, 29. April.
- R. DUDUCHAVA, Georgische Akademie der Wissenschaften, Tiflis, Georgien, *The spline collocation method for Mellin convolution equations*, 29. Januar.
- , *The spline collocation method for Mellin convolution equations (Fortsetzung)*, 5. Februar.
- B. ERDMANN, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, *Anpassung von KASKADE 3.x an spezielle Benutzerbedürfnisse*, 20. September.
- M. ERMAKOV, Institut für Maschinentheorie, St. Petersburg, Rußland, *On large and moderate large deviations of empirical bootstrap measure*, 18. September.
- S. M. ERMAKOV, Universität St. Petersburg, Rußland, *On the complexity and stability of some Monte Carlo algorithms*, 1. November.
- F. D. FISCHER, Montanuniversität Leoben, Österreich, *Kontinuumsmechanische Aspekte bei Phasenübergängen in Stahl*, 9. Dezember.
- E. FRIDMAN, Tel Aviv University, Israel, *H_∞ -control of singularly perturbed systems*, 2. April.

- L. FRIDMAN, Samara Architecture and Building Academy, Samara, Rußland, *Slow periodic solutions of singularly perturbed relay control systems*, 16. September.
- U. GATHER, Universität Dortmund, *Ausreißerentdeckung in statistischen Daten*, 13. November.
- H.-O. GEORGII, Ludwig-Maximilians-Universität, München, *Phasenübergang im Kontinuums Potts-Modell*, 5. Juni.
- G. GIACOMIN, Universität Zürich, Schweiz, *Interacting Particle systems with Kac potentials and interface motion*, 17. Juli.
- J. GOTTLIEB, Universität Karlsruhe, *Inverse Probleme der Elektromagnetik und ihre Anwendungen bei der Altlastenerkundung*, 28. Oktober.
- I. G. GRAHAM, University of Bath, Großbritannien, *A spectral collocation method for boundary integral equations in 3D*, 1. Juli.
- C. GREBOGI, University of Maryland, College Park, USA, *Unstable dimension variability: An obstruction to shadowing and modeling*, 19. November.
- P. GREENWOOD, University of British Columbia, Vancouver, Kanada, *Asymptotic inference for stochastic processes*, 14. Oktober.
- E. GUTKIN, University of Southern California, Los Angeles, USA, *The theory of plane billiards - A survey*, 11. Juni.
- H. HAAF, Südwestdeutsche Landesbank Stuttgart, *Marktrisikoquantifizierung für den Eigenhandel einer Bank*, 1. April.
- J. HÄRTERICH, Freie Universität Berlin, *Attractors of viscous balance laws*, 21. Mai.
- J. HAINZL, Gesamthochschule Kassel, *Eindeutigkeit von Grenzyklen und Quotienten Abelscher Integrale*, 19. Dezember.
- G. HEIMANN, Schering AG, Berlin, *Ein U-Test für ein spezielles zensiertes Datenmodell mit Anwendungen in der Ökotoxikologie*, 19. Februar.
- R. HIPTMAIR, Universität Augsburg, *Operator and data representation in an object oriented adaptive FEM code*, 30. Mai.
- R. HOCHMUTH, Freie Universität Berlin, *Adaptive schemes for multiscale discretizations of boundary integral equations*, 3. April.
- A. J. HOMBURG, Freie Universität Berlin, *Eventually expanding one-dimensional maps*, 16. April.
- J. HURT, Karls-Universität, Prag, Tschechische Republik, *Stochastic aspects of pension funding*, 19. Juni.
- Y. INGSTER, Forschungsinstitut „Granit“, St. Petersburg, Rußland, *Minimax nonparametric hypothesis testing: Rate, exact and adaptive asymptotics*, 18. Dezember.

