Weierstraß–Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS)

im Forschungsverbund Berlin e. V.

Jahresforschungsbericht 1997

Berlin 1998

Arbeitsfassung

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 Kontinuumsmechanik 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
Dynamik tiefer Störstellen an Grenzflächen von Halbleiterstrukturen . . 16
Modellierung und 2D-Simulation von Quantum-Well-Halbleiterlasern unter Einbindung des Schrödinger-Poisson-Systems 19
Elektro-Reaktions-Diffusionsgleichungen unter Einbeziehung von Clusterreaktionen 21
Stabilität von Verdichtersystemen 24
Diffusion und Reaktion von Iod in aktiviertem Polyethylen 25
Elektro-Reaktions-Diffusionsgleichungen in Heterostrukturen mit Anwendungen in der Halbleitertechnologie 27
Über stationäre Schrödinger-Poisson-Systeme mit Kohn-Sham-Potential 30
Phasenfeldgleichungen und Stefan-Probleme 32
Hysteresephänomene in Elastoplastizität und Phasenübergängen 34
4.2 Forschungsgruppe Dynamische Systeme und Steuerungstheorie 37
4.2.1 Zusammenfassung 37
Rückkopplungssteuerungen in kontinuierlichen und diskreten Kontrollsystemen 38
Modellierung, Analysis und Numerik von Prozessen in optischen Kommunikationssystemen 40
Optimale Steuerung diskontinuierlicher Destillationsprozesse 44
Intermittierende Dynamik 47

Numerische Verfahren für singulär gestörte Eigenwertaufgaben bei Sturm-Liouville-Problemen 49
Stabilitätswechsel in Mehrskalensystemen 50
4.3 Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen 51
4.3.1 Zusammenfassung 51
Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen 52
Simulation von monolithisch integrierten Höchstfrequenzschaltungen . . 55
pdelib - Algorithmen und Softwarekomponenten für die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen 58
Simulation von Transportprozessen in porösen Medien 61
Visualisierung von numerischen Simulationen und von Präsentationen . 63
4.4 Forschungsgruppe Integralgleichungen und Pseudodifferentialgleichungen . . 64
4.4.1 Zusammenfassung 64
4.4.2 Projekte 65
Direkte und inverse Probleme für diffraktive Strukturen in der Optik . . 65
Optimierung integrierter Kolonnensysteme unter stochastischen Echtzeitbedingungen 69
Behandlung von Problemen der Bruchmechanik und Kontinuumsmechanik mit Integralgleichungsmethoden 72
Inverse Probleme der Seismik und Tomographie 75
Multiskalen-Methoden 78
Stabilität von Optimierungsproblemen mit nichtglatten Daten 81
4.5 Forschungsgruppe Stochastische Systeme mit Wechselwirkung 82
4.5.1 Zusammenfassung 82
4.5.2 Projekte 83
Tieftemperaturphasen in Modellen mit langreichweitiger Wechselwirkung 83
Spin-Gläser und Neuronale Netze 85
Katalytische Verzweigungsstrukturen 86
Phasentrennung und kristalline Gleichgewichtsformen 88
Elektronentransport in ungeordneten Materialien 90
Stochastische Teilchensysteme 92
Stochastische Partikelsysteme als numerische Verfahren für Probleme der Aerosoldynamik 94
4.6 Forschungsgruppe Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik . 95
4.6.1 Zusammenfassung 95
4.6.2 Projekte 96
Data Mining Software Clementine: Dendrogramme 96
Adaptive Verfahren der Bildverarbeitung 98
Stochastische Modelle und Monte-Carlo-Methoden für Nukleation, Koagulation und Transport von Partikeln in turbulenten Strömungen 100
Diskretisierung von Attraktoren in zufälligen dynamischen Systemen . . 103
Simulation der Telegrafengleichung unter realistischen Versuchsbedingungen 105
Dynamische stochastische Algorithmen 107

Probabilistische Lösung partieller Differentialgleichungen und stochastische Resonanz 109
Statistische Verfahren für Ökonometrie und Finanzmathematik 112
Nichtparametrische Diskriminanzanalyse 114
Modellwahl und Konfidenzbereiche in heteroskedastischen nichtlinearen Regressionsmodellen 115
Entscheidungstheorie für nichtparametrische Experimente 117
4.7 Forschungsgruppe Kontinuumsmechanik 119
4.7.1 Zusammenfassung 119
4.7.2 Projekte 120
Streuung elastischer Wellen an Inhomogenitäten 120
Anwendungen des Maximum-Entropie-Prinzips 122
Molekulardynamik 124
Röntgenbeugungsexperimente mit Superlegierungen 126
Schallwellen und Stoßwellen in porösen Stoffen 128
Schadstofftransporte in porösen Materialien 130
Martensitische Umwandlung 131
4.8 Gruppenübergreifende Projekte 132
4.8.1 Projekte 132
Modellierung, Simulation und Optimierung der Oberflächenhärtung von Stahl 132
Komponenten für die Data Mining Software Clementine 136
Approximation und Optimierung von Platten 140

5 Wissenschaftlich-technische Dienste 142
5.1 Bibliothek 142
5.2 Fachinformation 145
5.3 Rechentechnik 146

6 Publikationen, wissenschaftliches Leben 148
6.1 Veröffentlichungen 148
6.2 Preprints, Reports 156
6.2.1 WIAS-Preprint-Serie 156
6.2.2 WIAS-Report-Serie 160
6.2.3 Preprints/Reports an anderen Einrichtungen 160
6.3 Mitherausgabe von Zeitschriften 162
6.4 Vorträge und Gastaufenthalte von Mitarbeitern 163
6.4.1 Arbeitsaufenthalte von Mitarbeitern 179
6.5 Vorlesungen und Seminare 181
6.6 Dissertationen, Habilitationen und Rufe 183
6.7 Eigene Tagungen und Veranstaltungen des WIAS 184
6.8 Gastaufenthalte am WIAS 187
6.9 Gastvorträge 193
6.10 Mitveranstaltung auswärtiger Tagungen 203
6.11 Produkte 204
6.12 Drittmittelprojekte 206

1 Vorwort

Das Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS) legt hiermit Kollegen und Förderern des Instituts seinen Jahresforschungsbericht 1997 vor.

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

Das zentrale Ereignis des Jahres war die Evaluierung des Instituts durch den Wissenschaftsrat, die mit der Bekanntgabe der Stellungnahme am 14.11.1997 ihren Abschluß fand. Das Resultat wurde von der Vorsitzenden des Wissenschaftsrates, Frau Prof. D. Schipanski, als „ausgezeichnet" bezeichnet. Der Wissenschaftsrat stellte u. a. fest:

- „Das WIAS nimmt national und international eine wichtige Stellung für die anwendungsorientierte mathematische Forschung auf den Gebieten Analysis und Stochastik ein."
- „Mehrere Forschungsgruppen leisten Beiträge zur internationalen Spitzenforschung."
- „Die Forschungsschwerpunkte als auch die Forschungsleistungen des Weierstraß-Instituts sind überregional bedeutsam. Es besteht ein gesamtstaatliches Interesse an seiner Arbeit."

Viel Lob für die geleistete Arbeit, über das wir uns sehr freuen. Daneben sprach der Wissenschaftsrat auch Empfehlungen aus, deren Umsetzung in den nächsten Jahren verstärkte Anstrengungen des Instituts erfordern wird; dies betrifft insbesondere auch die Aufforderung, vermehrt Drittmittel aus Industrie und Wirtschaft einzuwerben. Besonders wichtig für die weitere Entwicklung des Instituts ist aber die Empfehlung des Wissenschaftsrats, das Problem einer dauerhaften Besetzung der Leiterstelle der Forschungsgruppe „Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen" durch eine gemeinsame Berufung auf eine C4-S-Professur mit der Freien Universität Berlin zu lösen. Die zügige Umsetzung dieser Empfehlung ist ein vorrangiges Ziel des Instituts für 1998.

Nicht vergessen werden darf neben der Wissenschaftsratsevaluierung die eigentliche Aufgabe des WIAS, nämlich die Forschungstätigkeit. Das *Forschungsprogramm 1997–1999* wurde sehr erfolgreich in Angriff genommen, wobei sich insbesondere die zum 01.01.1997 neu eingerichtete Forschungsgruppe „Kontinuumsmechanik" bewährte. Die Anzahl der Veröffentlichungen, Promotionen und Berufungen war wiederum erfreulich hoch, aber auch in der Einwerbung von Drittmitteln war das WIAS sehr erfolgreich. Letzteres manifestierte sich besonders im Rahmen des neuen BMBF-Förderprogramms „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft": Nicht weniger als neun Projektanträge des WIAS wurden bewilligt, ein überzeugender Beweis für die Anwendungsorientiertheit des WIAS, aber auch seiner Akzeptanz in Industrie und Wirtschaft!

Unverändert bleibt es das übergeordnete Ziel des Instituts, Grundlagenforschung und anwendungsorientierte Forschung miteinander zu verbinden und durch innovative Mathematik zur Fortentwicklung des Wirtschaftsstandortes Deutschland beizutragen. Hierzu sollte dem Institut auch in Zeiten knapper Ressourcen eine Grundausstattung gewährt werden, die ihm eine angemessene Chance im Wettbewerb um externe Fördermittel einräumt; nur dann wird das Institut seine vom Wissenschaftsrat attestierte hohe Kompetenz in vollem Umfang nutzbringend einbringen können.

Wir hoffen, daß dieser Bericht möglichst vielen Kollegen und Förderern aus Industrie, Wirtschaft und Wissenschaft zur Information dienen und ihnen Anregungen für künftige wissenschaftliche Kooperationen geben möge.

Berlin, im Februar 1998

J. Sprekels
Direktor

2 Wissenschaftlicher Beirat des WIAS

Prof. Dr. P. Deuflhard

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

14195 Berlin

Prof. Dr. H. Föllmer

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

10099 Berlin

Prof. Dr. K.-H. Hoffmann

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. Niezgódka

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

PL–02-106 Warsaw
Poland

Prof. Dr. M. J. Vishik

Institute for Problems
of Information Transmission

Ermolova Street 19

101447 Moscow GSP-4
Russia

Prof. Dr. C. J. van Duijn

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

NL–1090 GB Amsterdam
The Netherlands

Prof. Dr. E. Zeidler

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

04103 Leipzig

3 Aufgabenstellung und Struktur des WIAS

3.1 Aufgabenstellung des WIAS

Das *Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS)* im Forschungsverbund Berlin e. V. verfolgt als Institut der Wissenschaftsgemeinschaft Gottfried Wilhelm Leibniz e. V. (WGL) Forschungsziele, die von gesamtstaatlichem Interesse und überregionaler Bedeutung sind. 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 1997 nach fachspezifischen Gesichtspunkten in sieben Forschungsgruppen gegliedert; hinzu kamen die wissenschaftlich-technischen Dienste. Im folgenden sind die Aufgaben dieser Abteilungen angegeben. Dabei ist zu bemerken, daß zur Lösung konkreter Anwendungsprobleme in der Regel *längerfristig kooperierende interdisziplinäre Projektgruppen* zusammen mit Anwendern gebildet werden, in die Institutsmitarbeiter aus verschiedenen Fachrichtungen ihre jeweilige mathematische Expertise einbringen. Diese Arbeitsweise nutzt die spezifischen Möglichkeiten eines außeruniversitären Instituts und trägt mit zur *horizontalen Vernetzung* innerhalb des Instituts bei. Die Verbesserung der horizontalen Vernetzung innerhalb des Instituts im Sinne eines möglichst effektiven Einsatzes der personellen Ressourcen ist eine ständige Aufgabe des Instituts.

WEIERSTRASS-INSTITUT FÜR ANGEWANDTE ANALYSIS UND STOCHASTIK
im Forschungsverbund Berlin e. V.
10117 Berlin, Mohrenstraße 39
Tel.: 20377-596, Fax: 2044975

DIREKTOR
Prof. Dr. J. Sprekels
App. 586

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

WISS. ASSISTENTIN DES DIREKTORS	BIBLIOTHEK	RECHENTECHNIK	VERWALTUNG	TECHNOLOGIEBEAUFTRAGTER
Dipl.-Ing. M. Teuchert	Dipl.-Math. H. Rothkirch	Dr. G. Telschow	Dr. U. Schulze	Dr. D. Hömberg
App. 594	App. 296	App. 590	App. 557	App. 491

3.2.1 Forschungsgruppe Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen

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

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

3.2.2 Forschungsgruppe Dynamische Systeme und Steuerungstheorie

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

Technik. Aufgrund der Komplexität der zu untersuchenden Prozesse kann ihr Verhalten nur in seltenen Fällen rein analytisch bestimmt werden. Ein zentrales Problem stellt deshalb die *Reduktion* der mathematischen Modelle unter Beibehaltung essentieller Eigenschaften dar.
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 Algebro-Differentialgleichungen und von großen nichtlinearen kontinuierlichen Optimierungsproblemen. Die Hauptaufgabe der Forschungsgruppe besteht in der Entwicklung, Begründung und Implementation numerischer Algorithmen zur Lösung solcher Systeme. Gleichzeitig sind anwenderfreundliche Schnittstellen und Benutzeroberflächen zu entwickeln.
Die Forschungsgruppe erfüllt dabei auch *Servicefunktionen von zentraler Bedeutung* innerhalb des WIAS: Sie arbeitet an entscheidender Stelle an der Entwicklung und Implementation nutzerorientierter Softwarepakete mit und sorgt in enger Abstimmung mit den fachlich jeweils zuständigen Forschungsgruppen für deren Aktualisierung und Pflege. Insbesondere ist sie für die Entwicklung benutzerfreundlicher graphischer Oberflächen und Fragen der *Visualisierung* im WIAS zuständig.

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

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

3.2.4 Forschungsgruppe Integralgleichungen und Pseudodifferentialgleichungen

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

Die Hauptaufgabe der Forschungsgruppe 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, Mikrobauelemente) von Bedeutung. In derartig großen Systemen treten qualitativ neue *kollektive Phänomene* auf, die von spezifischen Details weitgehend unabhängig sind. Die Hauptaufgabe der Forschungsgruppe besteht darin, anwendungsorientierte Beiträge zur Klärung derartiger Phänomene zu liefern. Insbesondere geht es um die Entwicklung von Methoden und Verfahren zur Herleitung von Gleichungen für eine Beschreibung der globalen, makroskopischen Größen dieser Systeme.
Die Forschungsschwerpunkte der Forschungsgruppe liegen auf den Gebieten

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

3.2.6 Forschungsgruppe Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik

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 Kontinuumsmechanik

Viele Anwendungsprobleme aus Naturwissenschaft und Technik führen auf kontinuumsmechanische und thermodynamische Fragestellungen. Die Hauptaufgabe der Forschungsgruppe besteht darin, spezifische Beiträge zu derartigen Fragestellungen in komplexen Anwendungsfeldern zu liefern. Dabei sollen Modellierung, analytische Behandlung sowie Algorithmen- und Softwareentwicklung als Einheit verstanden und anwendungsorientierte interdisziplinäre Projekte durchgeführt werden.

Von besonderer Bedeutung für Wirtschaft, Ingenieurwesen und Technologie sind gegenwärtig Fragen der

- Thermomechanik poröser und granularer Medien (Böden, Mörtel, Beton),
- Eigenschaften moderner Werkstoffe (z. B. Legierungen mit Formgedächtnis, Superlegierungen, piezoelektrische und magnetostriktive Stoffe, Verbundwerkstoffe),
- Nichtgleichgewichtsthermodynamik bei Phasenumwandlungen.

In diesen Anwendungsfeldern befinden sich die Modellierung und die mathematische Theorie der Kopplung der verschiedenen *thermomechanischen Effekte* noch in den Anfängen. Die Forschungsgruppe konzentriert ihre zukünftigen Forschungen in dieser Richtung.

3.2.8 Wissenschaftlich-technische Dienste

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

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

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

4 Forschungsergebnisse und Anwendungsprojekte

4.1 Forschungsgruppe Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen

4.1.1 Zusammenfassung

Die Forschungsgruppe hat ihre im Institutsforschungsprogramm konzipierten Arbeiten zur mathematischen und numerischen Untersuchung komplexer Systeme nichtlinearer partieller Differentialgleichungen, die relevante naturwissenschaftliche und technologische Prozesse 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 Shape-Memory-Phänomenen,
- 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.
Im Berichtsjahr wurden die vom BMBF geförderten Verbundprojekte

- Modellierung und 2D-Simulation von Quantum-Well-Halbleiterlasern unter Einbindung des Schrödinger-Poisson-Systems
- Reaktions-Diffusionsgleichungen in Mehrphasensystemen mit Anwendungen in der Halbleitertechnologie

erfolgreich abgeschlossen.
Die Gruppe ist am neuaufgelegten BMBF-Förderprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“ mit folgenden Projekten wesentlich beteiligt:

- Thema: 3D-Simulation von Halbleiterdetektoren

  Bearbeiter: H. Gajewski, R. Nürnberg, J. Fuhrmann (FG 3), H. Langmach (FG 3), I. Schmelzer (FG 3)

- Thema: Modellierung, Analyse und Simulation des Widerstands-Impulsschweißens

  Bearbeiter: D. Hömberg, W. Dreyer (FG 7), F. Duderstadt

- Thema: Modellierung und Simulation von hochsperrenden Bauelementen für Schaltkreise der angesteuerten Leistungselektronik

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

- Thema: Modellierung und Simulation verspannter Quantenschichten in Halbleiterlasern

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

- Thema: Züchtung von SiC-Kristallen durch Sublimation

  Bearbeiter: J. Sprekels, N. Bubner, O. Klein, P. Philip, K. Wilmański (FG 7)

Zudem sind folgende Projekte der Forschungsgruppe Bestandteil der im Berichtsjahr verteidigten DFG-Förderprogramme „Schwerpunktprogramm: Halbleiterbauelemente hoher Leistung“ bzw. „Sonderforschungsbereich: Komplexe nichtlineare Prozesse“:

- Physikalische Modellierung und numerische Simulation von Strom- und Wärmetransport bei hoher Trägerinjektion und hohen Temperaturen,

- Analytische und numerische Untersuchungen zur Strukturbildung in Halbleitern.

Im Anschluß werden ausgewählte Projekte der Forschungsgruppe detaillierter vorgestellt.

Dynamik tiefer Störstellen an Grenzflächen von Halbleiterstrukturen

Bearbeiter: H. Gajewski, R. Nürnberg

Kooperation: S. J. Anz, O. Krüger, N. S. Lewis (California Institute of Technology, Division of Chemistry and Chemical Engineering), P. Krispin (Paul-Drude-Institut für Festkörperphysik)

Elektrisch aktive Zustände an Grenzflächen zwischen unterschiedlichen Halbleitermaterialien oder an Halbleiter/Elektrolyt-Übergängen können den Ladungstransfer wesentlich beeinflussen. Im Projekt wurde die dynamische Wechselwirkung an Grenzflächen lokalisierter Störstellen mit beweglichen Ladungsträgern in Halbleitern modelliert und analysiert. Zur Durchführung von Simulationsrechnungen wurden die Modelle in das von der Gruppe erarbeitete Programmsystem ToSCA [2] implementiert. Als Anwendungen wurde die Abklingdynamik lichterregter Ladungsträger an Halbleiter-Flüssigkeits-Grenzflächen [1] und die durch tiefe Störstellen verursachte Feld- und Frequenzabhängigkeit der Leitfähigkeit und Kapazität von Halbleiter-Heterostrukturen untersucht [4].

Die dynamische Wechselwirkung zwischen den beweglichen Elektronen n und Löchern p einerseits und den ortsfesten, durch ihre Besetzungsfunktionen $f = f_l$ repräsentierten Störstellenniveaus andererseits wird durch das folgende System partieller Differentialgleichungen beschrieben:

$$\begin{aligned}
-\nabla\cdot(\varepsilon\nabla\varphi) &= q(D+p-n+\sum_l(\delta N_t f)_l)\ , \\
\frac{\partial n}{\partial t}-\nabla\cdot J_n &= \sum_l\left(N_t[s_n s_p(n_i^2-np)/z-\delta(s_n n+e_n)(f-f_e)]\right)_l\ , \\
\frac{\partial p}{\partial t}+\nabla\cdot J_p &= \sum_l\left(N_t[s_n s_p(n_i^2-np)/z+\delta(s_p p+e_p)(f-f_e)]\right)_l\ , \\
\frac{df}{dt}+zf &= zf_e\ , \\
f_e=f_{el} &= \frac{1}{2}[1-\delta(s_n n-e_n-s_p p+e_p)/z], \\
z=z_l &= s_n n+e_n+s_p p+e_p.
\end{aligned} \tag{1}$$

Dabei sind:

φ	– elektrostatisches Potential,
ε	– Dielektrizitätsfunktion,
q	– Elementarladung,
D	– Dotierungsdichte,
$\delta=+1$	– akzeptorartige,
$\delta=-1$	– donatorartige Störstellen,
$J_n=-\mu_n n\nabla\phi_n$	– Elektronenstromdichte,
$J_p=-\mu_p p\nabla\phi_p$	– Löcherstromdichte,
$\varphi_n,\ \varphi_p$	– Quasi-Ferminiveaus für Elektronen bzw. Löcher,
$\mu_n,\ \mu_p$	– Beweglichkeiten von Elektronen bzw. Löchern,
$n_i=\sqrt{N_c N_v}e^{-E_g/2kT}$	– Eigenleitungsdichte,

N_c, N_v,	– Zustandsdichten im Leitungs- bzw. Energieband,
$E_g = E_c - E_v$	– Lücke im Energieband,
$N_t = N_{tl}$	– Zustandsdichten der Störstellen,
$s_n = s_{nl}$, $s_p = s_{pl}$	– Einfangkoeffizienten,
$e_n = n_i s_n e^{(E_t - E_i)/kT}$, $e_p = n_i s_p e^{(E_i - E_t)/kT}$	– Emissionsraten,
$E_t = E_{tl}$	– Aktivierungsenergien der Störstellen,
$E_i = (kT \log \frac{N_v}{N_c} + E_c + E_v)$	– Intrinsische Energie.

Im Rahmen der Fermi-Dirac-Statistik gilt:

$$\begin{aligned} n &= N_c \mathcal{F}((q(\varphi - \phi_n) + E_i)/kT), \\ p &= N_v \mathcal{F}((q(\phi_p - \varphi) - E_i - E_g)/kT), \\ \mathcal{F}(s) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{t}\ dt}{1 + \exp(t-s)}. \end{aligned}$$

Das im Ort-Zeit-Zylinder $\Omega \times (0,T)$ zu integrierende System (1) ist durch Anfangs- und Randbedingungen, etwa entlang Ohmscher Kontakte $\Gamma \subset \partial\Omega$, zu komplettieren:

$$\varphi = \varphi_\Gamma,\ n = n_\Gamma,\ p = p_\Gamma. \tag{2}$$

Eine stationäre Lösung $\{\varphi, n, p, f\}$ des Systems (1)–(2) beschreibt einen durch die Randwerte eingestellten Zustand des modellierten Halbleiterbauelements. Die Reaktion des in diesem Zustand befindlichen Bauelements auf eine Erregung mit der Frequenz ω und kleiner Amplitude ε wird durch die komplexe admittance-Matrix

$$Y = G + j\omega C$$

charakterisiert, deren Real- bzw. Imaginärteil Leitwerte G bzw. Kapazitäten C des Bauelements im fixierten Zustand repräsentieren. Zur Ermittlung von Y als Funktion von φ_Γ und ω muß das System (1) bei gestörten Randbedingungen für das elektrostatische Potential gelöst werden:

$$\varphi = \varphi_\Gamma + \varepsilon e^{j\omega t}.$$

Das geschieht mittels des Ansatzes:

$$\begin{aligned} \varphi_\varepsilon &= \varepsilon(\varphi_{re} \sin \omega t + \varphi_{im} \cos \omega t), \\ n_\varepsilon &= \varepsilon(n_{re} \sin \omega t + n_{im} \cos \omega t), \\ p_\varepsilon &= \varepsilon(p_{re} \sin \omega t + p_{im} \cos \omega t), \\ f_\varepsilon &= \varepsilon(f_{re} \sin \omega t + f_{im} \cos \omega t). \end{aligned}$$

Die Matrix Y ergibt sich dann durch Berechnung der zur Störung $\{\varphi_{re,im}, n_{re,im}, p_{re,im}\}$ gehörenden Ladungsströme durch die Kontakte Γ. Mit dem Ansatz (3) geht man in das System (1), dividiert durch ε und führt den Grenzübergang $\varepsilon \to 0$ aus. So ergibt sich schließlich das folgende lineare System partieller Differentialgleichungen für die Störung $\{\varphi_{re,im}, n_{re,im}, p_{re,im}\}$

$$
: \quad \begin{aligned}
-\nabla\cdot(\varepsilon\nabla\varphi_{re}) &= q(p_{re} - n_{re} + \sum_l (\delta N_t f_{re})_l)\ , \\
-\nabla\cdot(\varepsilon\nabla\varphi_{im}) &= q(p_{im} - n_{im} + \sum_l (\delta N_t f_{im})_l)\ , \\
-\omega n_{im} - \nabla\cdot J_{n_{re}} &= \sum_l (N_t[(s_n n + e_n) f_{re}) + s_n n_{re}(f_e - 1)])_l\ , \\
\omega n_{re} - \nabla\cdot J_{n_{im}} &= \sum_l (N_t[(s_n n + e_n) f_{im}) + s_n n_{im}(f_e - 1)])_l\ , \\
-\omega p_{im} + \nabla\cdot J_{p_{re}} &= -\sum_l (N_t[(s_p p + e_p) f_{re}) + s_p p_{re} f_e])_l\ , \\
\omega p_{re} + \nabla\cdot J_{p_{im}} &= -\sum_l (N_t[(s_p p + e_p) f_{im}) + s_p p_{im} f_e])_l\ , \\
-\omega f_{im} &+ (s_n n_{re} + s_p p_{re}) f_e + z f_{re} = s_n n_{re}\ , \\
\omega f_{re} &+ (s_n n_{im} + s_p p_{im}) f_e + z f_{im} = s_n n_{im}\ .
\end{aligned}
$$

Literatur

1. S. J. ANZ, O. KRÜGER, N. S. LEWIS, H. GAJEWSKI, *Conditions under which heterogeneous charge transfer rate constants can be extracted from transient photoluminicence decay data of semiconductor/liquid contacts as determined by twodimensional transport modelling*, eingereicht in: Journal of Physical Chemistry.

2. H. GAJEWSKI, GAMM-Mitteilungen, **16** (1993), pp. 35–57.

3. H. GAJEWSKI ET AL., ToSCA (Two-dimensional Semi-Conductor Analysis Package), User's guide, IAAS Berlin, (1992).

4. P. KRISPIN, H. GAJEWSKI, *Dynamical response of interface traps in semiconductor stuctures*, (erscheint).

5. W. VAN ROOSBROECK, *Theory of flow of electrons and holes in germanium and other semiconductors*, Bell System Tech. J., **29** (1950), pp. 560–607.

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), P. Kleinert (Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik Berlin (PDI)), H. Wenzel (Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik Berlin (FBH))

Förderung: BMBF

Dieses Projekt ist der Abschluß des drei Jahre laufenden gleichnamigen BMBF-Projektes (siehe WIAS-Jahresforschungsbericht 1996 sowie [1] und [2]).
Ziel des Projektes war die Simulation von Halbleiterlasern (Laserdioden), deren laseraktive Schicht durch einen oder mehrere Quantum-Wells (QWs) gebildet wird. Dazu ist die selbstkonsistente Ankopplung des Schrödinger-Poisson-Systems an den makroskopischen Ladungstransport, der schon seit langem erfolgreich mit dem Programmsystem ToSCA simuliert wird, erforderlich. Während im letzten Jahr vorrangig an der Simulation zweidimensionaler Quantenstrukturen gearbeitet wurde (Quantum-Wires), ist bei QW's eine Schar eindimensionaler Quantengebiete zu betrachten.
Eine typische QW-Struktur dieser Art ist in Abbildung 1 dargestellt.

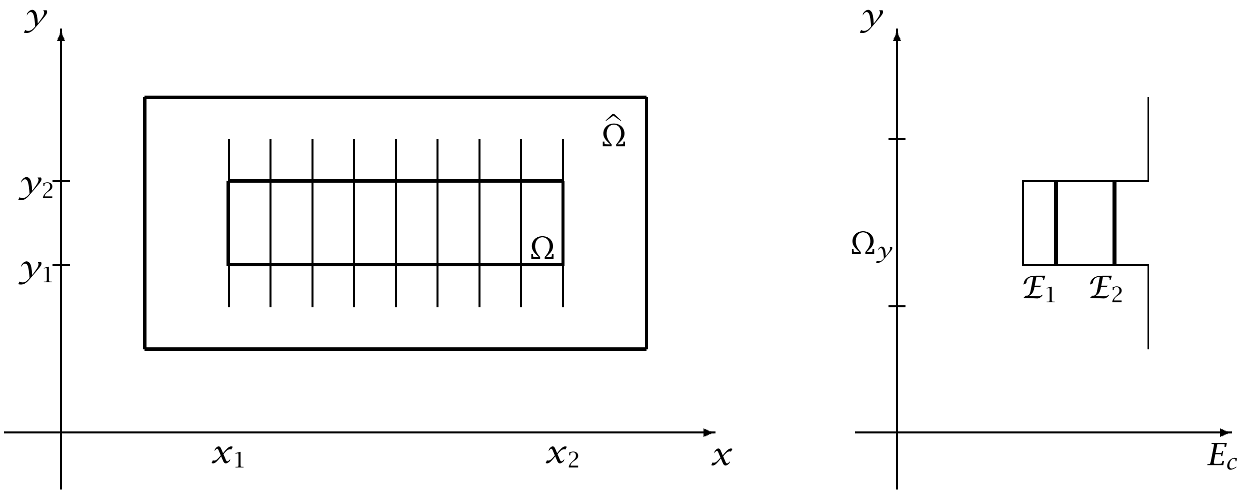


Abb. 1: QW-Struktur

Das interessierende Nanogebiet Ω (der QW) ist in das Gebiet $\hat{\Omega}$ eingebettet, in dem die klassischen Transportgleichungen gelöst werden, wobei spezielle Randbedingungen am Rand von Ω berücksichtigt werden.
Die Struktur des Bauelementes zeichnet sich oft dadurch aus, daß durch die Wahl der Materialien eine Schicht erzeugt wird, in der gebundene Zustände auftreten. Im Bild ist das Gebiet Ω in y-Richtung so schmal (das Intervall $[y_1, y_2]$), daß die Ladungsträger sich in dieser Richtung nicht mehr frei bewegen können.
Dabei sind in der Regel die Materialien so gewählt, daß die Leitungsbandkante E_c schematisch die Form eines Potentialtopfes hat, in dem einige gebundene Zustände auftreten (siehe $\mathcal{E}_1$ und $\mathcal{E}_2$ in Abb. 1). Im Bild wird ein parallel zur x-Achse gelegter Quantum-Well betrachtet.

Der Potentialtopf bildet sich dann in einem Querschnitt parallel zur y-Achse und für jeden Punkt $x \in [x_1, x_2]$. Typisch für solche Strukturen ist, daß das derart durch die Materialien gebildete Potential V_0 in y stückweise konstant und für jedes Element der Schar identisch ist ($V_0 = V_0(y)$). Für jeden Punkt $x \in [x_1, x_2]$ wird in dem Gebiet $\Omega_y = \Omega_y(x)$ das Eigenwertproblem (Schrödingergleichung)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial y}\frac{1}{m^*(y)}\frac{\partial}{\partial y} + V_0(y) + V(x,y)\right]\psi_k(x,y) = \mathcal{E}_k(x)\,\psi_k(x,y) \tag{1}$$

gelöst. Hier sind $m^*(y)$ und $V_0(y)$ stückweise konstante Funktionen, $\mathcal{E}_k(x)$ die Eigenwerte und $\psi_k(x,y)$ die Eigenfunktionen.
Die Dichte der gebundenen Ladungsträger berechnet sich dann durch

$$n_q(x,y) = \sum_{k=1}^{k_q} N_k(x)\,|\psi_k(x,y)|^2, \tag{2}$$

wobei $N_k(x)$ geeignete Besetzungszahlen sind und k_q die Zahl der gebundenen Zustände ist. In x-Richtung sind die Ladungsträger frei beweglich. Diese Bewegung kann durch eine klassische Transportgleichung beschrieben werden. Das Eigenwertproblem (1) ist mit dem klassischen Problem in $\hat{\Omega}$ über Randbedingungen, Rekombinationsterme und das elektrostatische Potential $V(x,y)$ gekoppelt (siehe auch [2]).
Numerisch wird die Schar von Eigenwertproblemen (1) gelöst, indem als erstes ein Problem der Form

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial y}\frac{1}{m^*(y)}\frac{\partial}{\partial y} + V_0(y)\right]\psi_k^{(0)}(y) = \mathcal{E}_k^{(0)}\,\psi_k^{(0)}(y)$$

explizit gelöst wird. Anschließend werden die $\psi_k(x,y)$ in der Form

$$\psi_k(x,y) = \sum_j \alpha_{kj}(x)\,\psi_j^{(0)}(y)$$

gesucht. Diese Methode ist geeignet, die konkreten, am FBH entwickelten Halbleiterlaser zu modellieren [2].

Literatur

1. 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, Hrsg.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1997, pp. 281–291.

2. H. Gajewski, H.-Chr. Kaiser, J. Rehberg, H. Stephan, *Modellierung und 2D-Simulation von Quantum-Well-Halbleiterlasern unter Einbindung des Schrödinger-Poisson-Systems*, Schlußbericht des BMBF Projektes GA7FVB-1.0M850, Berlin, 1997.

Elektro-Reaktions-Diffusionsgleichungen unter Einbeziehung von Clusterreaktionen

Bearbeiter: A. Glitzky, R. Hünlich

Kooperation: B. Heinemann, H. Rücker u. a. (Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder) GmbH (IHP)), N. Strecker (Institut für Integrierte Systeme, ETH Zürich)

Förderung: DFG-Sachbeihilfe

Wir betrachten Differentialgleichungssysteme, die die Umverteilung elektrisch geladener Spezies in Heterostrukturen durch Diffusion und Reaktionen unter Berücksichtigung ihrer elektrischen Wechselwirkung modellieren, wobei wir uns bezüglich konkreter Modelle an Problemstellungen aus der Halbleitertechnologie orientieren (siehe auch den Beitrag auf S. 27). Zunächst haben wir ein Basismodell untersucht, das auf ein System von partiellen Differentialgleichungen führt, bestehend aus Kontinuitätsgleichungen für die Dichten aller beteiligten beweglichen Spezies und einer linearen Poissongleichung für das elektrostatische Potential, wobei für die Poissongleichung gemischte Randbedingungen anzunehmen sind [6]. Ergebnisse zu diesem Modell für den Fall, daß nur Randbedingungen dritter Art vorliegen, haben wir auch in [2] zusammengestellt.
In vielen Anwendungen kann das Basismodell zumindest näherungsweise vereinfacht werden, wenn die Temperatur (wie z. B. bei der Halbleitertechnologie-Modellierung) hoch ist. Dann sind die kinetischen Koeffizienten der freien Ladungsträger im Vergleich zu denen anderer Spezies sehr groß, und man kann die Elektronen- und Löcherdichten aus dem Statistikansatz sowie das elektrostatische Potential aus einer dann nichtlinearen und nichtlokalen Poissongleichung berechnen und somit die Kontinuitätsgleichungen für Elektronen und Löcher weglassen. Für die verbleibenden m Spezies mit den Ladungszahlen q_i, $i=1,\ldots,m$, bezeichnen wir mit u_i, v_i, $i=1,\ldots,m$, die Konzentration und das chemische Potential. Das resultierende Differentialgleichungssystem umfaßt nun m Kontinuitätsgleichungen gekoppelt mit einer Aufgabe zur Bestimmung des chemischen und elektrochemischen Potentials v_0 und ζ_0 der Elektronen, die aus einer nichtlinearen Poissongleichung mit gemischten Randbedingungen und mit einer nichtlokalen Nebenbedingung besteht (zur Herleitung vgl. [6]):

$$\begin{gathered}
\frac{\partial u_i}{\partial t} - \nabla\cdot(D_i u_i \nabla(v_i+q_i v_0)) + R_i^\Omega = 0 \quad \text{in } \mathbb{R}_+\times\Omega,\\
\nu\cdot(D_i u_i \nabla(v_i+q_i v_0)) + R_i^\Gamma = 0 \quad \text{auf } \mathbb{R}_+\times\Gamma, \quad u_i(0)=U_i \quad \text{in } \Omega;\\
-\nabla\cdot(\varepsilon\nabla v_0) + e_0(v_0) = \sum_{i=1}^m q_i u_i \quad \text{in } \mathbb{R}_+\times\Omega,\\
\nu\cdot(\varepsilon\nabla v_0) + \tau v_0 = \tau\zeta_0 \quad \text{auf } \mathbb{R}_+\times\Gamma_N, \quad v_0=\zeta_0 \quad \text{auf } \mathbb{R}_+\times\Gamma_D,\\
\int_\Omega e_0(v_0)\,\mathrm{d}x = \int_\Omega \sum_{i=1}^m q_i u_i\,\mathrm{d}x \quad \text{auf } \mathbb{R}_+.
\end{gathered} \tag{1}$$

Dabei sind R_i^Ω bzw. R_i^Γ die Reaktionsraten im Volumen bzw. am Rand, die ausgehend vom Massenwirkungsgesetz in der Form

$$R_i = \sum_{(\alpha,\beta)} k_{\alpha\beta}\Big(\prod_{k=1}^m e^{\alpha_k(v_k+q_k v_0)} - \prod_{k=1}^m e^{\beta_k(v_k+q_k v_0)}\Big)(\alpha_i-\beta_i)$$

angesetzt werden. Hierbei bezeichnen α und β die um die Komponenten für Elektronen und Löcher gekürzten stöchiometrischen Vektoren der entsprechenden Reaktionen. Für den Zusammenhang zwischen den Konzentrationen u_i und den chemischen Potentialen v_i wird im betrachteten Modell die Boltzmann-Statistik angenommen. Die Dielektrizität ε sowie die kinetischen Koeffizienten D_i, $k_{\alpha\beta}$ sind wegen der Heterostruktur in nichtglatter Weise ortsabhängig, die kinetischen Koeffizienten werden in der Regel noch vom Zustand selbst abhängen.
Wir beschreiben nun kurz Resultate, die wir für eine geeignete schwache Formulierung von (1) gewonnen haben [4,6]. Innerhalb einer Kompatibilitätsklasse, die durch den Anfangswert festgelegt wird, gehört zu (1) genau ein stationärer Zustand. Das Problem (1) besitzt höchstens eine schwache Lösung. Entlang einer Lösung fällt die freie Energie

$$F(u) = \int_\Omega \Big(\frac{\varepsilon}{2}|\nabla v_0|^2 + e_0(v_0)v_0 - \int_0^{v_0} e_0(y)\,\mathrm{d}y + \sum_{i=1}^m \Big(u_i(\ln\frac{u_i}{\overline{u}_i} - 1) + \overline{u}_i\Big)\Big)\mathrm{d}x$$

$$+ \int_{\Gamma_N} \frac{\tau}{2}(v_0 - \pi(v_0))^2\,\mathrm{d}\Gamma,$$

$$\pi(w) = \begin{cases} (\operatorname{mes}\Gamma_D)^{-1}\displaystyle\int_{\Gamma_D} w\,\mathrm{d}\Gamma & \text{falls } \operatorname{mes}\Gamma_D \neq 0, \\ \|\tau\|_{L^1(\Gamma_N)}{}^{-1}\displaystyle\int_{\Gamma_N} \tau w\,\mathrm{d}\Gamma & \text{falls } \operatorname{mes}\Gamma_D = 0, \end{cases} \quad w \in H^1(\Omega)$$

monoton. Mittels einer Abschätzung der freien Energie durch die Energiedissipationsrate analog zu [3] kann zusätzlich das exponentielle Fallen der freien Energie entlang von Trajektorien des Systems gezeigt werden. In [4] wird für den Fall maximal quadratischer Reaktionen im Volumen bzw. der Ordnung eins auf dem Rand die globale Lösbarkeit der Modellgleichungen nachgewiesen. Zur Herleitung der nötigen a priori-Abschätzungen werden übliche Moser-Iterationen herangezogen.
Motiviert durch Aufgaben aus der Halbleitertechnologie werden nun spezielle Reaktionen beliebig hoher Ordnung, sogenannte Clusterreaktionen, der Form

$$\alpha_1 X_1 + \cdots + \alpha_l X_l \rightleftharpoons X_j, \quad j \in \{l+1,\ldots,m\}$$

im Problem (1) zusätzlich zugelassen (vgl. [5]). Dabei wird angenommen, daß die Clusterspezies X_j, $j \in \{l+1,\ldots,m\}$, außerdem nur an speziellen Reaktionen maximal zweiter Ordnung beteiligt sind.
Die Hauptschwierigkeit bei der Behandlung von Reaktionen höherer Ordnung liegt in den zum Nachweis der Lösbarkeit der Aufgabe erforderlichen a priori-Abschätzungen. Wir machen wesentlichen Gebrauch von den aus dem exponentiellen Fallen der freien Energie resultierenden Abschätzungen

$$\|u_i - u_i^*\|_{L^r(\mathbb{R}_+, L^{r'})} \le c_r \quad r \in [2,\infty),\ 1/r + 1/r' = 1,$$

wobei u_i^* die Konzentrationen im stationären Zustand sind. Zunächst starten wir mit einer möglicherweise großen Zahl von Anlaufschritten, in denen geeignet gewählte Testfunktionen

$$e^t\Big(\Big(\frac{u_1}{\overline{u}_1}\Big)^{n-1},\ldots,\Big(\frac{u_l}{\overline{u}_l}\Big)^{n-1},\Big(\frac{u_{l+1}}{\overline{u}_{l+1}}\Big)^{(n-1)/L},\ldots,\Big(\frac{u_m}{\overline{u}_m}\Big)^{(n-1)/L}\Big)$$

verwendet werden, die simultan unterschiedliche Potenzen der normierten Konzentrationen für die verschiedenen Klassen von Spezies enthalten. Dabei bezeichnet L die maximale Ordnung aller auftretenden Clusterreaktionen, $\overline{u}_i$, $i = 1, \ldots, m$, sind Referenzkonzentrationen. Die Struktureigenschaften der Clusterreaktionen gezielt ausnutzend, werden die verwendeten Potenzen so gewählt, daß in den Gleichungen für die Clusterspezies X_j die auftretenden Quellterme, die sehr hoher Ordnung sind, mit sehr kleinen Potenzen von $u_j/\overline{u}_j$ multipliziert werden. Anschließend wird durch Moser-Iteration (nun wieder mit einheitlichen Potenzen) die gewünschte globale obere Schranke für Lösungen von (1) nachgewiesen. Globale positive untere Schranken für die Konzentrationen erhält man wie in [4].
Durch Regularisierung in den Reaktionstermen wird die Aufgabe auf endlichen Zeitintervallen in ein Elektro-Diffusionssystem mit schwach nichtlinearen Quelltermen im Volumen und auf dem Rand überführt, dessen Lösbarkeit wir in [6] nachgewiesen haben. Für dessen Lösung erhalten wir Schranken, die nicht vom Regularisierungslevel abhängen, so daß diese Lösungen bei hinreichend großem Abschneidelevel gleichzeitig Lösungen von (1) sind.
Die globalen Abschätzungen für Lösungen von (1) und das exponentielle Fallen der freien Energie implizieren die stärkeren asymptotischen Aussagen, daß sich die Konzentrationen und chemischen Potentiale in jeder L^p-Norm exponentiell ihren Gleichgewichten nähern.
Ein ähnliches anisotropes Iterationsverfahren zum Auffinden von a priori-Abschätzungen wie oben beschrieben haben wir in [1] benutzt, um ein spezielles Reaktions-Diffusionssystem mit gewissen Randreaktionen zweiter Ordnung unter der Annahme der lokalen Elektroneutralität zu behandeln.
Ergebnisse zu Zeitdiskretisierungen der Reaktions-Diffusionsgleichungen sind in [1,3] enthalten.

Literatur

1. A. GLITZKY, K. GRÖGER, R. HÜNLICH, *Discrete-time methods for equations modelling transport of foreign-atoms in semiconductors*, Nonlinear Anal., **28** (1997), pp. 463–487.

2. A. GLITZKY, R. HÜNLICH, *Electro-reaction-diffusion systems for heterostructures*, in: *Free boundary problems and applications* (Eds. M. Niezgódka, P. Strzelecki), Addison Wesley Longman, 1996, pp. 305–313.

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

4. A. GLITZKY, R. HÜNLICH, *Global estimates and asymptotics for electro-reaction-diffusion systems in heterostructures*, App. Anal., **66** (1997), pp. 205–226.

5. A. GLITZKY, R. HÜNLICH, *Electro-reaction-diffusion systems including cluster reactions of higher order*, eingereicht bei: Math. Nachr.

6. A. GLITZKY, R. HÜNLICH, *Electro-reaction-diffusion systems in heterostructures*, in Vorbereitung.

Stabilität von Verdichtersystemen

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

Kooperation: J. Anders (BMW - RollsRoyce AeroEngines, Dahlewitz)

Förderung: BMBF, BMW - Rolls Royce AeroEngines, Dahlewitz

Die Zielsetzung des Projekts besteht in der Entwicklung von Techniken zur aktiven Kontrolle von transienten Erscheinungen in Verdichtersystemen. Dazu sollen analytische und numerische Untersuchungen sowie Simulationen der Strömungsinstabilitäten in Verdichtern durchgeführt werden.

Ausgangspunkt sind dabei die instationären, kompressiblen, reibungsbehafteten Bewegungsgleichungen für ein kompressibles Gas. Hierbei geht es vor allem um die Untersuchung der Stabilitätsphänomene „surge" (pumpen) und „rotating stall" (rotierende Ablösung).

Aktueller Stand der Arbeiten:
Es werden Verfahren studiert, die für die Behandlung ein- und zweidimensionaler axialsymmetrischer Strömungen in Turbomaschinen geeignet sind. Fortgesetzt wurden die Arbeiten zur numerischen Behandlung des hydraulischen Modells für kompressible Strömungen in Röhren veränderlichen Querschnitts. Aufbauend auf ein Programmsystem zur numerischen Auswertung der Gleichungen dieses Modells wurden Verfahren entwickelt, die die gleichzeitige Berechnung gekoppelter Teile von Verdichtersystemen gestatten. Die Kopplungen werden dabei im Sinne von „actuator disc"-Modellen durch Erhaltungssätze bzw. Kennlinien simuliert. Diese Methodik wurde inzwischen auch auf zweidimensionale Strömungen ausgedehnt, wo neben der axialen Veränderlichen auch die Winkelveränderliche betrachtet wird. Aufbauend auf spezielle Verfahren zur Lösung der zweidimensionalen Eulerschen Gleichungen sowie geeignete Rand- und Übergangsbedingungen wurde ein Programmsystem entwickelt, das die zweidimensionale Berechnung von Verdichtersystemen gestattet. Die numerische Auswertung der Rand- und Übergangsbedingungen ergibt sich zum einen aus der Charakteristikentheorie, und zum anderen werden die Rand- und Übergangsbedingungen explizit vorgegeben. Diese Übergangsbedingungen sind vom Massenstrom abhängig und werden aus externen Berechnungen bestimmt. Generell charakterisieren diese Bedingungen die Arbeitsweise der Verdichter im stationären Regime. Die bisher genauesten Ansätze in dieser Richtung stammen dabei von Longley [1]. Ein Ziel des Projektes ist es, die Untersuchungen von Longley durch systematische Anwendung der Methoden der Bifurkationstheorie fortzusetzen. Die Software wurde in C geschrieben. Auf Einladung der Arbeitsgemeinschaft Hochtemperatur-Gasturbine wurde über theoretische Untersuchungen zum Stabilitätsverhalten vorgetragen (Köln-Porz, DLR, 23.10.1997, J. Förste).

Literatur

1. J. P. LONGLEY, *Advanced Civil Core Compressor Aerodynamics*, Brite/Euram AC3A Project, Task B6, 1996.

Diffusion und Reaktion von Iod in aktiviertem Polyethylen

Bearbeiter: K. Zacharias

Kooperation: G. Rafler, R. Wilken (Fraunhofer-Institut für Angewandte Polymerforschung, Teltow-Seehof)

Bei Bestrahlung einer dünnen Polyethylenschicht mit ultraviolettem Licht geeigneter Wellenlänge entstehen freie Radikale. Zu ihrem Nachweis läßt man Iod in die Polymerschicht eindiffundieren. Das dabei in der Schicht entstehende Iodid kann – bis zu einer gewissen Analysentiefe – durch XPS-Messungen (X-ray Photoelectron Spectroscopy) ermittelt werden. Zur quantitativen Untersuchung dieses Vorgangs wird ein Reaktions-Diffusionsmodell zur Beschreibung der Reaktion freier Radikale mit eindiffundierendem Iod betrachtet. Bei der mathematischen Modellierung werden Reaktionskinetik und Transport des Iods durch Diffusion berücksichtigt. Das mathematische Modell besteht demgemäß aus einer Kombination von Reaktionsgleichungen mit einer Diffusions-Reaktionsgleichung. Das Modell soll Aussagen über den Einfluß der beteiligten Parameter (Diffusionskonstante, Geschwindigkeitskonstanten, Konzentration des Iods am Rand und Anfangskonzentration der Radikale) liefern. Durch Vergleich mit vorliegenden Messungen soll die Richtigkeit der dem Modell zugrunde gelegten Vorstellungen überprüft werden. Das Modell wurde von Herrn R. Wilken (IAP Teltow-Seehof) vorgeschlagen.
Die beteiligten Substanzen (bzw. deren Konzentrationen) seien I - Iod, R - Radikale, S - Iodid.
Die experimentellen Gegebenheiten gestatten es, ein räumlich eindimensionales Modell zu betrachten. Demgemäß werden Konzentrationsverläufe

$$I = I(t,x), \quad R = R(t,x), \quad S = S(t,x)$$

auf dem Gebiet

$$G = \{(t,x) : \ 0 < t < T, \ 0 < x < a\}$$

gesucht, die dort folgenden Gleichungen genügen:

$$\frac{\partial I}{\partial t} = D\frac{\partial^2 I}{\partial x^2} - c_1 IR, \tag{1}$$

$$\frac{dR}{dt} = -c_1 IR - c_2 R, \tag{2}$$

$$\frac{dS}{dt} = c_1 IR. \tag{3}$$

Für die Iodkonzentration sind Randbedingungen

$$I(t,0) = I_0, \quad \frac{\partial I}{\partial x}(t,a) = 0, \quad t \geq 0, \tag{4}$$

vorgeschrieben. Die Anfangsbedingungen sind

$$I(0,x) = 0, \quad 0 < x \leq a, \tag{5}$$

und

$$R(0,x) = R_0 \exp(-x/\mu), \quad S(0,x) = 0, \quad 0 \leq x \leq a.$$

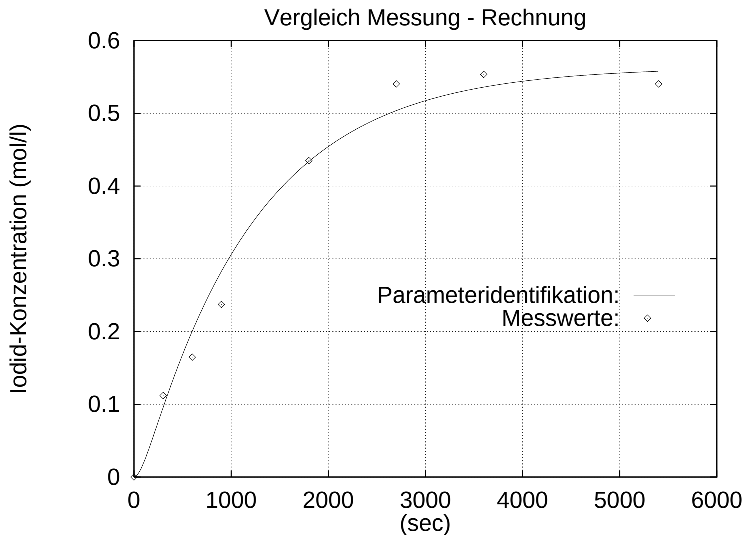
Die Anfangs- und Randbedingungen für Iod sind im Punkt $(t = 0, x = 0)$ in obiger Version inkompatibel. Eine Version mit kompatiblen Anfangs- und Randbedingungen erhält man, wenn man die Annahme macht, daß die Zudosierung des Iod am Rande zeitabhängig erfolgt. Ein (physikalisch sinnvoller) Dosierungsmechanismus ist durch

$$I(t,0) = I_0(1 - \exp(-\kappa t))$$

gegeben.
Wesentliche Größe für den Vergleich zwischen Messung und Rechnung ist der Zeitverlauf der (räumlich gemittelten) Iodid-Konzentration, gegeben durch

$$h(t) = \frac{1}{\lambda} \int_0^b S(t,x) \exp(-x/\lambda) dx, \quad 0 \leq t \leq T.$$

Dabei ist die Integration über eine bekannte Analysetiefe $0 < b < a$ vorzunehmen, die durch die Meßtechnik vorgegeben ist.
Die Modellgleichungen lassen sich bei gegebenen Konstanten $D, c_1, c_2, I_0, R_0, \kappa, \lambda, \mu$ nach Standardmethoden numerisch lösen. Wesentlicher als dieses direkte Problem ist das inverse Problem: durch Vergleich Messung-Rechnung Aussagen über die beteiligten Konstanten zu gewinnen. Von besonderem Interesse sind die Reaktionskonstante c_1 und die Anfangskonzentration der Radikale R_0. Ein typisches Ergebnis einer derartigen Parameteridentifikation ist in der Abbildung gegeben.
Es ist unbekannt, ob eine eindeutige Bestimmung z. B. dieser Parameter durch die gegebene Meßgröße möglich ist. Zur Beurteilung der Ergebnisse ist eine enge Zusammenarbeit mit dem Kooperationspartner unerläßlich.