- T. IVANOV, Universität Linköping, Schweden, *Boundary layer approximate approximations*, 7. November.
- L. JÄNICKE, Brandenburgische Technische Universität, Cottbus, *Auswirkungen unregelmäßiger Gitterstrukturen bei der Berechnung elektromagnetischer Felder*, 4. November.
- F. JOCHMANN, Humboldt-Universität zu Berlin, *Ein Regularitätsresultat für die zweidimensionalen Maxwell-Gleichungen mit gemischten Randbedingungen mit Anwendungen auf ein Problem der Halbleitertheorie. Teil 1*, 8. Mai.
- , *Ein Regularitätsresultat für die zweidimensionalen Maxwell-Gleichungen mit gemischten Randbedingungen mit Anwendungen auf ein Problem der Halbleitertheorie. Teil 2*, 15. Mai.
- L. KALACHEV, University of Montana, Missoula, USA, *Model reduction for multiphase phenomena*, 21. Mai.
- N. EL KAROUI, Universität Paris VI, Frankreich, *Backward stochastic differential equations*, 8. Mai.
- B. KAWOHL, Universität Köln, *Das Newtonsche Problem des minimalen Widerstandes, eines der ältesten Variationsprobleme*, 10. April.
- B. N. KHOROMSKIJ, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Rußland, *On efficient boundary and interface reduction for 2D elasticity and Stokes equations*, 22. Januar.
- E. YA. KHRUSLOV, Physical Engineering Institute for Low Temperatures, Kharkov, Ukraine, *Homogenized models of composite media*, 13. März.
- , *Soliton asymptotics of nondecreasing solutions of nonlinear evolution equations*, 16. März und 28. März.
- F. KICKINGER, Johannes-Kepler-Universität, Linz, Österreich, *Automatische Microscalierende Netzgenerierung für 3D-Objekte und Moving Meshes*, 4. November.
- YU. KIFER, Hebrew University, Jerusalem, Israel, *Central limit theorems for random transformations*, 30. August.
- K. KLAMT, Miele & Cie. GmbH, Gütersloh, *Die Problematik des Wasser- und Energietransports in einem Wäscheballen sowie weitere Probleme beim Waschen*, 25. November.
- A. KLENKE, Universität Erlangen, *Branching random walk in a branching random environment*, 20. November.
- H. KLINGBEIL, Technische Hochschule Darmstadt, *Finite-Differenzen-Formulierung der Maxwellgleichungen für Polygongitter*, 10. Oktober.
- W. KÖNIG, Technische Universität Berlin, *One-dimensional polymer models*, 29. Mai.
- A. KOMECH, Moskauer Staatliche Lomonossov-Universität, Rußland, *On long-time asymptotics of solutions to nonlinear wave equations*, 11. Dezember.

- A. KOROSTELEV, Universität Detroit, USA, *Edge effects and design in nonparametric regression*, 29. Mai.
- A. KOST, Brandenburgische Technische Universität, Cottbus, *Vergleich verschiedener Methoden zur numerischen Lösung elektromagnetischer Feldprobleme*, 5. November.
- P. KOTELENEZ, Case Western Reserve University, Cleveland, Ohio, USA, *Homogeneous and isotropic random fields as solutions of stochastic partial differential equations of McKean-Vlasov type*, 3. Juli.
- M. KRAFT, Universität Kaiserslautern, *Stochastische Methoden zur Modellierung turbulenter reaktiver Strömungen unter Berücksichtigung industrieller Fragestellungen*, 29. November.
- M. A. KRASNOSELSKIJ, Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau, Rußland, *Potentialabschätzungen in Gleichungen mit komplizierten Nichtlinearitäten*, 15. Oktober.
- P. KREJČÍ, Tschechische Akademie der Wissenschaften, Matematický ústav, Prag, Tschechische Republik, *Multidimensional hysteresis and plasticity*, 8. Mai.
- J. LANG, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, *Kardos, ein Löser für nichtlineare Zeitprobleme*, 20. September.
- A. LANGENBACH, Humboldt-Universität zu Berlin, *Lokale Invertierbarkeit von Abbildungen in metrischen Räumen*, 10. Januar.
- M. LECHNER, Universität Mannheim, *Income and employment effects of continuous off-the-job training*, 10. April.
- G. LEDUC, Université du Quebec, Kanada, *Martingale problem for superprocesses*, 10. Juli.
- M. LÖWE, Universität Bielefeld, *On the storage capacity of Hopfield models with weakly correlated patterns and optimization*, 17. April.
- M. G. LÜLING, Schlumberger-Doll Research, Ridgefield, USA, *Wohlgezielte horizontale Bohrungen durch elektrisch anisotrope Öl-Lager mit Hilfe von prophetischen Modell-Rechnungen*, 29. Januar.
- U. MAAS, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, *Dimensionsreduktion chemischer Reaktionssysteme zur Simulation reaktiver Strömungen*, 16. Januar.
- M. MALYUTOV, Universität Boston, USA, *Efficient nonparametric decision functions in the search for significant variables*, 21. August.
- V. G. MAZ'YA, Universität Linköping, Schweden, *Asymptotic theory of operator differential equations*, 17. Oktober.
- E. MEISTER, Technische Hochschule Darmstadt, *Spektraltheoretische Untersuchungen für Beugungsprobleme bei kanonischen Gebieten*, 14. November.
- R. J. MIATELLO, National University of Cordoba, Argentinien, *Generalized Kloosterman sums and exceptional eigenvalues of hyperbolic manifolds*, 26. Januar.

—, *A Kuznetsov sum formula for Hilbert-Blumenthal groups*, 31. Januar.

B. MICHAELI, Universität Köln, *Lyapunovexponenten für nichtglatte dynamische Systeme*, 28. November.

G. MICULA, University of Cluj-Napoca, Rumänien, *Spline function and the numerical solution of differential equation problems*, 3. Juni.

A. MIRLE, Technische Universität Dresden, *Oberschranken für die Hausdorff- und fraktale Dimension invarianter Mengen von nichtinjektiven Abbildungen*, 5. November

R. MODEL, Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Berlin, *Inverse Probleme in der optischen Tomographie*, 24. Juni.

C. MUELLER, University of Rochester, USA, *The width of the wavefront in random traveling waves*, 19. Juni.

G. NAKHAEIZADEH, Daimler-Benz AG, Ulm, *Anwendungsaspekte von knowledge-discovery in data bases und data mining*, 4. März.

N. NEFEDOV, Staatliche Universität Moskau, Rußland, *Contrast structures in singularly perturbed systems*, 4. Juni.

V. V. NEKRUTKIN, Universität St. Petersburg, Rußland, *Asymptotic expansions and estimates with small bias for Nanbu processes*, 1. November.

A. NEMIROVSKI, Israel Institute of Technology, Haifa, Israel, *Functional aggregation of nonparametric estimates*, 25. September.

H. NEUNZERT, Universität Kaiserslautern, *Forschungsinstitut oder Brückeninstitut – Kann man mit Mathematik Geld verdienen?* 18. März.

N. O'CONNELL, Hewlett-Packard Laboratories, Bristol, Großbritannien, *A new technique for the explicit determination of large deviation rate functions*, 19. November.

S. OLLA, Université de Cergy-Pontoise, Paris, Frankreich, *Homogenization of convection-diffusion equations in a space-time ergodic random flow*, 10. April.

A. PANKOV, Vinnitsa Pedagogical Institute, Vinnitsa, Ukraine, *Homogenization of random differential operators*, 10. Juli.

S. PEREVERZEV, Mathematisches Institut, Kiew, Ukraine, *The minimal radius of the Galerkin information for the Fredholm problem of the first kind*, 28. Oktober.

YA. PESIN, Pennsylvania State University, University Park, USA, *Characteristics of dimension type for dynamical systems*, 5. Juli.

N. I. POPIVANOV, University of Sofia, Bulgarien, *Some improperly posed problems for partial differential equations and their non-local regularization*, 12. Juni.

K. POST, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, *Existenz mehrfacher Gleichgewichte in der nichtlinearen Elastizitätstheorie*, 24. Januar.

P. PROTTER, Purdue University, West Lafayette, USA, *Forward backward stochastic differential equations*, 26. Juni

U. VAN RIENEN, Technische Hochschule Darmstadt, *Generierung von Dreiecksgittern für die Finite-Integrations-Technik*, 4. November.

—, *Numerische Verfahren auf der Basis der Finiten-Integrations-Theorie*, 5. November.

TH. VAN DE ROER, Technische Universität Eindhoven, Niederlande, *Numerical modeling of double barrier resonant tunneling diodes*, 14. Oktober.

R. ROITZSCH, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, *Graphische Benutzeroberflächen für KASKADE-Anwendungen*, 20. September.