Elektro-Reaktions-Diffusionsgleichungen in Heterostrukturen mit Anwendungen in der Halbleitertechnologie

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

Kooperation: B. Heinemann, F. Herzel, U. Jagdhold, H. Rücker u. a. (Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder) GmbH (IHP)), N. Strecker (Institut für Integrierte Systeme, ETH Zürich)

Förderung: BMBF

Im inzwischen abgeschlossenen Vorhaben wurden Beiträge zur Modellierung und Simulation von Prozessen geleistet, die bei der Herstellung von Bauelementen der Nanoelektronik ablaufen (siehe [2,3]). Behandelt wurden Fragestellungen, die beim Verbundpartner, dem Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder), bei der Entwicklung von SiGe-Hetero-Bipolartransistoren im Rahmen des LOTUS-Projektes auftraten (siehe [4]).

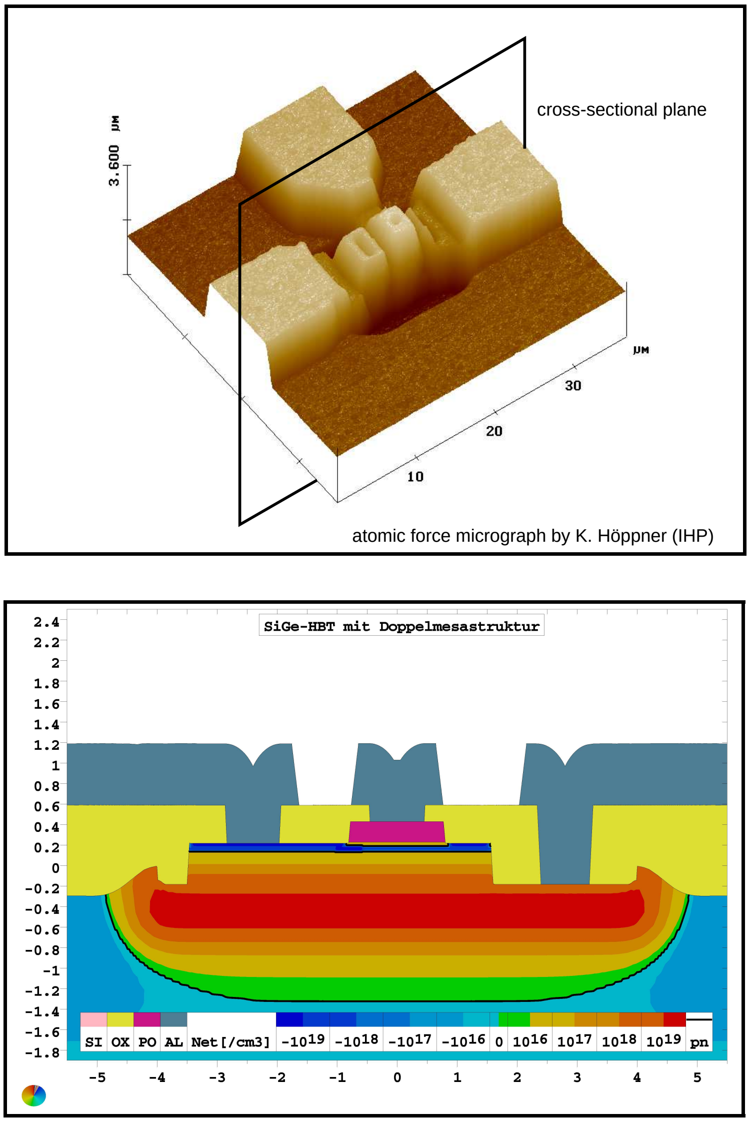


Abb. 1: SiGe-Hetero-Bipolartransistoren. Das obere Bild zeigt die atomkraftmikroskopische Aufnahme eines SiGe-HBTs, der am IHP hergestellt und in komplexere mikroelektronische Schaltkreise integriert worden ist (entnommen aus [4]). Diese Entwicklungsarbeiten sind durch umfangreiche numerische Simulationen unterstützt worden (Technologiesimulation mit TEMO und DIOS, Bauelementesimulation mit ToSCA). Dadurch konnten zur Strukturbildung und zu den Dotierungsverhältnissen viele Entscheidungshilfen geliefert und eine effektive Anpassung und Optimierung des Transistors und seiner Technologie durchgeführt werden. Das untere Bild zeigt als Resultat einer Technologiesimulation den Querschnitt durch einen solchen Transistor. Derartige Ergebnisse bilden den Ausgangspunkt für anschließende Bauelementesimulationen zur Berechnung verschiedener Kennlinien des Transistors.

Aus Sicht der Anwendungen bestand das Anliegen des Vorhabens darin, die beim Verbundpartner eingesetzten Technologiesimulatoren (vgl. Abb. 1) entsprechend dem neuen Transistorkonzept weiterzuentwickeln. Schwerpunkte waren dabei Untersuchungen zur Diffusion von Bor (und anderen Fremdatomen) in verspannten SiGe-Schichten.

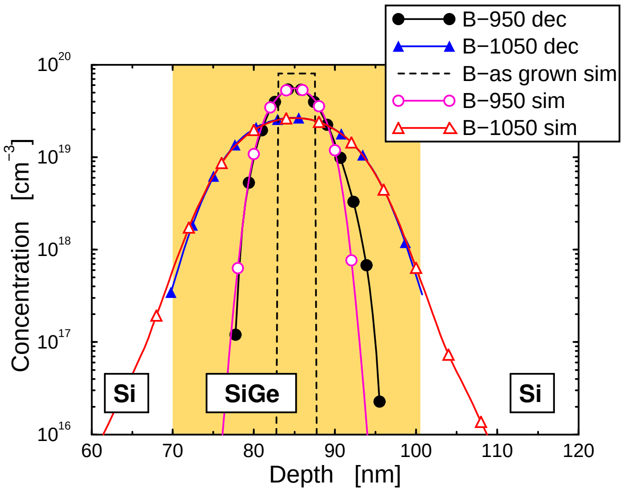


Abb. 2: Diffusionsmodell für Bor in SiGe-Schichten. Die Identifikation der Modellparameter erforderte die Entwicklung von Entfaltungsalgorithmen zur Auswertung der Meßkurven (siehe [1]) und die Implementierung des Modells in den 1D-Technologiesimulator TEMO. Die Abbildung zeigt einen Vergleich von aus Messungen durch Entfaltung gewonnenen (dec) und simulierten (sim) Bor-Profilen nach Anpassung der Parameter.

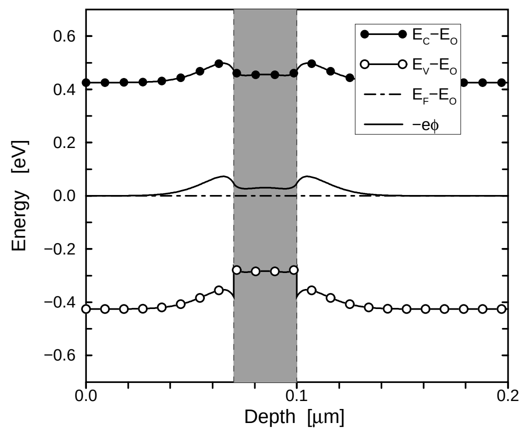
Das hierzu entwickelte, verifizierte und implementierte Modell (vgl. Abb. 2) hat sich grundsätzlich bewährt, muß aber für zukünftige Untersuchungen aus mehreren Gründen verbessert werden (siehe [3]). Einer der Gründe besteht darin, daß der Einfluß des inneren elektrischen Feldes an den Heterogrenzen genauer berücksichtigt werden sollte. Das elektrostatische Potential ist dann nicht mehr aus der Annahme der lokalen Elektroneutralität, sondern als Lösung einer nichtlinearen Poissongleichung mit einer nichtlokalen Nebenbedingung zu berechnen (siehe [3] sowie den Beitrag auf S. 21). Etwas vereinfacht läßt sich dieses Problem wie folgt beschreiben:

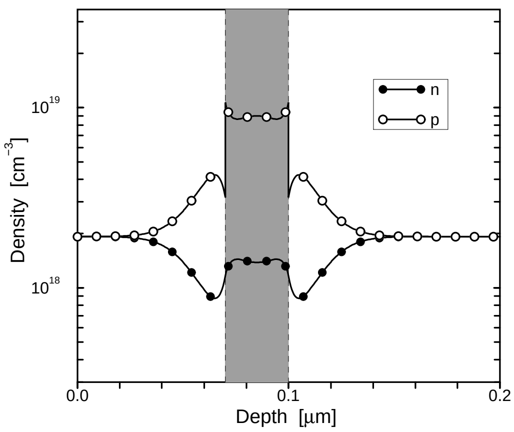
$$-\lambda^2 \nabla\cdot(\varepsilon_{\mathrm{rel}}\nabla\Phi) + e_0(\Phi+\zeta) = u_0 \quad \text{in } \Omega,$$
$$\Phi = 0 \quad \text{auf } \Gamma_D, \quad \lambda^2 \nu\cdot(\varepsilon_{\mathrm{rel}}\nabla\Phi) + \tau\Phi = 0 \quad \text{auf } \Gamma_N$$
$$\int_\Omega e_0(\Phi+\zeta)\,\mathrm{d}x = \int_\Omega u_0\,\mathrm{d}x.$$

Zu bestimmen sind das elektrostatische Potential Φ und das elektrochemische Potential der Elektronen ζ, die Dotierung u_0 ist vorgegeben. Ferner ist $e_0(y) = \overline{n}e^y - \overline{p}e^{-y}$; die materialabhängigen Größen $\varepsilon_{\mathrm{rel}}$, τ, $\overline{n}$, $\overline{p}$ sind in Heterostrukturen bezüglich x unstetig. Die Elektronen- bzw. Löcherdichte erhält man dann gemäß

$$n = \overline{n}e^{\Phi+\zeta}, \quad p = \overline{p}e^{-\Phi-\zeta}.$$

Zur Lösung dieser Aufgabe wurden 1D-Programme entwickelt, um die Unterschiede zur bisher benutzten lokalen Elektroneutralitätsnäherung zu klären. Ergebnisse für eine typische Si/SiGe/Si-Struktur sind in Abb. 3 dargestellt.
Gegenstand der analytischen und numerischen Untersuchungen waren Elektro-Reaktions-Diffusionsgleichungen, die relevante Aufgaben aus der Halbleitertechnologie modellieren. Zur Existenz, Einzigkeit und zum asymptotischen Verhalten von Lösungen dieser Gleichungen und ihrer semidiskreten Form wurden neue Resultate erzielt. Auf diese und weiterführende Ergebnisse wird im Beitrag auf S. 21 eingegangen.





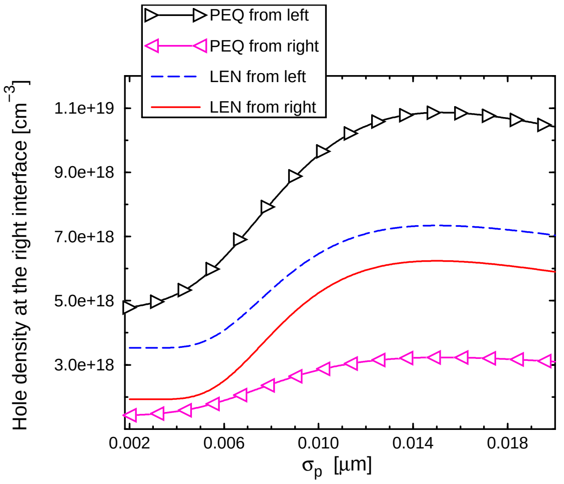


Abb. 3: Beispiel zur Lösung der nichtlinearen, nichtlokalen Poissongleichung in einer Heterostruktur. Für eine Si/SiGe/Si-Struktur mit einer 30 nm breiten SiGe-Schicht, die mit Bor dotiert ist (Gaußverteilung mit Standardabweichung σ_p), wurden nach Lösung der Poissongleichung das Energiebanddiagramm (oben links) und die Elektronen- und Löcherdichten (oben rechts) berechnet. Die Löcherdichte weist an den Si/SiGe-Grenzen Sprünge auf. Wird σ_p variiert, ändern sich die Sprünge, wie das linke Bild zeigt (PEQ). Hier sind auch die Dichten dargestellt, die sich bei Verwendung der Elektroneutralitätsnäherung (LEN) ergeben.

Literatur

1. F. Herzel, K.-E. Ehwald, B. Heinemann, D. Krüger, R. Kurps, W. Röpke, H.-P. Zeindl, *Deconvolution of narrow boron SIMS depth profiles in Si and SiGe*, Surface and Interface Analysis, **23** (1995), pp. 764–770.

2. 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, Hrsg.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1997, pp. 303–313.

3. R. Hünlich, A. Glitzky, W. Röpke, *Reaktions-Diffusionsgleichungen in Heterostrukturen mit Anwendungen in der Halbleitertechnologie. Schlußbericht zu einem Vorhaben im BMBF-Förderprogramm „Anwendungsorientierte Verbundvorhaben auf dem Gebiet der Mathematik“*, WIAS-Report No. 13 (1997).

4. Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder), *Jahresforschungsbericht 1996*.

Über stationäre Schrödinger-Poisson-Systeme mit Kohn-Sham-Potential

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

Die Arbeit des Jahres 1997 am Kohn-Sham-System setzte die des Jahres 1996 konsequent fort. Insbesondere ging es darum, für das räumlich eindimensionale System, das Quantum-Wells - den in der Physik und Technik häufigsten Fall von dimensionsreduzierten Halbleiterstrukturen - beschreibt, Existenz- und Regularitätsaussagen herzuleiten (vgl. WIAS-Preprint No. 368, 1997), die denen der zwei- und dreidimensionalen Probleme mit Austausch-Korrelations-Potential entsprechen (vgl. WIAS-Preprint No. 339, 1997). Die Schwierigkeit lag hierbei darin, daß der Austausch-Korrelationsterm im räumlich eindimensionalen Fall nicht mehr durch eine stetige Abbildung von L^1 nach L^2 dargestellt werden kann, sondern die durch ihn definierten Potentiale nur noch als in L^1 liegend angenommen werden können. Indessen erwies es sich, daß die L^1-Potentiale im Sinne der Störungstheorie von Formen noch behandelt werden können, und daß die Birman-Solomyak-Techniken, welche Abschätzungen der Lösungen in Termen der Daten des Problems ermöglichen, noch anwendbar sind.

Ein zweiter Arbeitsschwerpunkt des Jahres 1997 lag in der Konzeption von Modellen, die auf eine Einbettung der quantenmechanischen Beschreibung der Nanostruktur in eine makroskopische Beschreibung der Umgebung hinzielen. Es handelt sich hierbei um ein äußerst kompliziertes Problem, das in den letzten Jahren in den Blickwinkel sowohl der Mathematik als auch Physik geriet und von einer befriedigenden Lösung noch sehr weit entfernt zu sein scheint (vgl. [2]). Wir streben bezüglich dieses Problems keine universelle Lösung im Sinne von First Principles an (vgl. dazu z. B. [4] und die dort zitierten Arbeiten in diese Richtung), sondern es soll ein phänomenologisches Modell erstellt werden, welches eine selbstkonsistente Kopplung des bewährten van Roosbroeck-Systems zur elektronischen Modellierung von Halbleitermikrostrukturen mit dem Kohn-Sham-System zur Beschreibung von Nanostrukturen darin, wie etwa eingebetteten Quantum-Wells oder -Wires, realisiert (vgl. [3]). Ausgangspunkt unserer Überlegungen war die Beobachtung (vgl. WIAS-Preprint No. 339, 1997), daß im Fall des bisher betrachteten Kohn-Sham-Systems mit selbstadjungiertem Hamiltonian nicht nur die quantenmechanische Stromdichte über der gesamten Nanostruktur verschwindet, sondern auf dem Rand der Struktur selbst die Normalenableitung der Teilchendichte. Im allgemeinen wird dadurch die Stromkontinuität verletzt, und die numerische Simulation mit so einfach aneinandergefügten van Roosbroeck- und Kohn-Sham-Systemen scheitert daran (vgl. hierzu z. B. die entsprechenden Versuche von P. Ellrodt [1]). Die Stromkontinuität wurde nun bei uns an die Spitze der Überlegungen gestellt: das Zusammenfügen der beiden Modelle sollte so geschehen, daß am Interface der verschieden modellierten Halbleitergebiete sowohl die mikroskopischen und makroskopischen Teilchendichten als auch die Normalkomponenten der entsprechenden Ströme stetig ineinander übergehen.

Ausgangspunkt war, zunächst im Fall eines nicht-selbstadjungierten Hamiltonian mit ausschließlich einfachen (normierten) Eigenelementen ψ_l, eine korrespondierende Definition von Teilchendichten und -strömen in der Nanostruktur durch gewichtete Summen:

$$u = \sum_l N_l \left|\psi_l\right|^2 \qquad j = \sum_l N_l \, \Im\left[\psi_l^* \nabla \psi_l\right].$$

Die N_l sind dabei wie im selbstadjungierten Fall reelle Besetzungsfaktoren, deren genaue Form noch geklärt werden muß. Versieht man einen Kohn-Sham-Hamiltonian mit der unsymmetrischen (!) Randbedingung

$$\frac{\hbar}{m}\frac{\partial\psi}{\partial\nu} = -e\; i\mu\psi\frac{\partial\Phi}{\partial\nu} \qquad (*)$$

auf dem Interface zwischen der Nanostruktur und dem übrigen durch das van Roosbroeck-System beschriebene elektronische Bauelement, so folgt die Stromkontinuität, wenn man die Stetigkeit der Teilchendichten gewährleistet. Dabei ist ψ eine beliebige Eigenfunktion, m die effektive Masse, μ die Beweglichkeit, Φ das makroskopische Quasi-Fermi-Potential und $e = \pm 1$ die Ladung der betrachteten Ladungsträger sowie ν der äußere Normaleneinheitsvektor auf dem Rand der Nanostruktur. Da man die Stetigkeit der Teilchendichten am Interface zwischen dem Kohn-Sham- und dem van Roosbroeck-System durch eine geeignete Randbedingung an die Stromkontinuitätsgleichung im van Roosbroeck-System sichern kann, war die vorstehende Beobachtung Anlaß, den nicht-selbstadjungierten Hamiltonian mit der Randbedingung $(*)$ genauer zu betrachten. Unter sinnvollen Annahmen über das makroskopische Quasi-Fermi-Potential Φ ist $\nu \cdot \big(\mu\nabla\Phi\big)$ eine auf dem Rand der Nanostruktur konzentrierte Distribution und erlaubt, die formale Randbedingung $(*)$ als quadratische Form auf L^2 zu definieren. Diese (unsymmetrische) Randform ist infinitesimal klein gegen die Form des reinen Differentialoperators im Hamiltonian. Mit Hilfe der Störungstheorie von Formen kann gezeigt werden, daß es genau einen Hamiltonoperator H mit der Randbedingung $(*)$ auf L^2 gibt. Dieser ist zwar unsymmetrisch, erzeugt aber auf L^2 eine analytische Halbgruppe. Darüber hinaus hat H eine kompakte Resolvente, die der gleichen Summierbarkeitsklasse angehört wie die Resolvente des Laplace-Operators mit homogenen Neumannschen Randbedingungen. H besitzt ein in H^1 vollständiges System von Wurzelvektoren und hat im wesentlichen dieselbe Spektral-Asymptotik wie der Operator ohne Randanteil. Obwohl die von uns betrachteten nicht-selbstadjungierten Hamiltonoperatoren im Kohn-Sham-System generisch nur einfache Eigenelemente besitzen, ist eine allgemeingültige Definition der Teilchen- und Stromdichte noch erforderlich, genauso wie die Klärung der Besetzungsstatistik. Weiterhin werden wir uns mit der Wechselwirkung des van Roosbroeck-Systems mit dem Kohn-Sham-System in Blick auf a priori-Abschätzungen, Existenz und Einzigkeit für das selbstkonsistent gekoppelte Gesamtsystem befassen.

Literatur

1. P. ELLRODT, *Simulation of InAlAs/InGaAs dual gate HFET using a 2D and a Q2D model*, in: Ninth III-V Semiconductor Device Simulation Workshop, Eindhoven University of Technology, May 9 – 10, 1996, Eindhoven University of Technology, May 1996.

2. 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.

3. H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, *Matching the phenomenological and the quantum mechanical description of semiconductor devices*. Workshop „Phase Transitions: Microscopic and Mesoscopic Theory“, WIAS Berlin, 2–7 June , 1997.

4. R. OLKIEWICZ, *Some mathematical problems related to classical-quantum interaction*, Rev. Math. Phys., **9** (1997), pp. 719–747.

Phasenfeldgleichungen und Stefan-Probleme

Bearbeiter: O. Klein, J. Sprekels

Kooperation: P. Colli (Universität Pavia), C. Verdi (Universität Mailand)

Förderung: ESF/FBP Research Fellowship

Die Modellierung von diffusiven Phasenübergängen, wie z. B. des Kristallwachstums, mit Phasenfeldgleichungen vom Penrose–Fife-Typ führt zu Systemen der Form

$$\begin{aligned} \partial_t \left(c_0\theta + \lambda(\chi)\right) - \Delta\alpha(\theta) &= g, \\ \eta\chi_t - \varepsilon\Delta\chi + \beta(\chi) - \sigma(\chi) &\ni -\frac{\lambda'(\chi)}{\theta}, \end{aligned} \tag{1}$$

wobei β ein maximal monotoner Graph ist. Dieses System beschreibt die Entwicklung der absoluten Temperatur θ und des Ordungsparameters χ. Das Projekt ist eine Fortführung aus den Vorjahren.

a) Für dieses System werden Semidiskretisierungen in der Zeit betrachtet. Hierbei ist η eine vom Ort abhängige positive Funktion, und $\alpha(\theta) = -\kappa/\theta$, d. h. der Wärmefluß ist proportional zum Gradienten der inversen Temperatur.
Im Berichtszeitraum sind die Arbeiten an der Dissertation [5] abgeschlossen worden, in der eine Semidiskretisierung von (1) für lineares λ und σ betrachtet wird. In dieser Arbeit wird Konvergenz gegen die Lösung des Penrose–Fife-Systems, verschiedener Stefan-Probleme (vgl. auch [4]), und eines degenerierten Penrose–Fife-Systems, bei dem η auf einer Menge mit positivem Maß verschwindet, bewiesen.
Für allgemeineres λ und ϕ wird in [6] eine Semidiskretisierung in der Zeit vorgestellt und Konvergenz hergeleitet. Dabei gelang es, durch Verwendung von Resultaten aus [7] zu zeigen, daß der Fehler der zeitlichen Diskretisierung linear in der Zeitschrittweite h ist, während in [4,5] nur eine Fehlerabschätzung der Ordnung $\sqrt{h}$ hergeleitet wurde.

b) In [1] wurde die Existenz und Eindeutigkeit einer globalen eindeutigen Lösung für das Penrose–Fife-System in Fällen nachgewiesen, in denen α nicht von der Form $\alpha(\theta) = -\kappa/\theta$ ist, wobei es allerdings weiterhin notwendig war, für α eine Singularität in 0 vorauszusetzen. Wenn der Wärmefluß dem Fourier'schen Gesetz entspricht, ist $\alpha(\theta) = \kappa\theta$ und somit dieses Resultat nicht anwendbar. Für das Penrose–Fife-System mit Fourier'schem Wärmefluß konnte in [3] erstmalig Existenz und Eindeutigkeit einer globalen Lösung bewiesen werden; dieses Resultat ist auf den Fall $\varepsilon = 0$ beschränkt, d. h. wenn keine Grenzflächenenergie berücksichtigt wird.
Das Thema wurde im Rahmen des EU-Projektes „Phase Transition and Surface Tension“ bearbeitet.

Literatur

1. P. Colli, Ph. Laurençot, J. Sprekels, *Global solution to the Penrose–Fife phase-field model with special heat flux law,* erscheint in: Proceedings of the IUTAM-Conference in Paris, April 1997.

2. P. COLLI, J. SPREKELS, *Stefan problems and the Penrose–Fife phase field model,* Adv. Math. Sci. Appl., Vol. **7** (1997), pp. 911–934.

3. ——, *Global solution to the Penrose–Fife phase field model with zero interfacial energy and Fourier law,* erscheint in: Adv. Math. Sci. Appl.

4. O. KLEIN, *A semidiscrete scheme for a Penrose–Fife system and some Stefan problems in* $\mathbb{R}^3$*,* Adv. Math. Sci. Appl., Vol. **7** (1997), pp. 491–523.

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

6. ——, *Existence and approximation results for Penrose–Fife systems,* in Vorbereitung.

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

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

Hysteresephänomene in Elastoplastizität und Phasenübergängen

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

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

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 (Thermo-) Elastoplastizität und der Phasenübergänge.

a) In [1] wurden Stetigkeitseigenschaften der konstitutiven Operatoren des isothermen nichtlinearen *Chaboche-Verfestigungsmodelles* betrachtet, wobei der Spannungstensor σ aus der plastischen Komponente σ^p und der Verfestigungskomponente $\sigma^b = \sum_{k\in I} \sigma_k^b$ besteht, die mit der plastischen Dehnung ε^p durch die Differentialgleichung

$$\dot{\sigma}_k^b = \gamma(k) \left(R(k)\, \dot{\varepsilon}^p - \sigma_k^b \, |\dot{\varepsilon}^p| \right) \tag{1}$$

mit Konstanten $\gamma(k), R(k)$ verbunden ist, und wobei ε^p das von Misessche Kriterium erfüllt. Das Materialgesetz wird implizit durch eine Differentialgleichung ausgedrückt, die den mehrdimensionalen Spiel-Operator enthält. Neu bewiesene Eigenschaften des Spiel-Operators ermöglichen den Nachweis, daß totale Spannung und totale Dehnung stetig bezüglich der gleichmäßigen Konvergenz im Raum der stetigen Funktionen mit beschränkter Variation voneienander abhängen.

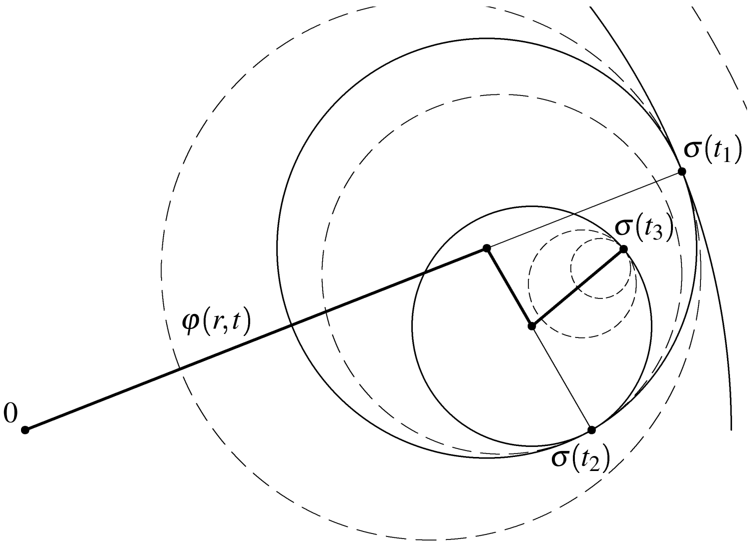


Abb. 1: Fließflächen bei einer stückweise linearen Bewegung $t_1 \to t_2 \to t_3$ von σ.

Das *Mróz-Modell* unterscheidet sich von anderen Plastizitätsmodellen durch die Eigenschaft, daß individuelle bewegliche Fließflächen mit verschiedenen Radien immer ineinander eingeschlossen bleiben. Für den kontinuierlichen Mrózschen Spannungs-Dehnungs-Operator, der Fließflächen aller Radien enthält (siehe Abb. 1, wo $\varphi(r,t)$ die Mittelpunktskurve bezeichnet), wurden in [2] explizite Formeln für den inversen Operator zusammen mit entsprechenden Energie-Ungleichungen abgeleitet. Ein Beispiel für die Mehrdeutigkeit der Lösungen einer

Anfangswertaufgabe für eine einfache Differentialgleichung mit dem Mróz-Operator zeigt u. a., daß man keine Lipschitz-Stetigkeit des Operators erwarten kann.

b) Wesentlich schwieriger als der isotherme Fall ist der Fall, in dem die Temperatur als zusätzliche Zustandsvariable auftritt, da nicht klar ist, wie dann *freie Energie, innere Energie* und *Entropie* definiert und der Erste und Zweite Hauptsatz der Thermodynamik angewendet werden können.

In [5] war es erstmalig gelungen, für temperaturabhängige PRANDTL–ISHLINSKII-Operatoren der Form

$$\sigma = \mathcal{P}[\varepsilon] = \int_0^\infty \varphi(r,\theta)\mathfrak{s}_r[\varepsilon]\,dr\,, \tag{2}$$

($\sigma =$ Spannung, $\varepsilon =$ Verzerrung, $\theta =$ absolute Temperatur, $\varphi =$ Dichtefunktion, $\mathfrak{s}_r =$ elastisch-plastisches Element zur Schwelle $r \geq 0$) eine thermodynamisch konsistente Theorie der Thermoplastoelastizität zu entwickeln. Die grundlegende Idee beruht darauf, die in [3] ausgeführte Theorie der *Hysteresis-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.

Dieses Konzept wurde in der Arbeit [6] für eindimensionale thermoelastoplastische Materialien mit Viskosität erfolgreich umgesetzt. Man erhält dabei Zustandsgleichungen der Form (Massedichte $\rho = 1$ gesetzt)

$$u_{tt} - \left(\gamma(u_x)\right)_x - \sigma_x - \mu\, u_{xxt} + \beta\, \theta_x = f(\theta,x,t)\,, \tag{3}$$

$$\left(C_V\,\theta + \mathcal{V}[u_x,\theta]\right)_t - \kappa\,\theta_{xx} = \sigma\, u_{xt} + \mu\, u_{xt}^2 - \beta\,\theta\, u_{xt} + g(\theta,x,t)\,, \tag{4}$$

mit Konstanten $\mu > 0, C_V > 0, \beta$, wobei σ durch (2) und $\mathcal{V}$ durch

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

gegeben sind. Es gelang in [6], Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung (u,θ) für eine Anfangsrandwertaufgabe für dieses System zu zeigen. Die Asymptotik des Systems für $t \to \infty$ wurde in [10] untersucht.

c) Hysteresephänomene sind häufig Begleiterscheinungen von *Phasenübergängen*. Letztere werden gern durch *Phasenfeldgleichungen* (z. B. Caginalp-Modell, Penrose–Fife-Modell, siehe [3]) mathematisch modelliert, wobei die Hysteresis als Konsequenz einer Nicht-Konvexität der freien Energie gedeutet wird.

Im Berichtszeitraum wurde zu diesem Problemkomplex ein völlig neuer Zugang entwickelt: Anstatt eine nichtkonvexe freie Energie anzunehmen, wurde die Hysterese nunmehr in der Form von Hysterese-Operatoren *direkt* in die Phasenfeldgleichungen aufgenommen. Man erhält dabei Systeme der Form

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

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

wobei $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{F}_1$ geeignete Hysterese-Operatoren sind. Motiviert wurde dieser Zugang dadurch, daß sich Modellierungen mit Hilfe von Variationsungleichungen, wie z. B. das klassische *relaxierte Stefan-Problem*, auf die Form (6), (7) transformieren lassen. Dabei sorgt die vorausgesetzte *Dissipativität* der Hysterese-Operatoren $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ (vgl. auch [3]) dafür, daß der Zweite Hauptsatz der Thermodynamik in Form der Entropieungleichung erfüllt ist.

Es gelang im Berichtszeitraum in den Arbeiten [7, 9], die eindeutige Lösbarkeit einer Anfangsrandwertaufgabe für das System (6), (7) zu beweisen. Ein analoger Beweis gelang in [8] für das (6), (7) entsprechende Modell vom Penrose–Fife-Typ.

Der im Berichtszeitraum entwickelte neue Ansatz zur Behandlung von Phasenfeldsystemen ist sehr erfolgversprechend und soll im Jahre 1998 verstärkt untersucht werden.

Literatur

1. M. Brokate, P. Krejčí, *Maximum norm wellposedness of nonlinear kinematic hardening models*, Cont. Mech. Thermodyn., **9** (1997), pp. 365–380.

2. M. Brokate, P. Krejčí, D. Rachinskii, *Some analytical properties of the multidimensional continuous Mróz model of plasticity*, WIAS-Preprint No. 391 (1998), erscheint in: Control & Cybernetics.

3. M. Brokate, J. Sprekels, *Hysteresis and Phase Transitions*, Appl. Math. Sci., Vol. **121**, Springer-Verlag, New York 1996.

4. P. Krejčí, *Hysteresis, Convexity and Dissipation in Hyperbolic Equations*, Gakuto Int. Series, Vol. **8**, Gakkōtosho, Tokyo 1996.

5. P. Krejčí, J. Sprekels, *On a system of nonlinear PDEs with temperature-dependent hysteresis in one-dimensional thermoplasticity*, J. Math. Anal. Appl., **209** (1997), pp. 25–46.

6. P. Krejčí, J. Sprekels, *Temperature-dependent hysteresis in one-dimensional thermovisco-elastoplasticity*, WIAS-Preprint No. 344 (1997), erscheint in: Appl. Math.

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

8. P. Krejčí, J. Sprekels, *Hysteresis operators in phase-field models of Penrose–Fife type*, WIAS-Preprint No. 390 (1998), erscheint in: Appl. Math.

9. P. Krejčí, J. Sprekels, *Hysteresis operators in phase-field models*, erscheint in: Progress in Nonlinear Partial Differential Equations and their Applications, Birkhäuser Verlag, Basel 1998.

10. P. Krejčí, J. Sprekels, *Weak stabilization of solutions to PDEs with hysteresis in thermovisco-elastoplasticity*, erscheint in: Proceedings of EQUADIFF 9, 1997.

4.2 Forschungsgruppe Dynamische Systeme und Steuerungstheorie

4.2.1 Zusammenfassung

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

- Modellierung, Analysis und Numerik von Prozessen in optischen Kommunikationssystemen
- Optimale Steuerung diskontinuierlicher Destillationsprozesse
- Intermittierende Dynamik im sphärischen Bénard-Problem
- Stabilisierung von kontinuierlichen und diskreten Steuerungssystemen mittels Zustandsrückführung
- Stabilitätswechsel in Mehrskalensystemen.

Die Forschungen wurden in interdisziplinärer und internationaler Kooperation durchgeführt.
Im Berichtszeitraum wurde ein interdisziplinäres Seminar zur Dynamik von Mehrsektionslasern eingerichtet.

Rückkopplungssteuerungen in kontinuierlichen und diskreten Kontrollsystemen

Bearbeiter: A. Akutowicz, W. Müller†, K. R. Schneider

Teilprojekt: Optimale periodische Feedbacksteuerungen

Wir betrachten ein n-dimensionales lineares Steuersystem mit T-periodischen Koeffizienten und einem skalaren Steuereingang u

$$\frac{dx}{dt} = A(t)x + B(t)u. \tag{1}$$

Wir nehmen an, daß (1) auf dem Intervall $[0,T]$ kontrollierbar ist und daß die Systemmatrizen analytisch von t abhängen. Es sei $\Phi_K(t,t_0)$ eine Fundamentalmatrix des zu einer gegebenen T-periodischen Rückkopplungssteuerung $u = K^t(t)x$ gehörenden „closed-loop systems“

$$\frac{dx}{dt} = (A(t) + B(t)K^t(t))x. \tag{2}$$

Die Matrix $\Phi_K(T,0)$ wird als Monodromiematrix bezeichnet. Wir untersuchen das Problem, ob zu einer beliebig vorgegebenen reellen $n \times n$-Matrix M eine T-periodische Rückkopplungssteuerung $u = K^t(t)x$ existiert, so daß die Monodromiematrix in der Form

$$\Phi_K(T,0) = exp(MT) \tag{3}$$

dargestellt werden kann. Diese Fragestellung stellt eine Verallgemeinerung des bekannten Pole-Placement-Problems für lineare autonome Kontrollsysteme dar.

Das grundlegende Ergebnis der Untersuchungen besteht im Nachweis der Existenz einer solchen Rückkopplungssteuerung und in ihrer Konstruktion. Die periodische Rückkopplungssteuerung wird unter Verwendung eines optimalen bilinearen Kontrollproblems gefunden. Bei der Lösung dieses Problems treten zwei Gleichungen auf, die als Analogon zur Riccati-Gleichung für das lineare Optimalsteuerproblem mit quadratischem Kostenfunktional (L-Q-Problem) betrachtet werden können. Solche Gleichungen entstehen auf natürliche Weise bei der Untersuchung affiner Kontrollsysteme, die durch linksinvariante oder rechtsinvariante Vektor-Felder auf Lie-Gruppen erzeugt werden.

Im Vergleich zur traditionellen Methode für die Lösung von L-Q-Problemen, die zwar stabilisierend wirkt, aber keine Polvorgabe gestattet, können bei der von uns verwendeten Methode die Pole vorgegeben werden. Es ist bemerkenswert, daß mit unserer Untersuchungsmethode bewiesen werden kann, daß für single-input-single-output-Kontrollsysteme,

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= A(t)x + B(t)u, \\ y &= C(t)x \end{aligned}$$

die kontrollierbar und beobachtbar sind, zu beliebig vorgegebener Matrix M eine lineare periodische Rückkopplung existiert, so daß für die Monodromiematrix $\Phi_K(T,0)$ die Relation (3) gilt.

Literatur

1. A. AKUTOWICZ, *Periodic feedback for linear systems and optimal control of bilinear systems*, Dissertation, eingereicht im Oktober 1997 an der Humboldt-Universität zu Berlin.

Teilprojekt: Stabilisierung diskreter Kontrollsysteme mittels nichtlinearer Rückkopplungen

Es werden diskrete Kontrollsysteme der Gestalt

$$x(k+1) = f(x(k)) + Bu(k), \; k = 0, 1, 2... \tag{1}$$

betrachtet, wobei f eine glatte Funktion ist, die der Bedingung $f(0) = 0$ genügt. Unter der Voraussetzung, daß die Linearisierung von (1) nichtkontrollierbare Moden enthält, d. h., sie besitzt die Gestalt

$$\begin{aligned} y\,(k+1) &= A_1\, y(k) \\ z\,(k+1) &= A_2\, z(k) + \tilde{B}v(k), \end{aligned}$$

werden Bedingungen abgeleitet, unter denen eine stabilisierende quadratische Rückkopplungssteuerung $u(k) = \tilde{u}(x(k)), \; \tilde{u}(0) = 0$ existiert. Die grundlegende Idee zur Lösung dieser Aufgabe besteht in der Anwendung der Theorie der Zentrumsmannigfaltigkeiten für diskrete dynamische Systeme und in der Konstruktion von Ljapunov-Funktionen für das reduzierte System. Zu diesem Zweck werden sowohl für die Rückkopplung als auch für die Zentrumsmannigfaltigkeit Ansätze mit unbestimmtem Koeffizienten verwendet, um letztlich Bedingungen für die Entwicklungskoeffizienten von f in Punkt $x = 0$ abzuleiten, die eine stabilisierende quadratische Rückkopplung gestatten. Im Fall, daß das reduzierte System eindimensional ist, lassen sich die entsprechenden Koeffizientenkriterien relativ einfach herleiten und auf zweidimensionale kontinuierliche Systeme übertragen. Im Fall eines zweidimensionalen reduzierten Systems erweist sich der Übergang zur komplexen Darstellungsweise unter Einschließung der zugehörigen Normalformtheorie als zweckmäßig.
Die erhaltenen Resultate können verwendet werden, um für parameterabhängige Kontrollsysteme

$$x(k+1) = f(x(k), \lambda) + Bu(k),$$

deren zugehöriges unkontrolliertes System

$$x(k+1) = f(x(k), \lambda)$$

für $\lambda = \lambda_0$ einen Stabilitätswechsel seines Fixpunktes $x = 0$ aufweist, eine Rückkopplungssteuerung zu konstruieren, so daß eine abzweigende neue Lösung asymptotisch stabil ist. Die abgeleiteten Resultate für diskrete Kontrollsysteme beinhalten entsprechende Aussagen für kontinuierliche Steuersysteme.

Literatur

1. W. Müller, K. R. Schneider, *Feedback stabilization of nonlinear discrete-time systems*, erscheint in: Journal of Difference Equations and Applications, 1998.

Modellierung, Analysis und Numerik von Prozessen in optischen Kommunikationssystemen

Bearbeiter: U. Bandelow, B. Sandstede, D. Peterhof, K. R. Schneider

Kooperation: T. Kapitula (University of New Mexico), L. Recke (Institut für Mathematik der Humboldt-Universität zu Berlin), H.-J. Wünsche (Institut für Physik der Humboldt-Universität zu Berlin), B. Sartorius (Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin), V. V. Strygin (Staatliche Universität Voronesh)

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

Teilprojekt: Modellierung, Analysis und Numerik von Mehrsektions-DFB-Halbleiterlasern

Gegenstand des Projekts sind analytische und numerische Untersuchungen mathematischer Modelle (hyperbolische Systeme partieller Differentialgleichungen, die mit gewöhnlichen Differentialgleichungen gekoppelt sind), die das dynamische Verhalten von Mehrsektions-DFB-Halbleiterlasern beschreiben.
Im Berichtszeitraum wurde die betrachtete Modellklasse in folgende Richtungen ausgebaut:
– Einbeziehung externer Signale,
– Berücksichtigung weiterer Effekte (Multimodeneffekte, Lochbrennen).

Folgende Themen wurden bearbeitet:

Selbstpulsationen. Mathematisch gesehen handelt es sich hierbei um modulierte Wellenlösungen, die durch Hopf-Bifurkationen aus rotierenden Wellenlösungen entstehen. Technisch werden diese periodischen Zustände als Signale genutzt. Die Modellierung setzt auf der Ebene partieller Differentialgleichungen an und wird durch die Ebene geeigneter Approximationen mit Moden ergänzt. Vergleiche zwischen experimentellen und numerischen Ergebnissen, die von den Kooperationspartnern angestellt wurden, ergaben eine sehr gute Übereinstimmung [1]. Gegenwärtig werden die wesentlichen Einflußparameter gemeinsam mit den Praxispartnern identifiziert, gleichzeitig wird an einer modellgestützten Optimierung der Bauelemente gearbeitet.

TDMLAB. Für die Anwendungsrechnungen auf der Ebene der diskretisierten partiellen Differentialgleichungen wurde 1997 am WIAS in Zusammenarbeit mit H.-J. Wünsche (HU Berlin) das Softwarepaket TDMLAB entwickelt. Als numerischer Kern stand dabei das TIME DOMAIN MODELL zur Verfügung, das von D. D. Marcenac an der Universität von Cambridge entwickelt wurde. TDMLAB ermöglicht u. a. die realistische Einbeziehung von Multimoden- und sogenannten Lochbrenneffekten, die in den realen Bauelementen simultan auftreten. Gegenwärtig wird an einer Methode gearbeitet, die die Effekte der Materialdispersion in das Zeitbereichsmodell aufnimmt.
TDMLAB wurde auf Rechnern des WIAS zur Verfügung gestellt und versetzt die Praxispartner in die Lage, selbständige Anwendungs- und Optimierungsrechnungen durchzuführen.

Approximationen mit zeitabhängigen Moden. Mit dieser Technik werden die partiellen Differentialgleichungen auf ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen reduziert, deren rechte Seiten allerdings implizit durch Sturm-Liouvillesche Randwertprobleme definiert sind. Dabei wird ausgenutzt, 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.

Spektraleigenschaften der gekoppelten Wellengleichungen. Wesentliche Eigenschaften eines Zwei-Sektions-DFB-Halbleiterlasers können durch ein Randwertproblem für ein lineares hyperbolisches System von partiellen Differentialgleichungen mit stückweise stetigen Koeffizienten beschrieben werden. In [4] wird gezeigt, daß der dadurch definierte Operator H eine C_0-Gruppe von beschränkten Operatoren in einem geeigneten Hilbertraum U erzeugt, wobei alle bis auf endlich viele Eigenwerte von H einfach sind und negativen Realteil haben, und daß eine Basis in U existiert, die aus Wurzelfunktionen von H besteht, wobei alle bis auf endlich viele dieser Wurzelfunktionen Eigenfunktionen darstellen.

Taktrückgewinnung. Aus mathematischer Sicht geht es hierbei um die Synchronisation der modulierten Wellenlösung unter Einwirkung einer externen, die Symmetrie und die Autonomie brechenden Störung vom „Typ einer modulierten Welle“. Wesentliche Charakteristika dieses Synchronisationsphänomens (Locking-Bereiche im Raum der Laser- und Signalparameter, Zahl und Stabilität der synchronisierten Lösungen) wurden analytisch beschrieben. Die entsprechenden Algorithmen wurden mit dem Softwarepaket AUTO numerisch umgesetzt. Auf dieser Grundlage wurden die Locking-Bereiche eines selbstpulsierenden 3-Sektions-DFB-Lasers in Abhängigkeit von Parametern des externen Signals bestimmt (s. Abbildung 1) [2]. Die oben genannten Arbeiten sind auf periodisch modulierte Signale anwendbar und garantieren die Synchronisation des Lasers. Das reale Datensignal entspricht einer beliebigen Bitsequenz und ist daher aperiodisch moduliert. Es wurden analytische Kriterien entwickelt, die die Synchronisation des Lasers unter derartigen aperiodischen Signalen sicherstellen [3].

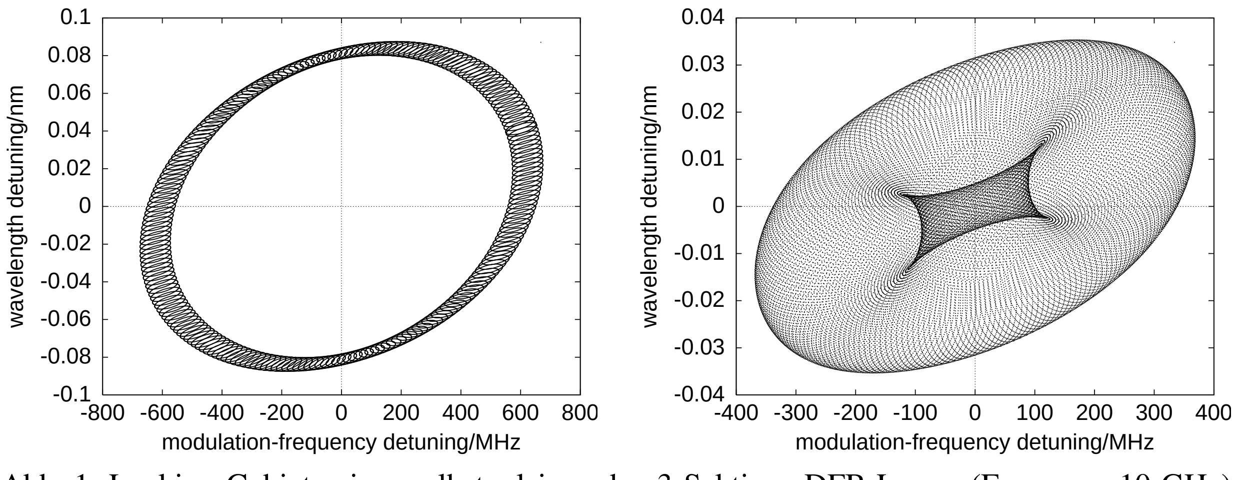


Abb. 1: Locking-Gebiete eines selbstpulsierenden 3-Sektions-DFB-Lasers (Frequenz: 10 GHz) für unterschiedlich modulierte externe Signale. Links: 10%, Rechts: 100% Modulationstiefe.

Zukünftig soll ein analoger Algorithmus für das sogenannte „nichtresonante“ Locking entwickelt werden, da sich diese Technik in der Praxis durchzusetzen scheint. Bei diesem Verfahren ist das Wellenlängendetuning praktisch ohne Relevanz.

Literatur

1. U. Bandelow, H.-J. Wünsche, B. Sartorius, M. Möhrle, *Dispersive self-Q-switching in DFB lasers - Theory versus experiment*, IEEE Journal of Sel. Top. in Quantum Electronics, **3** (1997), pp. 270 - 278.

2. U. Bandelow, L. Recke, B. Sandstede, *Frequency regions for forced locking of self-pulsating multi-section DFB lasers*, erscheint 1998 in: Optics Communications.

3. D. Peterhof, B. Sandstede, *All-optical clock recovery using multi-section distributed-feedback lasers*, WIAS-Preprint No. 356 (1997).

4. L. Recke, K. R. Schneider, V. V. Strygin, *Spectral properties of coupled wave equations*, WIAS-Preprint No. 362 (1997).

Teilprojekt: Stabilität von Pulsen in optischen Fasern

Die raum-zeitliche Entwicklung von Signalen in einer idealen optischen Faser wird durch die nichtlineare Schrödinger-Gleichung (NLS)

$$iu_x + u_{tt} - \omega u + |u|^2 u = 0$$

mit $\omega > 0$ und $x \in R$ beschrieben. Die NLS besitzt stabile lokalisierte Pulse. Realistische optische Fasern werden durch die komplexe Ginzburg-Landau-Gleichung (CGL)

$$iu_x + u_{tt} - \omega u + |u|^2 u = \varepsilon(d_1 u_{tt} + d_2 u + d_3 |u|^2 u + d_4 |u|^4 u)$$

beschrieben, die zusätzlich lineare Dämpfung, nichtlineare Energiezufuhr und Saturierung berücksichtigt. Spektrale Filter und Verstärker werden durch den zusätzlichen Diffusionsterm modelliert.
Es war ein bisher ungelöstes Problem, welche Bedingungen an die Koeffizienten d_1, d_2, d_3 und d_4 die Existenz eines stabilen Pulses der (CGL) für kleines $\varepsilon > 0$ garantieren. Bisher gab es nur numerische Untersuchungen zu dieser Fragestellung.
Die Schwierigkeit besteht darin, daß das essentielle Spektrum der Linearisierung der NLS in einem Puls vollständig in der imaginären Achse enthalten ist. Wenn die unbeschränkte CGL-Störung hinzugenommen wird, kann zwar das essentielle Spektrum des gestörten Problems leicht berechnet werden; es ist aber vollkommen unklar, ob und wie viele isolierte Eigenwerte aus dem essentiellen Spektrum herausverzweigen können. Derartige zusätzliche Eigenwerte können den Puls destabilisieren. Dies ist ein Problem, das ganz allgemein bei dissipativen Störungen von konservativen (insbesondere also integrablen) PDEs auftritt.
In [1] haben wir dieses Problem durch eine Erweiterung des Definitionsbereiches der Evans-Funktion über das essentielle Spektrum hinweg gelöst. Wir konnten zugleich die zu der NLS gehörende Evans-Funktion explizit berechnen. Damit waren wir in der Lage, die Existenz von stabilen Pulsen für CGL unter gewissen Bedingungen an die Parameter zu beweisen.
Die Methode ist auf allgemeine (dissipativ) gestörte konservative PDEs anwendbar. Neben der CGL haben wir die parametrisch gestörte NLS und weitere für Anwendungen interessante Störungen der NLS untersucht.

Literatur

1. T. KAPITULA, B. SANDSTEDE, *Stability of bright solitary wave-solutions to nonlinear Schrödinger equations*, erscheint in: Phys. D.

Optimale Steuerung diskontinuierlicher Destillationsprozesse

Bearbeiter: I. Bremer, M. Hanke, K. R. Schneider

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

Die ökonomische Bedeutung der Batchdestillation, ihre mathematische Modellierung sowie das Konzept zu ihrer optimalen Steuerung wurden in den Forschungsberichten der beiden letzten Jahre dargestellt. Im Mittelpunkt der Untersuchungen im Berichtszeitraum standen folgende Fragen

1. Verbesserung der Schrittweitensteuerung,
2. Implementierung der internen Differentiation,
3. Verwendung stochastischer Verfahren (Simulated Annealing) zur Ermittlung zulässiger Startlösungen für die Optimierung.

Im Berichtszeitraum wurde eine Variante der Black-Box-Optimierung implementiert und an die BASF AG übergeben. Sie basiert auf der Verwendung eines lokal konvergenten Optimierungsverfahrens (SQP). Bei ihrem Einsatz treten folgende Probleme auf:

(i) Die Berechnung zulässiger Steuerungen, d. h. Steuerungen, die die Einhaltung aller Nebenbedingungen (insbesondere auch Reinheits- und Sicherheitsbedingungen) gewährleisten, kann sehr aufwendig sein.

(ii) Die Verwendung numerisch berechneter Gradienten wirkt sich insbesondere in der Umgebung des zu berechnenden Optimums negativ aus.

(iii) Die berechneten Optima sind lokal.