V. G. ROMANOV, Sibirische Akademie der Wissenschaften, Novosibirsk, *Stability estimates for an inverse problem related to the transfer equation*, 1. Oktober.

K. ROTTBRAND, Technische Hochschule Darmstadt, *Rawlin's problem for half-plane diffraction: Its generalized eigenfunctions with real wave numbers*, 18. November.

B. RUBIN, The Hebrew University of Jerusalem, Israel, *Wavelet transforms and fractional integrals*, 7. Februar.

U. RÜDE, Universität Augsburg, *Zur Effizienz adaptiver Verfahren: Strukturiert oder unstrukturiert?* 30. Mai.

I. SAAD ABD EL-FATTAH, University of Mansoura, Ägypten, *A quadrature method for a two-dimensional singular integral equation*, 4. März.

K. K. SABELFELD, Rechenzentrum der Russischen Akademie der Wissenschaften, Novosibirsk, Rußland, *Monte Carlo methods for solving deterministic and stochastic problems of mathematical physics*, 13. Dezember.

D. SATTINGER, University of Minnesota, Minneapolis, USA, *Isomonodromy systems and completely integrable systems*, 14. Mai.

B. SAUSSOL, Centre de Physique Théorique, Marseille, Frankreich, *Decay of correlation and Hilbert metric*, 23. Februar.

M. SCHIPPER, Universität Utrecht, Niederlande, *Local asymptotic minimax risk for estimating a density in the sup-norm, using optimal recovery theory*, 21. Februar.

A. SCHMIDT, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, *ALBERT: Eine adaptive hierarchische Finite Elemente Toolbox*, 29. Mai.

J. SCHÖBERL, Johannes-Kepler-Universität, Linz, Österreich, *NETGEN - Ein auf geometrischen Regeln basierender 2D/3D Netzgenerator*, 4. November.

CH. SCHÜTTE, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, *Symplectic discretization of mixed quantum classical equations of motion*, 3. Mai.

- ST. SCHUSTER, Humboldt-Universität zu Berlin, *Structural analysis of biochemical reaction systems*, 19. November.
- L. SCUDERI, Politecnico di Torino, Italien, *High order methods for weakly singular integral equations with nonsmooth input functions*, 28. November.
- V. SHAIDUROV, Rechenzentrum der Russischen Akademie der Wissenschaften, Akademgorodok, Krasnoyarsk, Rußland, *Cascadic iterative algorithms*, 17. Oktober.
- , *Finite element methods fitted for convection-diffusion problems*, 24. Oktober.
- T. SHIGA, Tokyo Institute of Technology, Japan, *Exponential decay rate of survival probability of a random walker in a disastrous random environment*, 6. November.
- B. SILBERMANN, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, *Asymptotische Eigenschaften von Näherungsoperatoren für Faltungsgleichungen*, 6. August.
- CH. SIMADER, Universität Bayreuth, *Dirichlet- und Neumann-Problem für den Laplace-Operator in L^q in einem unendlichen Zylinder*, 24. April.
- L. SIMAR, Katholische Universität Louvain-la-Neuve, Belgien, *Random walk over small spheres for elliptic equations and calculation of boundary layers*, 24. Januar.
- C. SINISTRARI, Universität Tübingen, *Ein Theorem vom Poincaré-Bendixson-Typ für hyperbolische Erhaltungsgleichungen*, 23. April.
- V. A. SOBOLEV, Samara State University, Rußland, *French ducks in combustion theory*, 9. Mai.
- J. SOKOŁOWSKI, Université de Nancy I, Frankreich, *Domain optimization problems for elliptic and parabolic systems*, 14. August.
- R. SPIELMANN, Technische Universität Dresden, *Bifurkationen bei distributionellen semilinearen elliptischen Randwertaufgaben*, 23. Januar.
- H. SPOHN, Ludwig-Maximilians Universität, München, *Hydrodynamischer Limes für das Ginzburg $\Delta\Phi$ Modell*, 22. Mai.
- L. STALS, Universität Augsburg, *Parallel multigrid using unstructured finite element methods*, 30. Mai.
- M. STIEFENHOFER, Universität Konstanz, *Quasi-stationäre Zustände und Dynamisierung von Parametern in chemischen Netzwerken*, 11. April.
- YU. M. SUHOV, University of Cambridge, Großbritannien, *The illumination problem for polygonal billiards with point obstacles*, 12. Dezember.
- P. TAKÁČ, Universität Rostock, *Monotone dynamische Systeme und parabolische Gleichungen*, 17. Dezember.
- S. TAVENER, Pennsylvania State University, USA, *Symmetry-breaking in an abrupt channel expansion*, 5. September.