Um die in (ii) genannten Nachteile zu beseitigen, wurde der Simulator der BASF um die Möglichkeit zur Berechnung der analytischen Gradienten mittels interner Differentiation ergänzt. Nach übereinstimmender Ansicht der Projektpartner stellt eine erfolgreiche Lösung des in (i) beschriebenen Problems einen wesentlichen Schritt zur Lösung des Gesamtproblems dar. Als alternative Möglichkeit zur Behandlung dieses Problems, aber auch zur Überwindung der in (ii) und (iii) genannten Probleme, wurden Untersuchungen zu stochastischen Optimierungsmethoden vorgenommen, die auf der Methode des „Simulierten Annealing“ beruhen.

Simulated Annealing. Hierzu müssen übliche Simulatoren für Batch-Prozesse nicht verändert werden, da sie nur als Black-Box-Programm zur Berechnung von Kostenfunktionalen benutzt werden. Die Erfahrungen mit Beispielen aus der Literatur und realen Modellen sowie mit verschiedenen Simulatoren zeigen, daß das Problem (i) damit zufriedenstellend gelöst werden kann. Da das Verfahren ableitungsfrei ist, ist Problem (ii) nicht relevant. Bei geeigneten Annealing-Strategien konvergiert das Verfahren (in Wahrscheinlichkeit) gegen ein globales Minimum. Allerdings ist die Konvergenz recht langsam. Daher soll die geeignete Kopplung des stochastischen Verfahrens mit überlinear konvergenten Verfahren weiter untersucht werden.

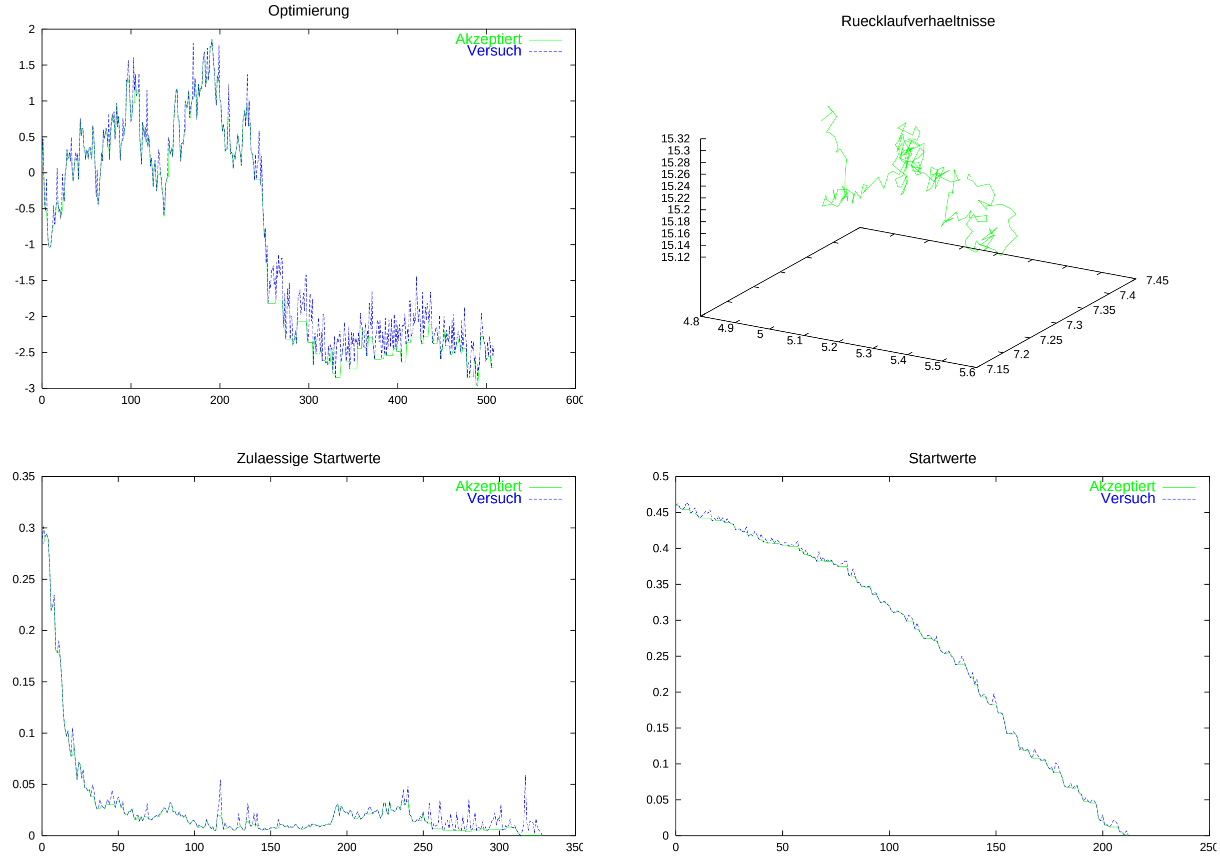


Abb. 1: „Simulated annealing“ für das Beispiel aus [1] mit vereinfachter Steuerstrategie. Oben: Zielfunktional und die dazugehörige Variation der Rücklaufverhältnisse. Unten: Ermittlung zulässiger Anfangswerte ausgehend von „guten“und „schlechten“ Startwerten.

Interne Differentiation.

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

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

Im wesentlichen wird das dem Modell zugrundeliegende DAE-System (1) um die entsprechenden linearisierten Gleichungssysteme (2) ergänzt und synchron zum Ausgangssystem mitbehandelt, so daß sich (abgesehen von Rundungsfehlern) der exakte analytische Gradient für die Ausdrücke, die zur Berechnung des Zielfunktionals und der Nebenbedingungen nötig sind, ergibt (siehe JFB 96[1]). Der Effekt zeigt sich zum einen im verringerten CPU-Zeitaufwand für die Berechnung von Funktional und Gradient, zum anderen in einem wesentlich glatteren Verlauf und besserer Konvergenz des SQP-Verfahrens (siehe Tabelle 1).

[1] http://www.wias-berlin.de/Publications/Annual_Reports/fb96/node38.html

Gradient	Anzahl Simulationsl.	Anz. Iter. f. zul. Startwerte	Anz. Iter. f. Optimierung	berechnetes Optimum	CPU-Zeit
analytisch	10	3	6	2.6237	243.54 s
numerisch	33 + 20*6	3	17	2.5961	1430.01 s

Tab. 1: Gegenüberstellung des Rechenzeitaufwandes für die Optimierung des Anwenderbeispiels „m402" mit numerischer bzw. analytischer Differentiation.

Bei der Verwendung der internen Differentiation sind folgende technische Besonderheiten zu beachten:

- Zeitpunkte können nicht direkt als Parameter angegeben werden, sondern nur über den Umweg der Zeittransformation des jeweiligen Intervalls.
- Um ein konvergentes Verfahren zu erhalten, muß in der Nähe des Optimums die Zeitdiskretisierung im Simulator konstant bleiben.
- Zustandsabhängige Definitionen der Länge von Zeitintervallen für Zielfunktional und Nebenbedingungen müssen jeweils umformuliert werden als ein zusätzlicher Zeitparameter und eine zusätzliche Nebenbedingung für die Optimierung, die den zu erreichenden Zustand beschreibt.

Literatur

1. P. Li, G. Wozny, *Dynamische Optimierung großer chemischer Prozesse mit Kollokationsverfahren am Beispiel Batch-Destillation*, Automatisierungstechnik, **45** (1997) 3, pp. 136–149.
2. Vl. Kvasnička, J. Pospichal, *Simulated Annealing*, Matcdy, **34** (1996), pp. 7–49.
3. H.E. Romeijin, R.L. Smith, *Simulated Annealing for constrained global optimization*, J. Glob. Optim., **5** (1994), pp. 101–126.

Intermittierende Dynamik

Bearbeiter: F. Guyard, R. Lauterbach

Kooperation: P. Chossat (Institut Non Linéaire de Nice, Nizza), E. Bänsch (Universität Tübingen)

Förderung: DFG: Schwerpunktprogramm „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme", DAAD: PROCOPE

In einer Arbeit der Stuttgarter Physiker Friedrich und Haken [2] wurde intermittierende Dynamik im sphärischen Bénard-Problem numerisch festgestellt. In ergänzenden Untersuchungen [1] zu einer früheren Arbeit wurde ein ähnliches Verhalten analytisch nachgewiesen.

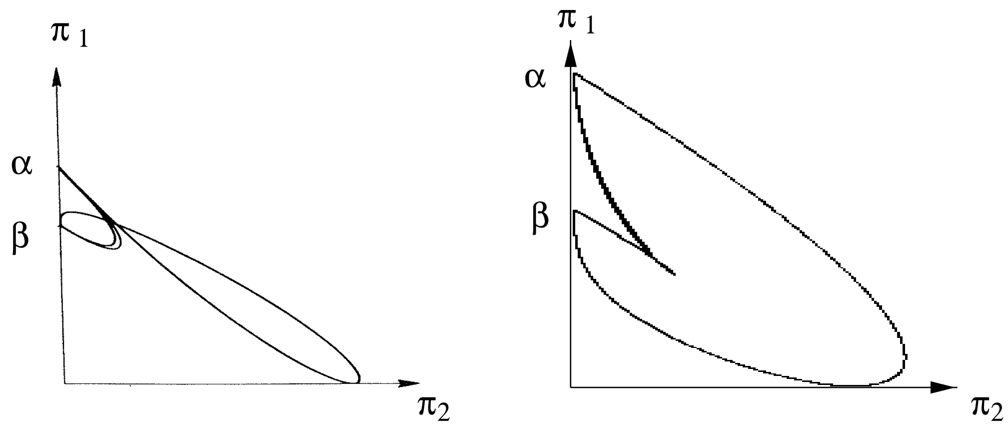


Abb. 1: Links: Bild (17) aus dem Artikel von Friedrich & Haken [2] (Abgedruckt mit der freundlichen Erlaubnis der *American Physical Society* und der Autoren). Rechts: eine typische Trajektorie in der Nähe des verallgemeinertes heteroklinen Zyklus. Hier sind die Parameter und Anfangswerte ungleich. Trotzdem wird gleichartiges dynamisches Verhalten beobachtet.

Insbesondere konnte gezeigt werden [1], daß dieses Verhalten bei langsamer Rotation erhalten bleibt. Damit wurde zum ersten Mal ein analytischer Zugang zum Problem der Polwechsel des Erdmagnetfeldes bei langsamer Rotation entwickelt. Natürlich kann dies nur ein erster Schritt auf dem Weg zum Verständnis dieses Verhaltens sein.
Weitere Untersuchungen, die dazu dienen, unser sehr einfaches Modell näher an die Wirklichkeit heranzuführen, wurden begonnen:

1. Untersuchungen zur schnellen Rotation: neue Symmetrieeigenschaften, Bestimmung der Darstellungen, Reduktion der Gleichung.

2. Untersuchung von Effekten der Solidifikation am Kern als Energiequelle.

3. Direkte numerische Simulation der Navier-Stokes-Gleichungen zur Überprüfung der analytisch vorhergesagten Resultate. Dabei zeichnet sich ab, daß Eigenschaften des Gitters qualitative Eigenschaften der errechneten Lösungen bestimmen.

4. Beginn von Arbeiten, um dieses Phänomen in einfacheren Gleichungen aufzuzeigen. Diese einfacheren Gleichungen sind Systeme von Reaktions-Diffusionsgleichungen. Um diese Frage systematisch zu untersuchen, wird die numerische Näherung als diskretes, endlich-dimensionales System aufgefaßt. Orbital stabile Mannigfaltigkeiten von Lösungen treten als normal hyperbolische Mannigfaltigkeiten dieser endlich-dimensionalen Systeme auf. Damit wird die Theorie der erzwungenen Symmetriebrechung [3,4,5], die in den letzten Jahren entwickelt wurde, anwendbar. Diese sagt, abhängig von der Symmetrie der Störung (und des Symmetrietyps der zu berechnenden Lösung) ein dynamisches Verhalten voraus, das entweder aus Drift längs der Mannigfaltigkeit oder an einer endlichen Anzahl von hyperbolischen Gleichgewichten besteht. Während für den zweiten Fall leicht Gitter angegeben werden können, die dieses Verhalten zeigen, ist es unklar, ob der erste Fall überhaupt in einer numerischen Näherung eintreten kann. Unabhängig davon ist es wichtig herauszufinden, welche numerisch beobachteten Symmetrieeigenschaften tatsächlich auftreten.

   Alle genannten Aspekte bedürfen weiterer Untersuchungen.

Literatur

1. P. CHOSSAT, F. GUYARD, R. LAUTERBACH , *Generalized heteroclinic cycles in spherically invariant systems and their perturbations*, WIAS-Preprint No. 303, 1996 (revidierte Version Sept. 1997, erscheint in: J. Nonlinear Sci.).

2. R. FRIEDRICH, H. HAKEN, *Static, wavelike, and chaotic thermal convection in spherical geometries*, Phys. Rev. A, **34** (1986), pp. 2100-2120.

3. F. GUYARD, R. LAUTERBACH, *Forced symmetry breaking for periodic solutions*, Nonlinearity, **10** (1997), pp. 291-310.

4. R. LAUTERBACH, M. ROBERTS, *Heteroclinic cycles in dynamical systems with broken spherical symmetry*, J. Differential Equations, **100** (1992), pp. 428-448.

5. S. MAIER-PAAPE, R. LAUTERBACH, *Reaction diffusion systems on the 2-sphere and forced symmetry breaking*, WIAS-Preprint No. 173, 1995, erscheint in: Trans. Amer. Math. Soc.

Numerische Verfahren für singulär gestörte Eigenwertaufgaben bei Sturm-Liouville-Problemen

Bearbeiter: M. Hanke

Kooperation: N. B. Konyukhova (Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau), T. Zhanlov (Mongolische Nationaluniversität, Ulan Bator)

Ziel des Projektes ist die Entwicklung und Analyse numerischer Methoden zur Lösung von singulär gestörten Eigenwertaufgaben für Sturm-Liouville-Probleme mit unstetigen Potentialen, wie sie bei eindimensionalen Halbleitermodellen als Schrödingergleichung auftreten. Schwerpunktmäßig wurden drei Fragen untersucht:

F1. Durch welche Methoden können die aus der singulären Störung resultierenden Probleme abgefangen werden?

F2. Wie können stückweise stetige Potentiale geeignet in Algorithmen integriert werden?

F3. Wie kann unter Verwendung asymptotischer Techniken der numerische Aufwand reduziert werden?

Mit Frau Konyukhova wurde die Methode der Phasenfunktionen untersucht. Diese Methode liefert hochgenaue Resultate, ist aber auf den mehrdimensionalen Fall nicht erweiterbar. Im Rahmen des Gesamtprojektes „Schrödinger-Poisson-Systeme“ dient diese Methode als „Maßstab“ für die im weiteren zu entwickelnden Methoden.

Zu den genannten Fragestellungen wurden folgende Resultate erhalten:

Zu F1)

Es wurden geeignete Skalierungstechniken theoretisch und experimentell untersucht. Während in der Literatur durchgehend zumindest stetige Skalierungen begründet sind, haben wir – auch im Hinblick auf den zweiten Problemkreis – unstetige Skalierungen begründet und erfolgreich verwendet. Gegenüber früheren Ansätzen konnte dadurch die Schießgleichung soweit „geglättet“ werden, daß überlinear konvergente Verfahren zu ihrer Lösung eingesetzt werden können.

Zu F2)

Es wurden geeignete Transformationen entwickelt, die an den Unstetigkeitsstellen von Potential bzw. Skalierung eine glatte „Fortsetzung“ des Verfahrens ermöglichen.

Zu F3)

Durch den Charakter der singulären Störung kann das eigentlich endliche Intervall als rechtsseitig unbeschränkt betrachtet werden. Unter Verwendung asymptotischer Techniken kann die Randbedingung aus „unendlich“ auf einen endlichen Wert näherungsweise übertragen werden. Untersucht wurde, wie klein das resultierende Intervall gemacht werden kann, um vorgegebene Genauigkeiten einzuhalten. Analytische Fehlerabschätzungen für die Eigenwerte, Eigenfunktionen und Funktionale der Eigenfunktionen sind nicht bekannt.

Stabilitätswechsel in Mehrskalensystemen

Bearbeiter: K. R. Schneider

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

Die Dynamik schneller bimolekularer Reaktionen in einem homogenen Medium kann unter Verwendung singulär gestörter Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen beschrieben werden, deren assoziiertes autonomes System einen Stabilitätswechsel aufweist. Dieser Stabilitätswechsel führt im allgemeinen zu einem zeitlichen Sprungverhalten der Reaktionsrate. Die Modellierung der Dynamik schneller bimolekularer Reaktionen in einem inhomogenen Medium führt auf singulär gestörte Reaktions-Diffusions-Gleichungen, die gewissen Anfangs-Randwert-Problemen genügen. Das zugehörige stationäre Problem im räumlich eindimensionalen Fall führt auf ein Randwertproblem für ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen zweiter Ordnung mit unterschiedlichen Skalen, dessen zugehöriges assoziiertes System ebenfalls einen Stabilitätswechsel aufweist. Zur Behandlung einer Aufgabe muß die Standardtheorie zur Lösung von Randwertaufgaben für singulär gestörte Differentialgleichungen auf den Fall des Stabilitätswechsels erweitert werden. Diese Erweiterung geschieht unter Verwendung der asymptotischen Methode der Differentialungleichungen, die auf der Verwendung einer nichtglatten stabilen Lösung des ausgearteten Problems basiert. Damit konnte die Existenz einer Lösung des betrachteten Randwertproblems (no-flux Randbedingung) bewiesen und ihr asymptotisches Verhalten charakterisiert werden. Es ist bemerkenswert, daß sich das asymptotische Verhalten nahe des Stabilitätswechsels ändert. Dieses Phänomen kann zum Auftreten eines räumlichen Sprungverhaltens der Reaktionsrate im stationären Fall führen.

Literatur

1. V. F. BUTUZOV, N. N. NEFEDOV, K. R. SCHNEIDER, *Singularly perturbed boundary value problems in case of exchange of stabilities*, WIAS-Preprint No. 379 (1997).

2. N. N. NEFEDOV, K. R. SCHNEIDER, *Immediate exchange of stabilities in singular perturbed systems*, WIAS-Preprint No. 363 (1997).

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 Algebro-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 für unsere Kooperationspartner in der Industrie und in anderen Forschungseinrichtungen behandelt. Untersuchungen zur numerischen Analysis der Methoden werden vorgenommen. Die Arbeiten zur Entwicklung und Implementation von numerischen Verfahren für partielle Differentialgleichungen in Form einer modularen Toolbox und für spezielle Aufgabenstellungen der linearen Algebra sowie zu Fragen der Visualisierung von numerischen Simulationen und von Präsentationen, die von zentraler Bedeutung für das Institut sind, wurden konsequent weitergeführt.

Für die numerische Simulation von physikalisch-chemischen Prozessen in komplexen chemischen Produktionsanlagen wurde der Prototyp eines dynamischen Prozeßsimulators entwickelt und auf modernen Rechnerarchitekturen implementiert. Er hat sich bei der Simulation von chemischen Produktionsanlagen bewährt. Mit der Entwicklung eines eigenständigen Simulators für chemische Prozesse wurde begonnen. Es wurden Untersuchungen hinsichtlich eines neuartigen Simulationsansatzes für Gesamtanlagen, der auf der getrennten Simulation von Teilanlagen beruht, aufgenommen.

Die Arbeiten zur Simulation monolithisch integrierter Schaltungen mittels feldtheoretischer Methoden für die Mikrowellentechnik wurden fortgesetzt. Die Erweiterung der Modelle auf verlustbehaftete Medien ermöglicht eine differenziertere Berücksichtigung von Materialeigenschaften und die Einführung von PML-Randbedingungen (Perfectly Matched Layer) für offene Strukturen zur Absorption elektromagnetischer Wellen. Für die zugehörigen Aufgaben der linearen Algebra für hochdimensionale reelle und komplexwertige Matrizen wurden angepaßte effektive Verfahren entwickelt.

Die Arbeiten zur numerischen Simulation von Transportprozessen in porösen Medien wurden weitergeführt. In enger Zusammenarbeit mit der WASY GmbH wurden Testrechnungen mit dem bereits entwickelten Code vorgenommen. Diese Rechnungen zeigten die Konkurrenzfähigkeit des Codes gegenüber den bisherigen Methoden und haben zu Weiterentwicklungen der Methoden geführt. Erste Tests von Fehlerschätzern im Rahmen des BMBF-Verbundprojektes „Adaptive Lösungsstrategien für unterirdische Strömungs- und Transportprozesse“ waren erfolgreich.

Eine institutsübergreifende Rolle spielt das Projekt „pdelib - Algorithmen und Softwarekomponenten für die numerische Lösung von partiellen Differentialgleichungen“. Im Berichtszeitraum wurde auf der Grundlage der entstandenen modularen Toolbox die Arbeit an mehreren Projekten begonnen. Gleichzeitig wurden Schnittstellen und Algorithmen weiterentwickelt.

Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen

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

Kooperation: F. Hubbuch (Bayer AG, Leverkusen), R. Zeller (Silicon Graphics / Cray Research GmbH, Grasbrunn-Neukeferloh), St. Zitney (AspenTech UK Ltd, Cambridge, UK), R. Lamour (Institut für Mathematik, HU Berlin)

Förderung: BMBF

Der ökonomische, umweltverträgliche und sichere Betrieb von chemischen Anlagen, z. B. von großen Destillationsanlagen, erfordert die numerische Simulation der physikalisch-chemischen Prozesse sowohl für die Teilanlagen als auch für die gesamte Anlage. Die mathematische Modellierung dieser dynamischen Prozesse führt i. allg. auf Anfangswertprobleme für große Systeme von nichtlinearen Algebro-Differentialgleichungen (DAE), die sich bei der Simulation von Gesamtanlagen mit den gegenwärtig in den Simulatoren verwendeten numerischen Verfahren selbst auf Supercomputern nicht mehr effektiv behandeln lassen.

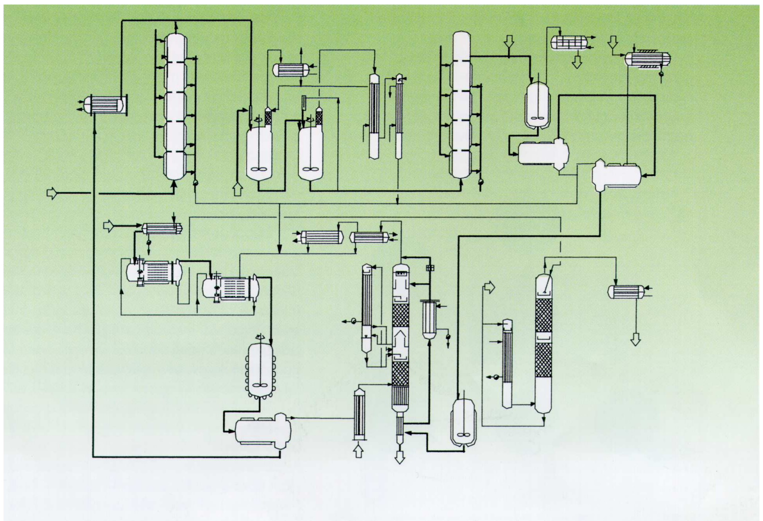


Abb. 1: Flußbild einer chemischen Anlage

Aus diesem Grund werden von uns solche numerischen Verfahren und Simulationsansätze untersucht, die die durch die Modellierung vorgegebene hierarchische Struktur der chemischen Anlagen für die Simulation auf Parallelrechnern ausnutzen.
Komplexe chemische Anlagen (siehe Abb. 1) bestehen aus verschiedenen Prozeßeinheiten (Units), wie z. B. Pumpen, Verdampfern, Reaktoren oder Böden von Destillationskolonnen. Diese Anlagenbestandteile sind durch Stoff- und Wärmeströme untereinander verbunden und werden separat modelliert. Die dabei entstehenden DAE-Systeme sind entsprechend dieser Units in m Teilsysteme strukturiert

$$F_i(t, y(t), \dot{y}(t), u(t)) = 0, \quad i = 1(1)m,$$

$$F_i : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^q \to \mathbb{R}^{n_i}, \quad \sum_{i=1}^{m} n_i = n, \quad t \in [t_0, t_{END}],$$

wobei $u(t)$ den Vektor der Parameterfunktionen und $y(t)$ den Vektor der unabhängigen Funktionen bezeichnen.
Mittels Partitionierungsalgorithmen werden Teilsysteme zu Blöcken zusammengefaßt. Durch geeignete Erweiterung der bei der Verwendung von BDF-Verfahren in jedem Diskretisierungszeitpunkt entstehenden nichlinearen Gleichungssysteme können diese durch effektiv parallelisierbare blockstrukturierte Verfahren vom Newton-Typ gelöst werden. Für die dabei erforderliche mehrfache Lösung schwach besetzter linearer Gleichungssysteme mit gleicher Besetztheitsstruktur aber verschiedenen rechten Seiten haben sich Gaußsche Eliminationsverfahren unter Verwendung von Pseudocode-Techniken bewährt [2].
Die in den letzten Jahren entwickelten Verfahren wurden in den Prototyp eines dynamischen Prozeßsimulators BOP (Block Oriented Process simulator - siehe Abb. 2) integriert [1,3]. Der Simulator benutzt eine Datenschnittstelle, die gegenwärtig noch aus Daten des kommerziellen Simulators SPEEDUP generiert wird [4]. Er ist auf Parallelrechnern vom Typ Cray J90 und SGI Origin 2000 implementiert. Der Simulator wurde auf der CeBIT'97 präsentiert und hat sich bei ersten Simulationsrechnungen für komplexe Anlagen der Bayer AG, Leverkusen, bewährt.