- D. TIBA, Rumänische Akademie der Wissenschaften, Bukarest, Rumänien, *Constraint qualification conditions in convex programming*, 31. Januar.
- D. TJOSTHEIM, Universität Bergen, Norwegen, *Nonparametric tools for nonlinear time series and regression models*, 16. Oktober.
- L. TRUSKINOVSKY, University of Minnesota, Minneapolis, USA, *Ericksen's bar revisited*, 20. September.
- YU. TSCHERSKIJ, Staatliche Akademie für Bauwesen und Architektur, Odessa, Ukraine, *Über eine Extremalaufgabe für Faltungsooperatoren*, 15. Januar.
- , *Die mehrdimensionale paarige Faltungsgleichung und ihre Transponierte*, 10. Juni.
- , *Die Integralgleichungen im Filterungsproblem stochastischer Prozesse*, 17. Juni.
- , *Extremale Randwertprobleme für analytische Funktionen*, 24. Juni.
- D. TURAEV, Weizmann Institut Rehovot, Israel, *On smooth Hamiltonian flows which approximate scattering billiards*, 10. Dezember.
- K. URBAN, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, *Software-Tools zur numerischen Lösung von Operatorgleichungen mit Wavelet-basierten Multiskalenverfahren*, 29. Mai.
- V. A. VATUTIN, Steklov Mathematical Institute, Moskau, Rußland, *Random permutations related with a sorting algorithm*, 11. Dezember.
- M. J. VISHIK, Staatliche Universität Moskau, Rußland, *Attractors of trajectories and their Kolmogorov entropy*, 30. Oktober.
- U. VOSS, Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik, *Finite-Volumen-Verfahren zur Lösung der instationären Maxwellgleichungen*, 12. Dezember.
- M. WAND, University of New South Wales, Sydney, Australien, *Nonparametric variance and autocovariance function estimation*, 11. Dezember.
- B. WERKER, Universität Tilburg, Niederlande, *Adaptive estimation in time series models*, 12. Juni.
- CH. WIENERS, Universität Stuttgart, *Adaptive Mehrgitter finiter Elemente*, 29. Mai.
- U. WIEST, Universität Augsburg, *FEM++ – Ein objektorientierter Finite-Element-Code*, 30. Mai.
- R. WILLENBROK, SonoTech, Berlin, *Neue Ansätze zur Verbesserung der Auflösung bei der Ultraschallabbildung*, 7. Oktober.
- R. WINKLER, Universität Wien, Österreich, *The distribution of sequences and its transformation behaviour*, 23. Februar.
- G. WOZNY, Technische Universität Berlin, *Einsatz von Modellen zur Prozeßoptimierung*, 17. Juni.

F. WYROWSKI, Friedrich-Schiller-Universität Jena, *Wozu Mikrostrukturen in der Optik?* 11. November.

A. YAGOLA, Moskauer Staatliche Lomonossov-Universität, Rußland, *Nonlinear ill-posed problems in applications*, 31. Januar.

M. YAMAMOTO, University of Tokyo, Japan, *An inverse antenna problem: Stability and regularization*, 17. April.

L. YANG, Humboldt-Universität zu Berlin, *Nonparametric autoregression and model selection*, 30. Oktober.

H. ZINNER, Daimler-Benz AG, München, *Simulation von Mikrosystemkomponenten – Anforderungen aus industrieller Sicht*, 5. Februar.

I. ZORIN, Universität St. Petersburg, Rußland, *Diffusive processes in elastic solids. Some optimal control problems*, 12. April.

6.10 Mitveranstaltung auswärtiger Tagungen

M. NUSSBAUM, Session organizer, *Asymptotic equivalence of experiments*, Institute of Mathematical Statistics Annual Meeting, Chicago, USA, 4. – 8. August.