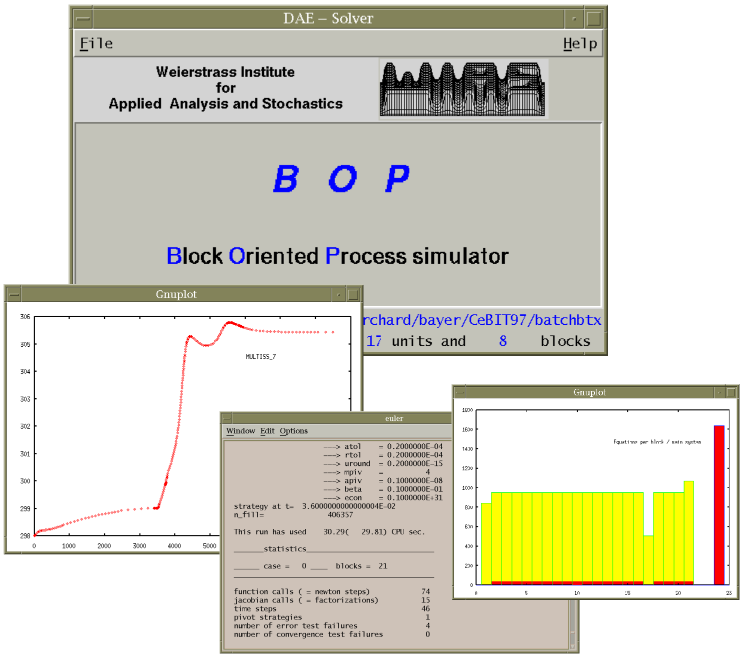


Abb. 2: Prototyp des Simulators BOP

Mit Arbeiten zur Entwicklung eines eigenständigen Simulators für die numerische Simulation chemischer Prozesse, der insbesondere in einer integrierten Entwicklungsumgebung wie dem nachfolgend erwähnten „Simulation Manager“ eingesetzt werden kann, wurde begonnen. Der Entwurf einer Eingabesprache zur Beschreibung chemischer Prozesse wurde fertiggestellt. Sie erlaubt eine zweistufige hierarchische Modellierung der Prozesse mit Hilfe von Macros und Units. Mit der Implementierung eines Compilers, der die Schnittstelle für den DAE-Solver erzeugt, wurde begonnen.
Für die bei der dynamischen Simulation chemischer Anlagen erforderliche Berechnung konsistenter Anfangswerte für DAE-Systeme wurde von Herrn A. R. Rodríguez Santiesteban, in Fortsetzung der Arbeiten von H. Sandmann, ein Verfahren implementiert, das auf Arbeiten

von R. Lamour (HU Berlin) basiert [5]. Es benutzt ein QR-Verfahren, bei dem Techniken für schwach besetzte Matrizen ausgenutzt werden. Testrechnungen an Problemen der chemischen Prozeßsimulation wurden erfolgreich durchgeführt.

Die dynamische Simulation komplexer chemischer Anlagen erfordert eine angepaßte modulare Entwicklung und Testung von Teilmodellen sowie ihre stufenweise Verschaltung (flowsheeting) zu einem Prozeßmodell der Gesamtanlage. Dabei ist es zunehmend nicht mehr möglich, ein homogenes Gesamtmodell zu erstellen bzw. konsistent weiterzuentwickeln. Daher wird ein neuartiger Ansatz für die Simulation von Gesamtanlagen verfolgt. Er geht von der Simulation von Teilanlagen aus, die in einem Zeitintervall für vorgegebene zeitabhängige Teilvektoren von Eingangsströmen (i. allg. Konzentrationen, Druck, Temperatur) die zugehörigen Teilvektoren der Ausgangsströme berechnen. Hierbei kann jeder Teilprozeß pro Zeitintervall unabhängig, verteilt in einem Rechner-Cluster, gerechnet werden. Die Verschaltung der Teilanlagen zur Gesamtanlage liefert ein System von Koppelgleichungen, das mit einem geeigneten ableitungsfreien Verfahren zu lösen ist. Für die Entwicklung und Testung der numerischen Verfahren an praxisrelevanten Aufgabenstellungen wurde uns der von der Bayer AG, Leverkusen, entwickelte „Simulation Manager“ als Simulationsumgebung zur Verfügung gestellt.

Literatur

1. J. Borchardt, F. Grund, D. Horn, T. Michael, *Parallelized Numerical Methods for Large-Scale Dynamic Process Simulation*, in: Proceedings of the 15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics, (A. Sydow, ed.) Wissenschaft & Technik Verlag, Berlin, 1997, Vol. **I** , pp. 547–552.

2. J. Borchardt, F. Grund, D. Horn, *Parallelized numerical methods for large systems of differential-algebraic equations in industrial applications*, WIAS-Preprint No. 382 (1997).

3. 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. Schunck, Hrsg.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1997, pp. 91–103.

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

5. R. Lamour, *A well-posed shooting method for transferable DAE's*, Numer. Math., **59** (1991), pp. 815–829.

Simulation von monolithisch integrierten Höchstfrequenzschaltungen

Bearbeiter: G. Hebermehl, R. Schlundt

Kooperation: W. Bruns, W. Heinrich, H. Zscheile (Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik), K. Beilenhoff, H. Klingbeil (TH Darmstadt)

Die Arbeiten zur Simulation monolithisch integrierter Schaltungen für die Mikrowellentechnik wurden fortgesetzt. Die feldtheoretisch orientierten Methoden gehen von der dreidimensionalen Geometrie und den Materialeigenschaften aus und ermöglichen daher eine große Flexibilität bezüglich der analysierbaren Strukturen.

Die Entwicklung der Arbeiten wird durch den wachsenden Markt für die Mobilkommunikation und Sensortechnik bestimmt. Der hohe numerische Aufwand für die Simulation von Multichip-Aufbauten erfordert weiterhin verbesserte, kostengünstige und akkurat arbeitende Entwurfswerkzeuge für die Schaltungen.

Modellerweiterungen und die effektive Lösung von Aufgaben der linearen Algebra für hochdimensionale reelle und komplexwertige Matrizen stehen im Mittelpunkt.

Die Höchstfrequenzschaltungen werden als Verbindung unendlich langer, longitudinal homogener Wellenleiter mit einer Diskontinuität (siehe Abb. 1) beschrieben. Die Eigenschaften der Schaltungen werden durch die Streumatrix widergespiegelt, die aus dem elektromagnetischen Feld berechnet wird. Das elektromagnetische Feld wird durch die Lösung eines dreidimensionalen Randwertproblems für die Integralform der Maxwellschen Gleichungen mit Wellenleiter-Randbedingung gewonnen. Durch die Verwendung der Maxwellschen Gleichungen im Frequenzbereich wird im Unterschied zu Zeitbereichsverfahren Modentrennung erreicht. Durch die Erweiterung des Modells auf verlustbehaftete Medien können einerseits Materialeigenschaften differenzierter berücksichtigt werden und andererseits für offene Strukturen PML-Randbedingungen (Perfectly Matched Layer) für die Absorption elektromagnetischer Wellen angegeben werden, indem bei der Formulierung der Maxwellschen Gleichungen „magnetische Ladungen und Ströme“ eingeführt werden:

$$\begin{aligned}
\oint_{\partial\Omega} (\frac{1}{\mu}\vec{B}) \cdot d\vec{s} &= \int_{\Omega} ((j\omega\varepsilon + \kappa)\vec{E}) \cdot d\vec{\Omega}, & \oint_{\cup\Omega} (\varepsilon\vec{E}) \cdot d\vec{\Omega} &= 0, \\
\oint_{\partial\Omega} \vec{E} \cdot d\vec{s} &= \int_{\Omega} (-(j\omega + \frac{\kappa^*}{\mu})\vec{B}) \cdot d\vec{\Omega}, & \oint_{\cup\Omega} \vec{B} \cdot d\vec{\Omega} &= 0.
\end{aligned}$$

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 oder nicht-Hermitesche Matrizen (verlustbehafteter Fall) und hochdimensionale lineare Gleichungssysteme mit schwach besetzten indefiniten symmetrischen oder symmetrischen komplexen Koeffizientenmatrizen. Die Lösungen der Eigenwertprobleme liefern die Randbedingungen an den Toren (Wellenleiter-Randbedingung) für das dreidimensionale Randwertproblem für die Diskontinuität.

Berechnung der Eigenmoden

Durch die Vermeidung der Berechnung aller Eigenwerte zur Bestimmung einer kleinen Menge von Ausbreitungskonstanten, die auf den komplexen Fall ausgedehnt werden konnte, und die damit mögliche Verwendung der Sparse-Matrix-Technik sowie durch die Vernachlässigung kleiner Elemente können jetzt Aufgaben, für deren Berechnung sonst Tage benötigt wurden, in Minuten auf einer Workstation gelöst werden.

Randwertproblem

Durch die Verwendung von 4 verschiedenen Arten auf die Aufgabe zugeschnittener Vorkonditionierer (darunter die Aufspaltung der hochdimensionalen Gleichungssysteme ($3 * 10^6$ Unbekannte) mit Hilfe graphentheoretischer Methoden) in Zusammenhang mit Krylov-Verfahren werden erhebliche Verbesserungen in der Rechenzeit erreicht. Da die hochdimensionalen Gleichungssysteme i. allg. für mehrere rechte Seiten zu berechnen sind, wurden die Krylov-Verfahren für den Fall reeller Matrizen zur weiteren Steigerung der Effektivität auf diese Aufgabenstellung erweitert.

An der Lösung des dreidimensionalen Randwertproblems im verlustbehafteten Fall wird noch gearbeitet.

Die Ergebnisse der Forschungsarbeiten wurden in den Publikationen [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9] dargestellt.

Literatur

1. K. BEILENHOFF, W. HEINRICH, H. L. HARTNAGEL, *Improved Finite-Difference Formulation in Frequency Domain for Three-Dimensional Scattering Problems*, IEEE Trans. Microwave Theory Tech., Vol. **40**, No. 3 (1992), pp. 540–546.

2. A. CHRIST, H. L. HARTNAGEL, *Three-Dimensional Finite-Difference Method for the Analysis of Microwave-Device Embedding*, IEEE Trans. Microwave Theory Tech., Vol. **MTT-35**, No. 8 (1987), pp. 688–696.

3. G. HEBERMEHL, R. SCHLUNDT, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *Eigen mode solver for microwave transmission lines*, WIAS-Preprint No. 308 (1997).

4. ——, *Eigen mode solver for microwave transmission lines*, COMPEL, Vol. **16** (1997), No. 2, pp. 108–122.

5. ——, *Improved numerical solutions for the simulation of microwave circuits*, WIAS-Preprint No. 309 (1997).

6. ——, *Improved numerical solutions for the simulation of microwave circuits*, in: *Progress in Industrial Mathematics at ECMI 96*, (M. Brøns, M. Ph. Bendsøe, M. P. Sørensen, eds.) B. G. Teubner, Stuttgart (1997), pp. 176–183.

7. ——, *Numerical solutions for the simulation of monolithic microwave integrated circuits*, WIAS-Preprint No. 316 (1997), eingereicht bei: SIAM J. Sci. Comput., 1997.

8. ——, *Improved numerical methods for the simulation of microwave circuits*, WIAS-Preprint No. 378 (1997), eingereicht bei: Surveys Math. Indust., 1997.

9. G. HEBERMEHL, *Eigen mode solver for monolithic integrated circuits*, in: Abstracts ENUMATH 1997, Second European Conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg (1997), pp. 244–245.

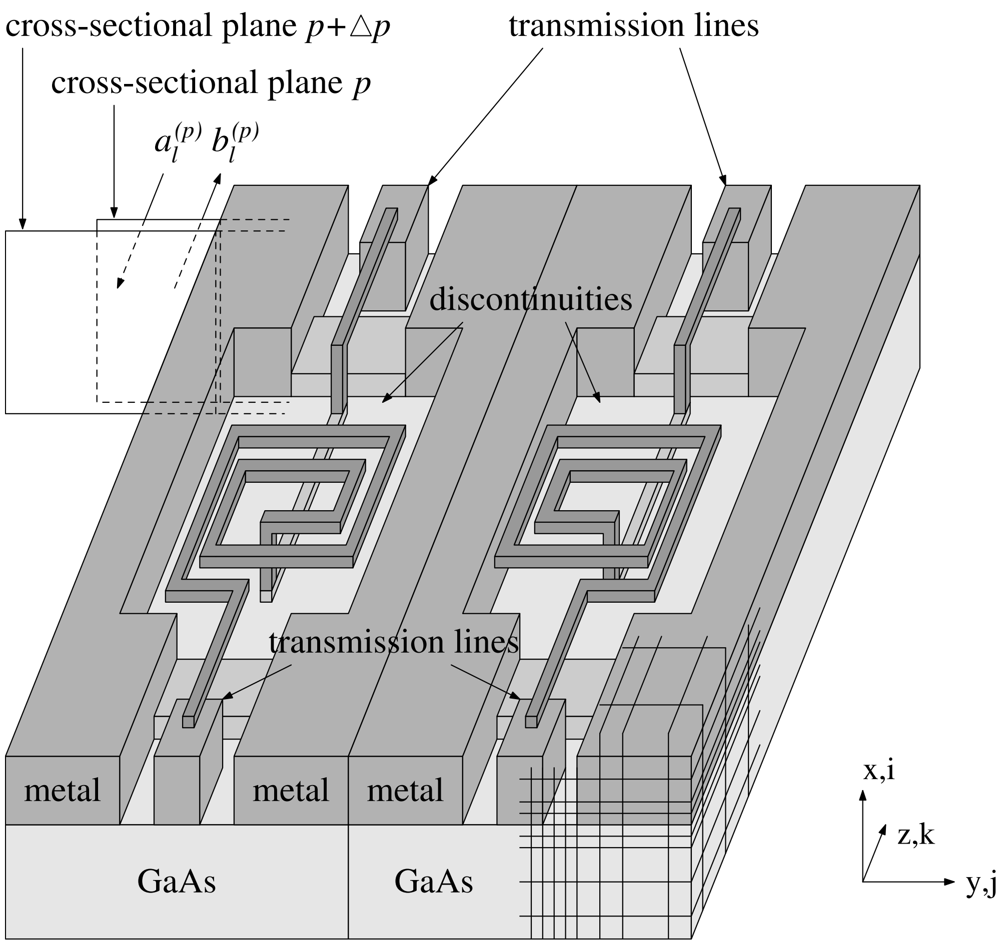


Abb. 1: Gekoppelte Spiralinduktivitäten mit Gitter

pdelib - Algorithmen und Softwarekomponenten für die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen

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

Kooperation: B. Erdmann, R. Roitzsch (ZIB Berlin)

Im Rahmen dieses Projektes wird *pdelib*, ein System von Softwarekomponenten für die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen, entwickelt und gepflegt. Gleichzeitig wird in enger Verzahnung mit dem Projekt „Fluid- und Stofftransport in porösen Medien“ an Eigenentwicklungen numerischer Verfahren mit den Schwerpunkten algebraische Mehrgitterverfahren, Gittergenerierung und adaptive Verfahren gearbeitet.

Softwareentwicklung. Besonderes Gewicht wird auf Portabilität, Modularität und klare, stabile Definitionen von Schnittstellen gelegt. Damit soll eine maximale Wiederverwendbarkeit der einzelnen Teilkomponenten erreicht werden.
Der strategischen Zielrichtung des Instituts entsprechend wird auf die Entwicklung einer graphischen Benutzeroberfläche verzichtet, statt dessen kann der Code mit Hilfe von Eingabeskripten gesteuert werden. Seine Modularität ermöglicht prinzipiell die Erstellung von graphischen Benutzeroberflächen im Rahmen von industriefinanzierten Auftragsprojekten.
Im Berichtszeitraum wurde das Konzept ausführlich im Institut vorgestellt. Eine Reihe von Mitarbeitern arbeitet bereits aktiv mit dem Code.
Eine abwärtskompatible Reimplementation der Gitterschnittstelle ermöglicht jetzt eine wesentlich einfachere Online-Kopplung der Toolbox an Gittergeneratoren und adaptive Gitterverwaltungskerne wie KASKADE sowie eine einfache Möglichkeit, ohne großen Aufwand algorithmische Tests auf Tensorproduktnetzen vorzunehmen.
Auf der Grundlage von Komponenten aus *pdelib* wurden u. a. folgende Projekte im Institut bearbeitet: Transportprozesse in porösen Medien (siehe S. 61), Inverse Probleme der Grundwassermodellierung [2], Wärmebehandlung von Stahl (siehe S. 132 und [3]), Widerstandsschweißen, Kristallzüchtung, Data Mining (siehe S. 136 und S. 96), Numerische Lösung des Schrödinger-Poisson-Systems (siehe S. 30), Approximation und Optimierung von Platten [1].

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 eine neue Version des Gittergenerators IBG in C++ entwickelt. Durch eine neue Geometriebeschreibungs-Schnittstelle COG wurde die Erstellung von Geometriebeschreibungen erleichtert und verbessert.
Gleichzeitig wurde der auf einem Octree-Algorithmus beruhende Gittergenerierungs-Algorithmus komplett neu geschrieben. Die neue Version des Gittergenerators IBG 2.0 kann bereits getestet werden. Es ist jedoch auch die Verwendung der alten Version des Gittergenerators IBG 1.3 in Verbindung mit der neuen Geometriebeschreibung möglich.

Algebraische Mehrgitterverfahren. Die schnelle Auflösung großer, schwachbesetzter linearer Gleichungssysteme ist Kernbestandteil einer großen Zahl numerischer Verfahren. In dieser Verfahrensklasse sind Mehrgitterverfahren aufgrund ihrer potentiellen optimalen Komplexität besonders interessant.
Ziel der Arbeit in diesem Teilprojekt ist die Weiterentwicklung von algebraischen Mehrgittervorkonditionierern auf unstrukturierten Netzen. Im Berichtszeitraum wurden Arbeiten zum Vergleich des bisher verfolgten modularen knotenbasierten AMG-Ansatzes mit den zellbasierten Verfahren, welche sich sehr effizient implementieren lassen, ausgeführt [4]. Dabei stellte sich heraus, daß weiterer Forschungsbedarf besteht, um ein tieferes Verständnis für diese Verfahrensklasse zu gewinnen.

Literatur

1. V. Arnautu, H. Langmach, J. Sprekels, D. Tiba, *On the approximation and the optimization of plates*, WIAS-Preprint No. 357 (1997).

2. G. Bruckner, S. Handrock-Meyer, H. Langmach, *An inverse problem from the 2d-groundwater modelling*, WIAS-Preprint No. 343 (1997), eingereicht in: Inverse Problems.

3. J. Fuhrmann, D. Hömberg, *Numerical simulation of surface heat treatments*, WIAS-Preprint No. 375 (1997), eingereicht in: Internat. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow.

4. J. Fuhrmann, *Algebraic multigrid methods - a comparison*, erscheint in: Proceedings of the IMACS Symposiun on Iterative Methods, Jackson Hole WY.

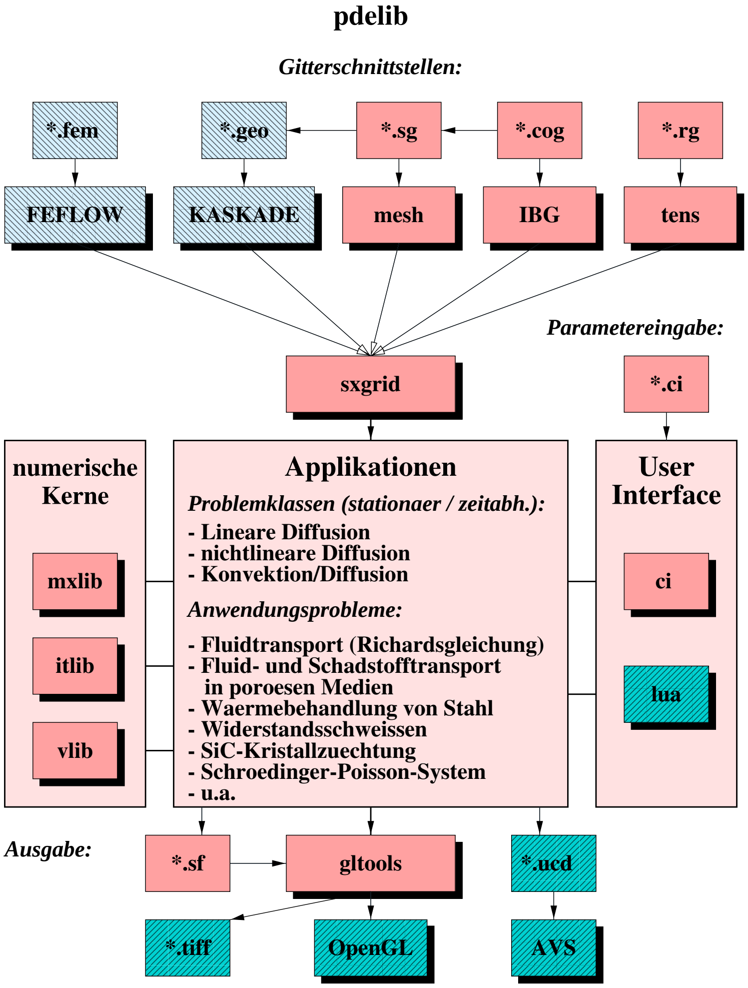


Abb. 1: Struktur von *pdelib*

Simulation von Transportprozessen in porösen Medien

Bearbeiter: J. Fuhrmann, H. Langmach, M. Petzoldt

Kooperation: H.-J. Diersch, C. Kaiser (WASY GmbH, Berlin), G. Nützmann, M.Thiele (IGB Berlin), R. Kornhuber (Universität Stuttgart)

Förderung: BMBF

Das Fließen von Wasser und anderen Fluiden, der Transport von Wärme und von darin gelösten Substanzen in porösen Medien lassen sich mit Hilfe nichtlinearer, teilweise degenerierter parabolischer Differentialgleichungen mathematisch modellieren.

Numerische Lösung der Richards-Gleichung. Der in den vorangegangenen Jahren entwickelte ein-, zwei- und dreidimensionale Code zur Simulation des Fluidtransports in porösen Medien, dessen Implementierung auf der Toolbox *pdelib* (siehe S. 58) beruht, wurde weiterentwickelt.

Die durchgeführten Vergleichsrechnungen mit anderen Ansätzen zur Diskretisierung, insbesondere mit dem Schema von Jäger und Kačur [1], zeigten, daß der gewählte Ansatz konkurrenzfähig ist.

Weitere Testrechnungen wurden in enger Zusammenarbeit mit der WASY GmbH ausgeführt. Angeregt durch diese Kooperation wurden Untersuchungen zur numerischen Stabilität von Finite-Volumen-Diskretisierungen begonnen, welche bereits zur Verbesserung des verwendeten Diskretisierungsschemas geführt haben.

Im Institut für Gewässerökologie und Binnenfischerei (IGB) werden auf der Basis dieses Codes Rechnungen zur Parameteridentifikation anhand von Meßdaten aus Verdunstungsversuchen vorgenommen. Der Code hat sich hier als robust erwiesen. Außerdem hat sich für diese eindimensionale Problemstellung das gewählte Konzept der dimensionsunabhängigen Programmierung auf der Basis der Gitterschnittstelle *sxgrid* aus *pdelib* bewährt.

Adaptive Lösungsstrategien für unterirdische Strömungs- und Transportprozesse. Im Rahmen dieses vom BMBF geförderten Verbundprojektes sollen adaptive Lösungsverfahren für nichtlineare Transportprobleme entwickelt und in das Programmpaket FEFLOW der WASY GmbH integriert werden. Dabei kommen Komponenten von *pdelib* und der Gitterverwaltungskern von KASKADE zum Einsatz. Die Arbeit im Rahmen dieses Projektes soll sich insbesondere auf die Entwicklung robuster Fehlerschätzer konzentrieren.

Im Berichtszeitraum wurden erfolgreich erste Testrechnungen für lineare stationäre und transiente Diffusionsprobleme mit räumlich inhomogenen Koeffizienten vorgenommen. Die räumliche Inhomogenität vermindert die Regularität des dahinterstehenden Variationsproblems. Die bisher getesteten Fehlerschätzer – ein Fehlerschätzer auf der Grundlage hierarchischer Basen und ein Residualfehlerschätzer – konnten diese Effekte gut erfassen.

Literatur

1. J.FUHRMANN, *Numerical solution schemes for nonlinear diffusion problems based on Newton's method*, in: ALGORITMY '97, 14th Conference on Scientific Computing West Tatra Mountains - Zuberec, Slovakia, September 2-5, 1997, Proceedings of contributed papers and posters (K. M. A. Handlovičová, M.Komorníková, eds.), Slovak Technical University, Bratislava, 1997, pp. 32–41.

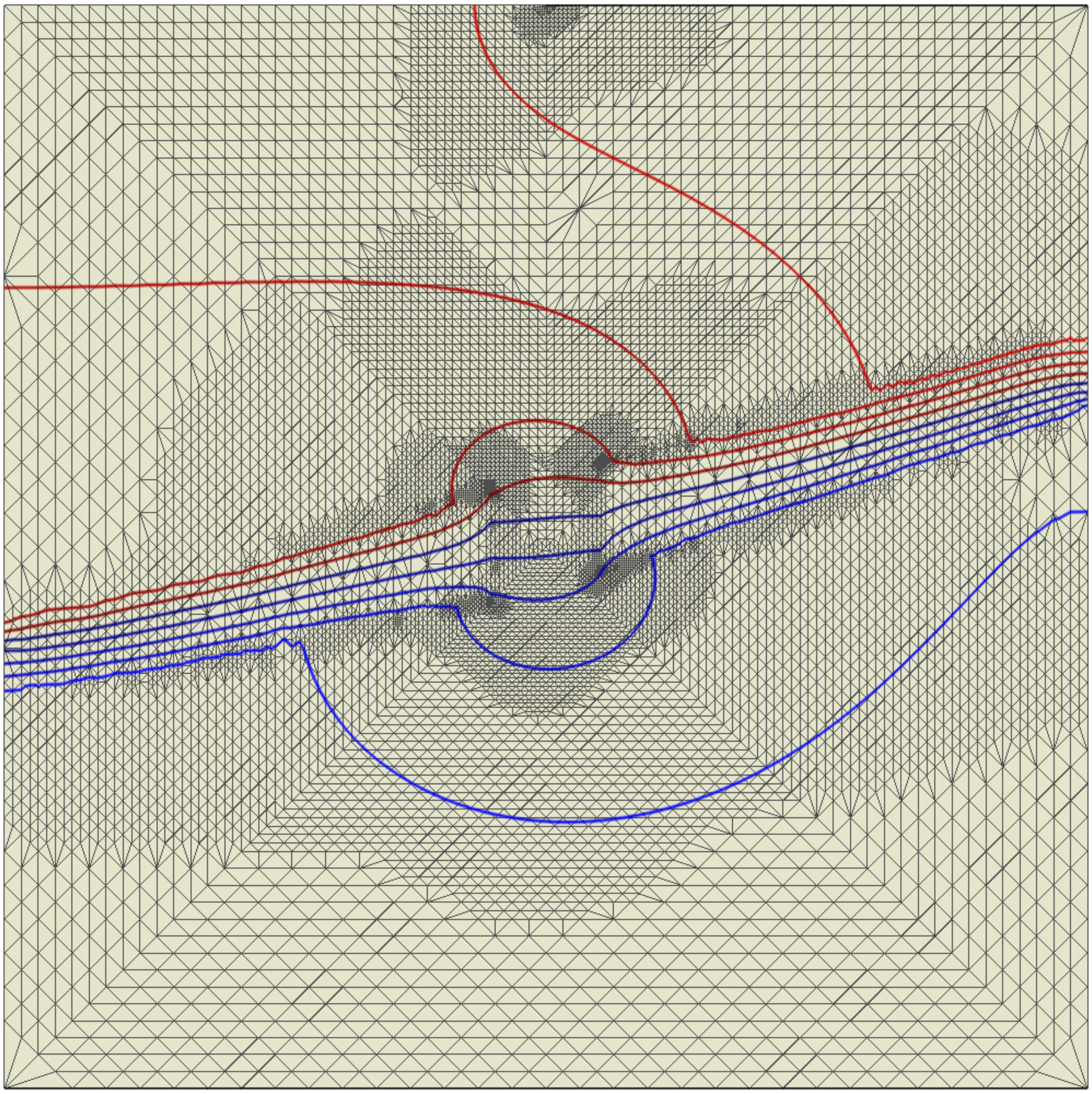


Abb. 1: Stationäres Strömungsfeld in der Umgebung einer durchbrochenen Sperrschicht (Rechnung auf der Basis von *pdelib*/KASKADE)

Visualisierung von numerischen Simulationen und von Präsentationen

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

Kooperation: E. Suschke (HU Berlin)

Das Hauptaugenmerk der Arbeiten zur Visualisierung liegt auf der Unterstützung bei der Auswertung von Zwischen- und Endergebnissen von Berechnungen großer numerischer Probleme, die im WIAS im Rahmen der vielfältigen Projekte aus der Industrie, Wirtschaft und Forschung durchgeführt werden.

Neben der Unterstützung bei der Erstellung von Graphiken für Präsentationen (meistens mittels Visualisierungspaket AVS) und der Sichtung weiterer geeigneter Software (z. B. PV-WAVE) hat sich die Erstellung von VHS-Videos als wichtigste Präsentationsform für iterativ zu lösende oder zeitabhängige Probleme herauskristallisiert. Dabei werden die technischen Ausrüstungen des Graphik-Labors (SGI-Workstation „Reality Engine", SGI-Workstation Indy 2 mit Galileo-Video-Board) teilweise bis zur Grenzbelastung (lokale Speicherbereiche, Rechenleistungen für Video-Codierung) ausgenutzt.
Stellvertretend seien hier die Videos von K. Fleischmann (FG 5)/A. Klenke (Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg) (14000 Bilder $\stackrel{\wedge}{=}$ ca. 10 Minuten VHS-Video) und von W. Dreyer/M. Kunik (FG 7) genannt.

Im Rahmen des *pdelib*-Projektes (siehe S. 58) wird die Graphiktoolbox gltools weiterentwickelt. Ziel dieser Arbeiten ist nicht der Ersatz von Systemen wie AVS, GRAPE oder HyperPlan, sondern ein kompakter, einfach zu handhabender, portabler und für die Code-Weitergabe im Rahmen von Anwendungsprojekten geeigneter Rahmen zur Arbeit mit OpenGL, der Standardschnittstelle für 3D-Graphik im professionellen Bereich. Auch dieses Paket wurde mit einer Frame-Dump-Möglichkeit versehen, welche die Erstellung von MPEG-Videos aus numerischen Kalkulationen ermöglicht.
Unter Einbeziehung dieser Toolbox konnte auch das gemeinsame Projekt mit der FG 6 zu Data Mining realisiert werden (siehe S. 136).

4.4 Forschungsgruppe Integralgleichungen und Pseudodifferentialgleichungen

4.4.1 Zusammenfassung

Entsprechend dem Forschungsprogramm des WIAS für die Jahre 1997–1999 wurde das Projekt „Optimierung integrierter Kolonnensysteme unter stochastischen Echtzeitbedingungen“ zur Senkung des Energieverbrauchs von thermischen Destillationsprozessen in der chemischen Industrie neu begonnen. Weiterhin wurden die bereits laufenden Arbeiten zur Entwicklung, Implementierung und effektiven Nutzung von Integralgleichungsmethoden in komplexen Anwendungsfeldern der Natur– und Ingenieurwissenschaften verstärkt fortgesetzt und um neue Aufgabenstellungen erweitert. Im Mittelpunkt standen dabei analytische Untersuchungen des klassischen und des konischen Diffraktionsproblems für optische Gitter mit stückweise glatten Profilen, die Fertigstellung von Teilen des Programmsystems DIPOG zur Lösung direkter und inverser Probleme der klassischen Diffraktion bei binären und Multilevel–Gittern, analytische und numerische Behandlung von Problemen der Bruchmechanik und Kontinuumsmechanik in Gebieten mit nichtglatten Rändern sowie spezielle inverse Probleme der Seismik, Tomographie und Geophysik. In den Grundlagenuntersuchungen wurden neue Ergebnisse u. a. bei der Lösung folgender Probleme erzielt: Existenz, Eindeutigkeit und Regularität in gewichteten Lebesgue– und Sobolewräumen der Lösungen der Integralgleichung von Lauricella–Sherman über polygonalen Rändern im $\mathbb{R}^2$, Approximations– und Superapproximationseigenschaften allgemeiner Klassen von Multiwaveleträumen, Stabilität von Galerkin–Petrov–Verfahren zur numerischen Lösung von Pseudodifferentialgleichungen unter Benutzung von Multiwaveleträumen, stabile adaptive Algorithmen zur numerischen Lösung von Randintegralgleichungen über polygonalen Rändern mittels stückweise linearer Wavelet–Kollokation, subdifferentielle Charakterisierung der Lipschitz–Stetigkeit von Restriktionsmengen in der nichtglatten Optimierung.

Ein Anwendungsprojekt wurde im Rahmen einer Forschungsvereinbarung mit dem Berliner Institut für Optik GmbH durchgeführt und außerdem durch das BMBF–Mathematikprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“ gefördert. 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 der im Jahre 1997 bearbeiteten Projekte vor.

4.4.2 Projekte

Direkte und inverse Probleme für diffraktive Strukturen in der Optik

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

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

Förderung: BMBF

Die Entwicklung verschiedener hochpräziser Mikro-Techniken erlaubt die Herstellung komplexer Oberflächenprofile, die als hocheffektive optische Gitter und andere diffraktive Strukturen eingesetzt werden können und deren Nutzung in verschiedenen Bereichen der Verfahrens-, Umwelt- und Medizintechnik enorme Potentiale bietet. Bei der Modellierung und Berechnung solcher Strukturen stoßen die bisher in der optischen Beugungstheorie benutzten Ansätze der geometrischen Optik an ihre Grenzen. Deshalb entsteht bei der praktischen Anwendung moderner diffraktiver Technologien ein wachsendes Bedürfnis nach einer exakteren Modellierung, die auf den elektro-magnetischen Feldgleichungen basiert, und nach der Entwicklung effektiver analytischer und numerischer Lösungsmethoden, um das Verhalten vorgegebener Strukturen zu beschreiben und um andererseits Strukturen zu bestimmen, die vorgegebene optische Eigenschaften besitzen.
Die Arbeiten zu dieser Thematik werden im Rahmen des vom BMBF geförderten Projekts „Analytische und numerische Behandlung direkter und inverser Probleme für diffraktive Strukturen – Optimierung binärer optischer Gitter“ und auf der Grundlage einer Forschungsvereinbarung mit dem BIFO durchgeführt. Der Schwerpunkt hierbei liegt auf binären und Multilevel-Gittern, deren Herstellung weitgehend beherrscht wird und die ein breites Anwendungsspektrum besitzen.
1997 wurden zu dieser Thematik folgende Arbeiten durchgeführt:

1. Abschluß der analytischen Untersuchungen des klassischen Diffraktionsproblems für Gitter mit stückweise glatten Profilen:

In [2] wurden ausgehend von einer auf Bao/Dobson/Friedman (vgl. [1]) zurückgehenden Variationsformulierung Existenz- und Eindeutigkeitsaussagen sowie Stabilitätskriterien für die numerische Lösung des direkten Problems erzielt, die bekannte Aussagen aus der Literatur wesentlich verallgemeinern. Des weiteren wurden exakte analytische Gradientenformeln zur Lösung des optimalen Design-Problems bei beschichteten binären Gittern auf Multilayer-Systemen angegeben und begründet (vgl. [3]).

2. Fertigstellung von Teilen des Programmsystems DIPOG zur Lösung direkter und inverser Probleme der klassischen Diffraktion bei binären und Multilevel-Gittern:
Auf der Basis der Ergebnisse der analytischen und numerischen Untersuchungen wurden verallgemeinerte FE-Methoden zur Berechnung von Beugungseffektivitäten von modernen Diffraktionsgittern auf Multilayer-Systemen implementiert. Der Querschnitt eines solchen Diffraktionsgitters ist in Abb. 1 dargestellt. Durch eine geeignete Wahl der optischen Indizes lassen sich eine Vielzahl der heute technologisch relevanten binären und Multilevel-Gitterformen realisieren.

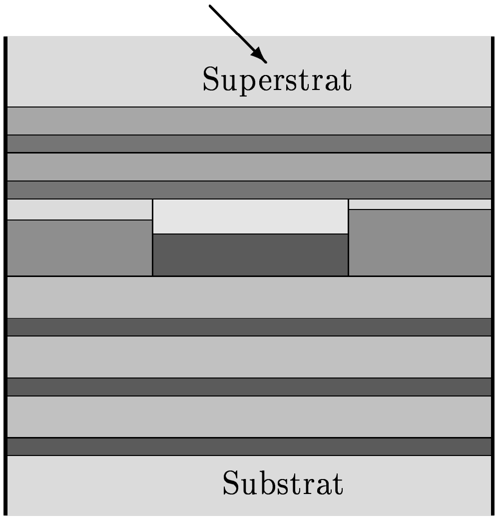


Abb. 1: Periodische Zelle eines Diffraktionsgitters mit Vielschichtsystemen

Mit den implementierten Methoden lassen sich parallel die zur Gradientenberechnung benötigten direkten und dualen Probleme lösen, und somit können effektive Algorithmen zur Minimabestimmung von Zielfunktionen für das optimale Design-Problem entwickelt werden. Nach umfangreichen numerischen Tests wurden in Zusammenarbeit mit R. Henrion drei verschiedene auf Gradientenverfahren beruhende Algorithmen implementiert, die für beschichtete binäre Gitter u. a. vorgegebene Intensitätsverläufe über einem Bereich von Wellenlängen oder Einfallswinkeln optimieren bzw. Phasendifferenzen zwischen den TE- und TM-Polarisationen realisieren. Diese Teile des Programmsystems DIPOG werden beim Partner BIFO u. a. zur Simulation und zum Entwurf von Mikrooptiken in Hochleistungslasern, von HR-Spiegeln und Polarisationsschaltern eingesetzt (siehe z. B. [4]).

3. Analytische Untersuchungen des Problems der konischen Diffraktion an Gittern mit stückweise glatten Profilen:
Bei der konischen Diffraktion wird eine einfallende ebene Welle

$$\vec{E}^i = \vec{s}\exp(i\vec{k}_0\vec{r})\exp(i\omega t)\,,\ \vec{H}^i = \vec{p}\exp(i\vec{k}_0\vec{r})\exp(i\omega t)\,,\ \vec{k}_0 = (\alpha,-\beta,\gamma)\,,\ k_0^2 = \omega^2\varepsilon_0\mu_0$$

mit $\gamma \neq 0$ durch eine periodische und bezüglich der z-Richtung invariante diffraktive Struktur gebeugt; die Wellenvektoren der gebeugten Ordnungen liegen dann auf einem Konus.

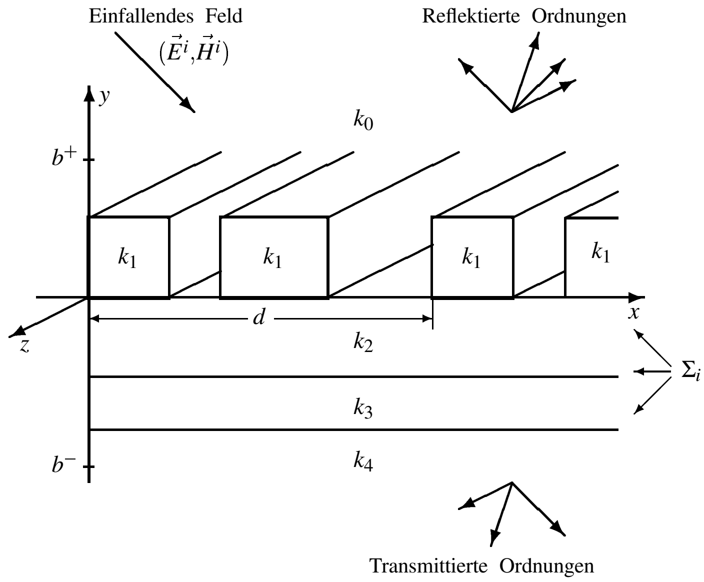


Abb. 2: Konische Diffraktion an einem binären Gitter

Das Gesamtfeld erfüllt die zeitharmonischen Maxwellschen Gleichungen

$$\nabla \times \vec{E} - i\omega\mu\vec{H} = 0\,, \quad \nabla \times \vec{H} + i\omega\varepsilon\vec{E} = 0$$

mit den bekannten Stetigkeitsbedingungen an den Materialgrenzen

$$n \times [\vec{E}] = 0\,,\; n \times [\vec{H}] = 0 \quad \text{auf } \Sigma_i$$

sowie Ausstrahlungsbedingungen im Unendlichen.

Die numerische Simulation der Beugungseffekte bei schrägem Einfall des Lichts spielt insbesondere für die Qualitätskontrolle von Beugungsgittern eine große Rolle. Es existieren von Ingenieuren entwickelte numerische Verfahren auf der Basis von Reihenentwicklungen, deren Konvergenz wegen der Lösungssingularitäten allerdings nicht abgesichert ist. In [5] wird gezeigt, daß die konische Diffraktion in ein zweidimensionales Problem überführt werden kann. Die Lösung $(\vec{E},\vec{H})$ kann aus den z-Komponenten

$$E_z = u(x,y)\exp(i\alpha x + i\gamma z)\,, \qquad H_z = v(x,y)\exp(i\alpha x + i\gamma z)$$

bestimmt werden, wobei u und v H^1-Lösungen des Transmissionsproblems für die Helmholtz-Gleichungen

$$\nabla_\alpha^2 u + (k^2 - \gamma^2)u = 0\,, \qquad \nabla_\alpha^2 v + (k^2 - \gamma^2)v = 0$$

in dem Rechteck $[0,d] \times [b^-,b^+]$ sind, die die gekoppelten Sprungbedingungen

$$\left[\frac{k^2\,\partial_n^\alpha u}{k^2-\gamma^2}\right]_{\Sigma_i} = -\gamma\omega\mu_0 \left[\frac{\partial_\tau^\alpha v}{k^2-\gamma^2}\right]_{\Sigma_i}\,, \quad \left[\frac{\partial_n^\alpha v}{k^2-\gamma^2}\right]_{\Sigma_i} = \frac{\gamma}{\omega\mu_0}\left[\frac{\partial_\tau^\alpha u}{k^2-\gamma^2}\right]_{\Sigma_i}$$

an den Materialgrenzen Σ_i erfüllen. Hierbei bezeichnet

$$\nabla_\alpha := (\partial_x + i\alpha, \partial_y)\ ,\ \partial_n^\alpha := (\nabla_\alpha, n)\ ,\ \partial_\tau^\alpha := (\nabla_\alpha, \tau)\ .$$

In [5] wird eine Variationsformulierung des Problems angegeben, mit deren Hilfe erstmals weitreichende Existenz- und Eindeutigkeitsaussagen für die konische Diffraktion bewiesen wurden. Es wird u. a. gezeigt, daß für physikalisch relevante Gittermaterialien die Variationsformulierung immer stark elliptisch ist und damit Stabilität von FE-Methoden vorliegt. Des weiteren wird bewiesen, daß für alle Frequenzen eindeutig bestimmte H^1-Lösungen existieren, wenn der optische Index mindestens eines Materials nicht reell ist. Außerdem werden die Singularitäten der Lösungen in den Interface-Ecken bestimmt. Daraus ergibt sich, daß im allgemeinen die Lösungen der Maxwellschen Gleichungen mit endlicher Energie keine quadratisch integrierbaren Gradienten besitzen.

Literatur

1. G. BAO, D. DOBSON, J. COX, *Mathematical studies in rigorous grating theory*, J. Opt. Soc. Amer. A, **10**, (1995) pp. 1029–1042.

2. J. ELSCHNER, G. SCHMIDT, *Periodic Structures and Optimal Design of Binary Gratings. I. Direct Problems and Gradient Formulas*, erscheint in: Math. Meth. Appl. Sci.

3. J. ELSCHNER, G. SCHMIDT, *A rigorous numerical method for the optimal design of binary gratings*, WIAS-Preprint No. 376 (1997), erscheint in: J. Modern Opt.

4. H.-J. ROSTALSKI, J. GUHR, B. KLEEMANN, J. ELSCHNER, G. SCHMIDT, M. FERSTL, E. PAWLOWSKI, R. STEINGRÜBER, G. BOSTANJOGLO, R. MOTZKUS, *Use of a multilayer dielectric diffraction grating as resonator mirror of a Nd:YAG laser*, erscheint in: J. Modern Opt.

5. J. ELSCHNER, R. HINDER, F. PENZEL, G. SCHMIDT, *Existence, uniqueness and regularity for solutions of the conical diffraction problem*, WIAS-Preprint, in Vorbereitung.

Optimierung integrierter Kolonnensysteme unter stochastischen Echtzeitbedingungen

Bearbeiter: R. Henrion, A. Möller

Kooperation: P. Li (TU Berlin), W. Römisch (HU Berlin), G. Wozny (TU Berlin), J. Mayer (ETH Zürich), M. Steinbach (ZIB Berlin), P. Szantai (TU Budapest)

Förderung: DFG-Schwerpunktprogramm „Echtzeitoptimierung großer Systeme“

1. Gegenstand des Projekts (Beginn: 01.10.1997) ist die Optimierung integrierter Kolonnensysteme unter stochastischen Echtzeitbedingungen. Das Ziel besteht in der Ermittlung einer online zu bestimmenden robusten, optimalen Führungsstrategie. Aus wirtschaftlichen und ökologischen Gründen ist die Senkung des Energieverbrauchs von thermischen Destillationsprozessen in der chemischen Industrie erforderlich. Durch Verwendung energetisch gekoppelter Destillationskolonnen läßt sich der Energiebedarf bereits wesentlich reduzieren, doch ist dies mit einer schwierigeren Steuerung, Regelung und Optimierung der Prozesse verbunden. Der konventionelle Betrieb integrierter Kolonnensysteme basiert auf der vorherigen Auslegung für einen konstanten Betriebspunkt. In der Realität ändern sich jedoch die Randbedingungen, so daß die Prozesse am vorgegebenen Betriebspunkt energetisch nicht optimal betrieben werden können. Daraus ergibt sich die Notwendigkeit der Echtzeit-Optimierung unter Berücksichtigung der sich ändernden Randbedingungen. Der sowohl nach Menge als auch Zusammensetzung stochastisch variierende Feed des Prozesses besitzt wesentlichen Einfluß auf die Einhaltung der geforderten Produktspezifikationen. In dieser Arbeit wird der bisher in der Literatur nicht betrachtete Fall einer Feedänderung von 2t/h bis 6t/h und einer Änderung der Feedkonzentration von ca. 3% Methanol (Strahlerwässer) auf 35-40% Methanol (Produkte aus Veresterungsprozessen) untersucht. Es muß ein Vollastbetrieb mit hohen Lasten (6t/h) und unterschiedlichen Eingangskonzentrationen ebenso wie z. B. am Wochenende Teillast (2t/h) zum Warmhalten der Kolonnen realisiert werden können. Hier liegt die besondere wissenschaftliche Herausforderung bezüglich der Echtzeit-Optimierung des Energieverbrauchs bei gleichzeitiger Einhaltung aller Produktanforderungen und der gegebenen Anlagenbegrenzungen. In Abbildung 1 ist ein im Rahmen der Vorarbeiten aufgenommener Konzentrations- und Feedmengenverlauf einer typischen Produktionsanlage ohne energetische Kopplung für den Zeitraum von 24 Stunden exemplarisch dargestellt.

2. Das dem zu untersuchenden Prozeß zugrundeliegende dynamische Modell wird durch ein semi-explizites differentiell-algebraisches Gleichungssystem beschrieben. Die Besonderheit des hier gewählten Zugangs besteht darin, daß die herkömmlich deterministisch formulierten Nebenbedingungen für die Produktspezifikationen und die Realisierung einer Mindestfeedmenge im Tank als Wahrscheinlichkeitsrestriktionen aufgefaßt werden, um deren stochastische Abhängigkeit vom Feed mit dem Ziel der Ermittlung einer robusten Strategie zu berücksichtigen. Die Produktspezifikationen lassen sich in der Form

$$h_1(x_{u,\xi}(t)) \geq \alpha_1, \quad \forall t \in [t_0, t_1]$$

schreiben, wobei $x_{u,\xi}$ die von der Steuerung u und der zufälligen Zusammensetzung ξ des Feeds abhängige Konzentration der interessierenden Komponente und h_1 eine gewisse Funktion dieser Konzentration ist.

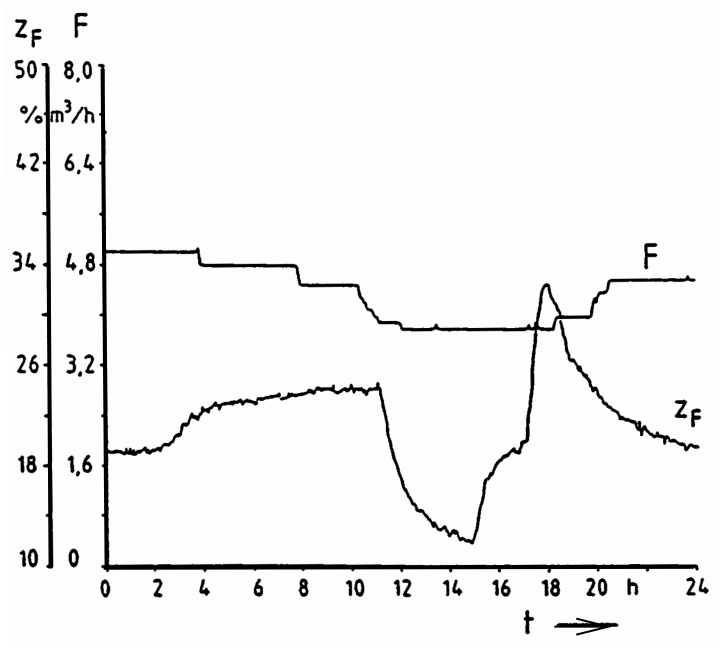


Abb. 1: Verlauf von Feedstrom (F) und -konzentration (z_F) einer industriellen Anlage

Die Realisierung einer Mindestmenge im Tank, wodurch insbesondere am Wochenende das Warmhalten der Kolonnen abzusichern ist, kann als

$$h_2(u(t),\eta(t)) \geq \alpha_2, \quad \forall t \in [t_0,t_1]$$

dargestellt werden. Hier ist h_2 eine Funktion der Steuerung sowie der zufälligen Feedmenge η, die dem Tank zufließt. Eine Möglichkeit, die beiden Nebenbedingungen als Wahrscheinlichkeitsrestriktionen zu formulieren, ergibt sich aus

$$\begin{aligned} P^{\xi}(h_1(x_{u,\xi}(t)) \geq \alpha_1 \ \forall t \in [t_0,t_1]) &\geq p_1\,, \\ P^{\eta}(h_2(u(t),\eta(t)) \geq \alpha_2 \ \forall t \in [t_0,t_1]) &\geq p_2. \end{aligned}$$

Eine andere Variante besteht in der Aufstellung punktweiser Wahrscheinlichkeitsrestriktionen der Gestalt

$$\begin{aligned} P^{\xi}(h_1(x_{u,\xi}(t)) \geq \alpha_1) &\geq p_1, \quad \forall t \in [t_0,t_1]\,, \\ P^{\eta}(h_2(u(t),\eta(t)) \geq \alpha_2) &\geq p_2, \quad \forall t \in [t_0,t_1]. \end{aligned}$$

Bei Verwendung dieser zweiten Variante läßt sich das zu analysierende stochastische Optimierungsproblem zusammenfassend folgendermaßen formulieren:

$$\begin{aligned} J(u) \Longrightarrow \text{Min} \quad & \quad \text{bei} \\ x'_{u,\xi}(t) &= f(x_{u,\xi}(t),y(t),u(t),\xi(t))\,, \\ g(x_{u,\xi}(t),y(t)) &= 0\,, \\ x_{u,\xi}(t_0) &= x_0\,, \\ P^{\xi}(h_1(x_{u,\xi}(t)) \geq \alpha_1) &\geq p_1\,, \quad \forall t \in [t_0,t_1]\,, \\ P^{\eta}(h_2(u(t),\eta(t)) \geq \alpha_2 &\geq p_2\,, \quad \forall t \in [t_0,t_1]. \end{aligned}$$

Hierbei ist J ein Energiefunktional, und g beschreibt den algebraischen Zusammenhang der Zustandsgrößen.

3. Für die Behandlung der Wahrscheinlichkeitsrestriktionen innerhalb des Optimierungsproblems ist die nähere Analyse der stochastischen Prozesse ξ und η erforderlich. Hierbei soll die Gültigkeit geeigneter Annahmen geprüft werden, die diese Nebenbedingungen einer numerischen Realisierung zugänglich machen. Zunächst soll vorausgesetzt werden, daß es sich bei ξ und η um Gaußsche Prozesse handelt. Später werden auch Markov-Prozeß-Eigenschaften untersucht. Zur Einbindung in die Realisierung der Lösung des Optimierungsproblems mittels SQP-Verfahren sind sowohl analytisch gewonnene Informationen [5] über die Werte und die Ableitung der die Wahrscheinlichkeitsrestriktion beschreibenden Abbildung nach der Steuervariablen u als auch die Berechnung von Schranken mittels Monte-Carlo-Methoden von Bedeutung [4]. Zur Charakterisierung des stochastischen Modells und eventuell auch zu seiner Optimierung ist die Simulation des stochastischen Feed-Prozesses notwendig [1]. Das hochdimensionale Steuerungsproblem soll durch Anwendung direkter Kollokations- oder Schießverfahren zur Diskretisierung in Verbindung mit strukturorientierten SQP-Verfahren gelöst werden. Hierzu ist durch eingehendere Modellanalyse zu prüfen, welche der in der Literatur beschriebenen modernen Methoden sowie welche verfügbare effiziente Software [2,3] im vorliegenden Fall am besten dem Echtzeitcharakter der Problematik entsprechen.

Literatur

1. U. M. Diwekar, J. R. Kalagnanam, *Efficient sampling technique for optimization under uncertainty,* AIChE J., **43** (1997), pp. 440-447.

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

3. M. Heinkenschloss, *Projected Sequential Quadratic Programming Methods*, SIAM J. Optim., **6** (1996), pp. 373-417.

4. A. Prékopa, *Sharp bounds on probabilities using linear programming,* Oper. Res., **38** (1990), pp. 227-239.

5. S. Uryasev, *Derivatives of probability functions and some applications,* Ann. Oper. Res., **56** (1995), pp. 287-311.