——, *Seminar on Mathematical Statistics Paris–Berlin*, Garchy, Frankreich, 29. September – 4. Oktober.

J. SPREKELS, *ESF–Workshop „Damage and Free Boundaries“*, Moissac, Frankreich, 20. – 22. März.

——, *ESF–Workshop „Crystal Growth“*, Oberstaufen, 24. – 26. März.

——, *Tagung „Thermodynamische Materialtheorien“*, Oberwolfach, 22. – 28. September.

6.11 Produkte

ClusCorr - Statistiksoftware zur Clusteranalyse und multivariaten grafischen Darstellung

Die Software ClusCorr kann zur Klassifikation, Clusteranalyse und multivariaten grafischen Darstellung umfangreicher und hochdimensionaler Datenmengen eingesetzt werden. Sie erkennt Strukturen in den Daten. Hierzu werden neue adaptive statistische Techniken sowie aus der Literatur bekannte und in der praktischen Anwendung bewährte Methoden eingesetzt. Die Arbeit wird durch interaktive Dendrogramme und Grafiken mit direkten Datenlinks unterstützt. ClusCorr ist unter Microsoft EXCEL auf PC oder Workstation lauffähig. Anwender der Statistik-Software ClusCorr bearbeiten statistische Klassifikationsprobleme in den verschiedensten Bereichen von Wirtschaft, Administration, Banken, Verlagen, Ingenieurbüros, Wissenschaft, Forschung und Lehre. Mehr als 40 Interessenten haben bereits ClusCorr erworben. Eine weitaus größere Anzahl hat auf Tagungen und Messen (z. B. CeBIT) durch uns statistische Beratung zu Problemen der Klassifikation und multivariaten Grafik erfahren und/oder Beta-Versionen unserer Software erhalten.

PARIX - BLACS

Die neue Version der BLACS (Basic Linear Algebra Communication Subprograms, 1995) stellt eine anerkannte Schnittstelle für das Message Passing in Algorithmen der Linearen Algebra auf Distributed Memory Systemen dar und wurde 1996 vom WIAS in der Sprache C für Parallelrechner, die mit dem Betriebssystem PARIX arbeiten, bereitgestellt.

Die Kommunikationssoftware BLACS ermöglicht u. a. die Nutzung der Public Domain Software ScaLAPACK (Distributed-Memory-System-Version von LAPACK) und PARPACK (iterative Lösung hochdimensionaler Eigenwertprobleme) unter dem Betriebssystem PARIX.

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.

6.12 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“
- mit BMBF/Rolls Royce: „Stabilität von Verdichtersystemen – mathematische Aspekte“ (HTGT-Turbotech II)

DAAD

- PROCOPE
- Wissenschaftleraustausch mit Rußland

Deutsche Forschungsgemeinschaft, Bonn

- „Multiskalen-Methoden für die numerische Behandlung von Operatorgleichungen“
- „Untersuchung von Halbleitergleichungen mit der Einteilchenenergie als einer unabhängigen Variablen“
- Schwerpunktprogramm: „Strukturbildung in dissipativen kontinuierlichen Systemen“
- Schwerpunktprogramm: „Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung“
- Schwerpunktprogramm: „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“
- Sonderforschungsbereich 373, Berlin
„Quantifikation und Simulation ökonomischer Prozesse“
- Wissenschaftleraustausch mit Rußland
- deutsch-ukrainische Zusammenarbeit: „Quasiperiodische Störungen“
- Zusammenarbeit deutscher und russischer Wissenschaftler im Rahmen des Memorandum of Understanding zwischen DFG und RFFI: „Singular gestörte Systeme und Stabilitätswechsel“

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

- „Bestimmung der Bodendurchlässigkeit aus Grundwasserständen“
- „Datenstrukturen für adaptive Simplex-Elemente in 2- und 3-Raumdimensionen“

Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Berlin

- „Numerische Simulation der Streulichtausbreitung in optisch dicken Gewebeschichten“

BASF

- „Offline Optimierung diskontinuierlicher Destillationsprozesse“

Daimler-Benz AG, Ulm

- „ClusCorr“