Behandlung von Problemen der Bruchmechanik und Kontinuumsmechanik mit Integralgleichungsmethoden

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

Kooperation: V. G. Maz'ya, T. Ivanov (Universität Linköping), G. Monegato (Technische Universität Turin), O. Hansen (Universität Mainz)

1. Probleme der Bruchmechanik

Die Bestimmung der für die Bruchmechanik wichtigen K-Faktoren erfordert die Lösung von Randwertproblemen der linearen Elastizitätstheorie. Dabei erweist sich der Einsatz von Integralgleichungs- und Randelementmethoden oft als effektiver als die Verwendung von Finite-Elemente-Methoden. Zum Beispiel führt die Behandlung der ersten Randwertaufgabe der Elastizitätstheorie auf die Integralgleichung von Lauricella–Sherman:

$$u(x) - \frac{1}{\pi(n-1)} \int_{\Gamma} \frac{(x-y)\cdot \nu(y)}{|x-y|^n} \left\{ (1-\kappa)E_n + n\kappa \frac{(x-y)(x-y)^T}{|x-y|^2} \right\} u(y)d\Gamma(y) = f(x), \;\; x \in \Gamma \,. \tag{1}$$

Dabei bezeichnen ν die Normale an dem Rand Γ des Gebietes, E_n die Einheitsmatrix der Ordnung $n, \kappa = (\lambda+\mu)/(\lambda+3\mu)$ und λ, μ die Lamé-Koeffizienten; $n = 2$ entspricht dem Fall des ebenen und $n = 3$ dem Fall der räumlichen Elastizitätstheorie.
In [1] wurden mit Hilfe von Mellin-Techniken neue Resultate zur Existenz, Eindeutigkeit und Regularität in L_p-Räumen und Sobolewräumen mit Gewicht für die Integralgleichung (1) auf dem Rand eines ebenen Gebietes mit Ecken erzielt. Auf der Grundlage dieser Lösbarkeitstheorie gelang es erstmalig, die Stabilittät von Kollokationsverfahren mit stückweise polynomialen Ansatzfunktionen (Splines) im Fall polygonaler Gebiete zu begründen. Des weiteren wurde gezeigt, daß diese Verfahren bei Verwendung graduierter Gitter eine optimale Konvergenzordnung aufweisen.
Gegenwärtig beschäftigen wir uns mit dem (wesentlich schwierigeren) Problem der analytischen und numerischen Behandlung von Randintegralgleichungen der Elastizitätstheorie über $3D$-Gebieten mit nichtglattem Rand (z. B. Polyedergebiete). Erste Untersuchungen zu einer Lösbarkeits- und Regularitätstheorie in geeigneten gewichteten Sobolewräumen für die Integralgleichung (1) auf einem Polyederrand wurden begonnen.

2. Kontaktprobleme

Verschiedene Kontaktprobleme der ebenen Elastizitätstheorie führen auf die Integralgleichung 1. Art

$$\begin{aligned}
&\int_{-\alpha}^{\alpha} \{4[\sin(\theta-\omega)\ln(|\tan\frac{\theta-\omega}{2}|)] - 2(1+\nu)(\theta-\omega)\}F(\omega)d\omega \\
&+(1+\nu)\pi\int_{-\alpha}^{\theta}[1-cos(\theta-\omega)]F(\omega)d\omega \qquad (2)\\
&-(1+\nu)\pi\int_{\theta}^{\alpha}[1-cos(\theta-\omega)]F(\omega)d\omega = G(\theta)\ ,\ \ \alpha<\theta<\alpha\ ,
\end{aligned}$$

mit gegebenen Konstanten α und ν, $0<\alpha<\frac{\pi}{2}$, $0<\nu<1$, und einer bekannten Funktion G. Gesucht ist eine symmetrische Lösung F von (2), die der Bedingung

$$\int_{-\alpha}^{\alpha} F(\omega)d\omega = \frac{1}{2} \qquad (3)$$

genügt.
Durch Anwendung des Differentialoperators $1+\frac{d^2}{d\theta^2}$ und der anschließenden Variablentransformation $x=(\sin\omega)/\sin\alpha$ wurde in [5] das Problem (2), (3) auf die Gleichung

$$\frac{\sqrt{1-t^2\sin^2\alpha}}{\sin\alpha}\int_{-1}^{1}\frac{\rho(x)u(x)}{t-x}dx + (1+\nu)\frac{\pi}{2}\int_{-1}^{1}K(x,t)\rho(x)u(x)dx = f(t),\ \ -1<t<1\ , \qquad (4)$$

unter der Bedingung

$$\int_{-1}^{1}\rho(x)u(x)dx = \frac{1}{2} \qquad (5)$$

zurückgeführt, wobei $\rho(x)=1/\sqrt{1-x^2}$ und $K(x,t)=1$ für $0\le x\le t$, $K(x,t)=0$ sonst ist. Dabei ist das erste Integral in (4) im Sinne des Cauchyschen Hauptwertes zu verstehen. Gleichung (4) stellt eine Verallgemeinerung der bekannten Prandtlschen Tragflügelgleichung dar. In [5] wurde die eindeutige Lösbarkeit von (4), (5) im gewichteten Raum $L^2(\rho)$ für beliebiges $f\in L^2(\rho)$ bewiesen und die analytische Lösung explizit konstruiert. Außerdem wurden die Beziehungen zwischen den Lösungen der Probleme (2), (3) und (4), (5) studiert. Unter Benutzung Tschebyscheffscher Polynome wurde ein effizientes Verfahren zur numerischen Lösung von (2), (3) entwickelt und numerische Experimente durchgeführt.

3. Numerische Verfahren zur Lösung nichtlinearer partieller Integro–Differentialgleichungen basierend auf semi-analytischer Kubatur von Potentialen

Iterative Integralgleichungsmethoden sind ein interessantes alternatives Lösungsverfahren für nichtlineare Randwertaufgaben, insbesondere wenn diese auch Integraloperatoren mit singulären Kernfunktionen enthalten. Durch Anwendung einer von V. Maz'ya vorgeschlagenen

Approximationsmethode mittels glatter, schnell abfallender Funktionen und daraus abgeleiteter effektiver Kubaturformeln für verschiedene singuläre Integrale und Potentiale (vgl. [4]) wurden von Maz'ya/Karlin [3] unter anderem Zeitschrittverfahren zur Lösung von Evolutionsproblemen entwickelt, die bei numerischen Tests zur Lösung von Anfangswertproblemen verschiedener Klassen von Gleichungen sehr genaue Resultate liefern. Die theoretische Untersuchung des Konvergenzverhaltens dieser Verfahren wird durch das Auftreten von sogenannten Sättigungsfehlern bei der Approximation erschwert. 1997 wurden erste Arbeiten zur numerischen Analysis solcher Verfahren für einen wichtigen Spezialfall durchgeführt. Insbesondere wurden Fehlerabschätzungen theoretisch begründet sowie die optimale Wahl von Parametern untersucht. Es ist vorgesehen, diese Ergebnisse u. a. auf Gleichungen aus der Dislokations- und Plastizitätstheorie zu verallgemeinern. Hierbei ist ein in [2] entwickelter Zugang für die Kubatur von Integraloperatoren in beschränkten Gebieten anzuwenden, der auf der Quasiinterpolation der Dichte auf speziellen, sich zum Rand hin häufenden Gitterpunkten basiert.

Literatur

1. J. Elschner, O. Hansen, *A collocation method for the solution of the first boundary value problem of elasticity in a polygonal domain in* $\mathbb{R}^2$, WIAS-Preprint No. 354, 1997, eingereicht in: J. Integral Equations Appl.

2. T. Ivanov, V. Maz'ya, G. Schmidt, *Boundary layer approximations and cubature of potentials in domains*, in Vorbereitung.

3. V. Karlin, V. Maz'ya, *Time-marching algorithms for non-local evolution equations based upon "approximate approximations"*, erscheint in: SIAM J. Sci. Comput.

4. V. Maz'ya, G. Schmidt, *"Approximate Approximations" and the cubature of potentials*, Rend. Mat. Acc. Lincei, **6** (1995), pp. 161-184.

5. G. Monegato, S. Prössdorf, *On the solution of an integral equation of first kind arising in contact problems*, erscheint in: J. Integral Equations Appl.

Inverse Probleme der Seismik und Tomographie

Bearbeiter: G. Bruckner, S. Prößdorf

Kooperation: J. Cheng (Fudan University, Shanghai), S. V. Pereverzev (Ukrainische Akademie der Wissenschaften, Kiew), M. Yamamoto (University of Tokyo)

1. Die behandelte Aufgabe aus der Seismik betrifft die schwingende Saite im eindimensionalen, bzw. die schwingende Membran im zweidimensionalen Fall, die am Rande eingespannt ist und durch Auslenkung in endlich vielen Punkten in Erregung versetzt wird. Durch geeignete Messungen im Inneren oder auf dem Rande sollen die Erregungsherde identifiziert werden.
Mathematisch handelt es sich im eindimensionalen Falle beim direkten Problem um das folgende Rand-Anfangswertproblem für die Wellengleichung:

$$\begin{aligned} u_{tt}(x,t) &= u_{xx}(x,t)+\lambda(t)\sum_{j=1}^{m}\alpha_j\delta(x-x_j), \quad 0<x<1, 0<t<T\ , \\ u(x,0) &= u_t(x,0)=0, \qquad 0<x<1\ , \\ u(0,t) &= u(1,t)=\ 0, \qquad 0<t<T. \end{aligned}$$

Hier sind die reellen Zahlen $\alpha_j, x_j \in (0,1), 1\le j\le m,\ \lambda\in C^1[0,1], \lambda(0)\neq 0,$ gegeben, und $\delta(\cdot - z)$ ist die Diracsche Distribution mit $\int_0^1 \delta(x-z)\varphi(x)dx=\varphi(z), \varphi\in C_0^\infty$.
Das inverse Problem besteht in der Bestimmung der Parametermenge

$$P=\{m,\alpha_1,\dots,\alpha_m,x_1,\dots,x_m\}$$

aus der Beobachtung beispielsweise von $u(y_0,t), 0<t<T$, für fixiertes $y_0\in(0,1)$.
Im eindimensionalen Fall gelang es, das Problem in ein nichtlineares gutgestelltes Problem und eine lineare Operatorgleichung, eine Integralgleichung erster Art, zu zerlegen und für letztere Regularisierungsverfahren anzugeben (vgl. [1]), die auf einer Datenglättung beruhen.
In [2] wurde außer gestörten Meßdaten zusätzlich ein gestörter Operator betrachtet. Das bedeutet speziell für das genannte Anwendungsproblem, daß die Funktion $\lambda(t)$ nicht exakt gegeben ist. Für eine Operatorgleichung

$$Au=g,\ \ A: X\to Y,\ \ X\cong Y$$

mit gestörtem Operator und gestörter rechter Seite wurde das folgende Konzept entwickelt.
Wir gehen davon aus, daß eingehende Fehler unterschiedlicher Natur sein können. So kann eine Funktion beispielsweise an diskreten Stellen ungenau gemessen, oder sie kann durch weißes Rauschen verfälscht sein. Man hat daher den Fehler nicht nur nach seiner Größe, sondern auch nach seiner Qualität zu unterscheiden. Damit ist klar, daß Fehler, die in den Operator und solche, die in die Daten (=rechte Seite) eingehen, sich im allgemeinen qualitativ und quantitativ unterscheiden werden.
Um die Qualität der Fehler beschreiben zu können, nehmen wir an, daß Y in eine Skala von Banachräumen eingebettet ist,

$$Y\subset Z^\mu\subset\ldots\subset Z^\nu\subset\ldots .$$

Die Güte des gestörten Operators A_ε charakterisieren wir dann durch die Nummer κ, für die die Operatornorm

$$\|A - A_\varepsilon\|_{X \to Z^\kappa} \leq \varepsilon$$

ist, und die Glattheit der Daten g_δ durch die Nummer ρ, für die

$$\|g - g_\delta\|_{Z^\rho} \leq \delta$$

gilt.
Es wurden, ausgehend von einem numerischen Verfahren bei exaktem Operator und exakter rechter Seite, Fehlerabschätzungen bei gestörtem Operator und gestörter rechter Seite unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Qualität dieser Störungen abgeleitet (vgl. [2]).
Der Grundgedanke ist, das Gesamtproblem in einen operatorspezifischen Anteil und einen datenspezifischen Anteil zu zerlegen.

2. Verschiedene Probleme der lokalen Tomographie, der Armierung von Stahlbeton sowie der Geophysik führen auf eine Integralgleichung 1. Art der Gestalt

$$\int_D \frac{1}{r_{xy}^2} u(y)dy = f(x), \quad x \in D_1 \,. \tag{1}$$

Hierbei bezeichnet $r_{xy} = |x-y|$ den Euklidischen Abstand der Punkte $x \in D_1$, $y \in D$, und $D, D_1 \subset \mathbb{R}^3$ sind einfach zusammenhängende Gebiete mit leerem Durchschnitt. Weil die Kernfunktion r_{xy}^{-2} in beiden Variablen analytisch ist, ist das Problem (1) hochgradig schlecht gestellt. Da die Singulärwerte des Integraloperators (1) sehr schnell gegen Null abklingen, ist es äußerst schwierig, eine gute Approximationslösung für (1) zu finden. Für die numerische Analysis der Gleichung (1) sind lokale (besonders punktweise) Stabilitätsabschätzungen der (i. a. nur lokal glatten) Lösung von besonderer Bedeutung. Dazu gibt es in der Literatur bisher so gut wie keine Ergebnisse. In [3] wurden lokale punktweise Stabilitätsabschätzungen vom logarithmischen Typ bei Benutzung der Energienorm von f gefunden unter der Annahme, daß die Lösung $u \in L^\infty(D)$ eine gewisse minimale lokale Glattheit besitzt.

3. In [4] wurde eine Methode der stückweise konstanten Approximation der Lösung der (schlecht gestellten) Volterraschen Integralgleichung 3. Art

$$p(t)z(t) + \int_0^t \frac{h(t,\tau)}{(t-\tau)^{1-\alpha}} z(\tau)d\tau = f(t),\ t \in [0,1]\ ,\ 0 < \alpha < 1\ ,$$

entwickelt. Hierbei ist p eine Funktion, die auf einer Punktmenge des Intervalls $[t_1, t_2] \subset [0,1]$ verschwindet und außerdem die Abschätzung $|p(t)| < \delta$ für alle $t \in [t_1, t_2]$ erfüllt, wobei δ eine hinreichend kleine positive Zahl ist. Die vorgeschlagene Methode liefert eine Genauigkeit der Ordnung $O(\delta^{2\nu/(2\nu+1)})$ bezüglich der L_2-Norm, wobei ν der Parameter der quellenweisen Darstellung der exakten Lösung auf dem Intervall $[t_1, t_2]$ ist. Der entwickelte Algorithmus benutzt nicht mehr als $O(\delta^{-(2-\lambda)/\alpha} \cdot \log^{2+1/\alpha} \frac{1}{\delta})$ Werte der Galerkinschen Funktionale, wobei $\lambda \in (0, 1/2)$ im Prozeß der Bestimmung des Regularisierungsparameters (nach dem Morozovschen Diskrepanzprinzip) gewählt wird.

Literatur

1. G. BRUCKNER, *On the regularization of an inverse vibration problem*, GAMM-Tagung 1997, eingereicht.

2. G. BRUCKNER, *On an operator equation with noise in the operator and the right-hand side with application to an inverse vibration problem*, in Vorbereitung.

3. J. CHENG, S. PRÖSSDORF, M. YAMAMOTO, *Local estimation for an integral equation of first kind with analytic kernel*, in Vorbereitung.

4. S. V. PEREVERZEV, S. PRÖSSDORF, *A discretization of Volterra integral equations of third kind with weakly singular kernels*, WIAS-Preprint No. 374, 1997, erscheint in: J. of Inverse and Ill-Posed Problems.

Multiskalen-Methoden

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

Kooperation: W. Dahmen, K. Urban (Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen), W. Mc Lean, I. H. Sloan (University of New South Wales, Sydney)

Förderung: DFG: „Adaptive Multiskalenmethoden“, „Adaptive Multiskalenmethoden zur numerischen Behandlung von Operatorgleichungen“

1. Waveletalgorithmen für die Randelementmethode

Der Vorteil im Einsatz von Waveletmethoden in der Numerik besteht bekanntlich darin, daß man Funktionen mit lokalabhängigen Glattheitseigenschaften, wie z. B. Kernfunktionen von Integraloperatoren, gut approximieren kann, d. h. durch günstige Auswahl der Waveletbasis kann eine hohe Genauigkeit mit relativ geringer Anzahl von Freiheitsgraden erreicht werden. Für Anwendungen in der Randelementmethode bedeutet dies, daß bei der Diskretisierung der Randintegralgleichungen vollbesetzte Steifigkeitsmatrizen durch schwachbesetzte Matrizen approximiert werden können. Diese Kompressionstechnik führt zu einem schnellen Waveletalgorithmus für die Randelementmethode, der zum Gegenstand zahlreicher Veröffentlichungen avancierte.
Die wichtige Frage, welche Sorte von Wavelets für den erfolgreichen Einsatz des Algorithmus am günstigsten ist, ist aber bisher in nur ungenügendem Maße untersucht worden. Die Kompressionstechniken und Überlegungen zu den Quadraturformeln suggerieren, daß stückweise polynomiale Wavelets mit möglichst kleinem Träger die besten Kandidaten sein könnten. Diese Forderung zusammen mit der Einfachheit der Konstruktion von Wavelets im zweidimensionalen Falle führt in natürlicher Weise dazu, Multiwavelets als Ansatzfunktionen in der Randelementmethode zu betrachten. Mit anderen Worten, die Ansatzräume werden nicht mehr wie bisher definiert mittels einer hierarchischen Basis, erzeugt aus nur einer Formfunktion, sondern ein endliches System von Formfunktionen wird zur Erzeugung der hierarchischen Basis benutzt. In der Arbeit [4] wird die Approximationseigenschaft einer vollkommen allgemeinen Klasse von Multiwaveleträumen untersucht und eine wichtige Kommutatoreigenschaft (Superapproximation) bewiesen. Unter Verwendung dieser Resultate gelingt es in den Arbeiten [5,4], die Stabilität von Galerkin- und Kollokationsverfahren zur numerischen Lösung von Pseudodifferentialgleichungen durch das sogenannte numerische Symbol zu charakterisieren. Daraus ergeben sich unmittelbar neue Konvergenzeigenschaften zu den Kollokations- und Galerkinverfahren für alle wichtigen Randintegraloperatoren über glatten Randkurven. Optimale Fehlerabschätzungen können in einer entsprechenden Skala von Sobolevräumen bewiesen werden.
Neben der Kompression der Steifigkeitsmatrix erlauben die Waveletmethoden auch adaptive Algorithmen, bei denen die Basis des Ansatzraums durch ein ortsabhängiges Verfeinerungsniveau an die Glattheit der Lösungsfunktion angepaßt wird. Diese Methode ist der Gittergraduierung vergleichbar, gestattet aber zusätzlich, mit einer oder wenigen Formfunktionen auszukommen und die Kompressionseffekte in der Steifigkeitsmatrix beizubehalten. In der Arbeit [6] wird die stückweise lineare Kollokation für eindimensionale Randintegraloperatoren betrachtet und in natürlicher Weise ein verallgemeinertes Kollokationsverfahren mit adaptiven Ansatzräumen

eingeführt. Es kann gezeigt werden, daß Stabilität und optimale Konvergenzabschätzungen erhalten bleiben. Am Beispiel des Doppelschichtoperators auf Vielecken wird demonstriert, wie die negativen Effekte, die aus der singulären Asymptotik der Lösungsfunktion resultieren, durch die günstige Wahl des Ansatzwaveletraumes kompensiert werden können. Bisher unveröffentlichte numerische Tests bestätigen die theoretischen Resultate zu Stabilität, zur Anpassung der Waveleträume und zu den Kompressionseigenschaften (vgl. Abbildung 1). Es zeigt sich sogar, daß die Stabilität wesentlich robuster ist, als die bisherige Theorie vermuten läßt.

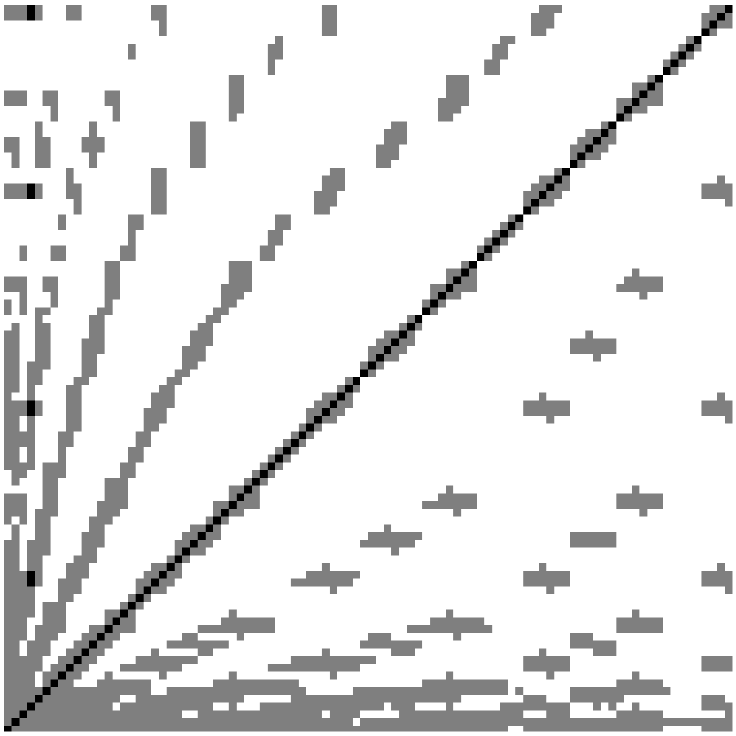


Abb. 1: Muster der Steifigkeitsmatrix beim verallgemeinerten Kollokationsverfahren für den Doppelschichtpotentialoperator über einem Dreieck: Schwarze Punkte für Matrixeinträge größer als 10^{-6}, graue Punkte für Matrixeinträge zwischen 10^{-6} und 10^{-10}.

2. Multiskalen-Methoden zur numerischen Behandlung von Operatorgleichungen

Für die Entwicklung von Multiskalenverfahren für elliptische Randwertprobleme war die Konstruktion geeigneter Basen und deren Stabilitäts- und Konditionseigenschaften ein Schwerpunkt. In [2] wurden für diese und andere Anwendungen hinreichend allgemeine biorthogonale Wavelets auf dem Intervall konstruiert und implementiert. Über Vereinigungen parametrischer Abbildungen lassen sich dann Waveletbasen auf Mannigfaltigkeiten angeben. Weiterführend wurden in [3] quantitative Aussagen zur Stabilität der in [2] konstruierten Basen getroffen. Die Implementierung von Integralen von Wavelets wurde in bezug auf geeignete objekt-orientierte Datenstrukturen in das am IGPM, RWTH Aachen, entwickelte Softwarepaket angepaßt (vgl. [1]).
Das DFG-Projekt „Multiskalen-Methoden zur numerischen Behandlung von Operatorgleichungen“ wurde im Mai 1997 erfolgreich abgeschlossen.

Literatur

1. T. BARSCH, A. KUNOTH, K. URBAN, *Towards Object Oriented Software Tools for Numerical Multiscale Methods for P.D.E.s using Wavelets*, in: Multiscale Wavelet Methods for Partial Differential Equations (W. Dahmen, A. Kurdila and P. Oswald, eds.), Academic Press, 1997, pp. 383–412.

2. W. DAHMEN, A. KUNOTH, K. URBAN, *Biorthogonal Spline-Wavelets on the Interval – Stability and Moment Conditions*, WIAS-Preprint No. 265 (1996), erscheint in: Appl. Comput. Harm. Anal.

3. W. DAHMEN, A. KUNOTH, K. URBAN, *Wavelets in Numerical Analysis and their Quantitative Properties*, in: Surface Fitting and Multiresolution Methods (A. Le Méhauté, C. Rabut, L. L. Schumaker, eds.), Vanderbilt University Press, Nashville, TN, 1997, pp. 93–130.

4. S. PRÖSSDORF, J. SCHULT, *Approximation and commutator properties of projections onto shift-invariant subspaces and applications to boundary integral equations*, WIAS-Preprint No. 372 (1997), erscheint in: J. Integral Equations Appl.

5. S. PRÖSSDORF, J. SCHULT, *Multiwavelet approximation methods for pseudo-differential equations on curves. Stability and convergence analysis*, WIAS-Preprint No. 325 (1997), erscheint in: The Numerical Treatment of Boundary Integral Equations (K.E. Atkinson, Y. Xu, eds.), Adv. Comput. Math.

6. A. RATHSFELD, *On the stability of piecewise linear wavelet collocation and the solution of the double layer equation over polygonal curves*, WIAS-Preprint No. 307 (1997), erscheint in: Mathematical Fundamentals of the Boundary Element Methods (M. Golberg, ed.), Advances in Boundary Elements, Comput. Mech.

Stabilität von Optimierungsproblemen mit nichtglatten Daten

Bearbeiter: R. Henrion

Kooperation: W. Römisch (HU Berlin), B. M. Mordukhovich (Wayne State Univ. Detroit)

Im Fall nichtglatter Daten werden Kriterien für die Lipschitz-Stabilität von Restriktionsmengen (speziell: metrische Regularität) zunehmend mit Hilfe des approximativen Subdifferentials von Mordukhovich beschrieben. Dieses ermöglicht eine schärfere (in endlicher Dimension sogar äquivalente) Charakterisierung metrischer Regularität als die bekannten klassischen Bedingungen auf der Grundlage von Clarkes konvexwertigem Subdifferential [5]. Die sich aus dem Verzicht auf Konvexität unmittelbar ergebende Frage nach den topologischen Eigenschaften des approximativen Subdifferentials wurde detailliert in [1] untersucht. Ausgehend von bisherigen Resultaten (z. B. [6]) zur Stabilität von Wahrscheinlichkeitsrestriktionen, wurden in [2] schärfere und besser verifizierbare Kriterien bei allgemeineren Eingangsdaten aufgestellt. Für die konkrete Klasse von Wahrscheinlichkeitsrestriktionen, die durch r-konkave Maße definiert sind, konnte unter einer Voraussetzung starker Konvexität die Lösungsmengen-Hölderstetigkeit bezüglich Störungen des Maßes in der Kolmogorov-Metrik nachgewiesen werden. Monotonie-Eigenschaften der Restriktionsabbildung (wie bei Wahrscheinlichkeitsrestriktionen) lassen sich gewinnbringend für Stabilitätsanalysen ausnutzen. Diese Idee wurde in [3] systematisiert und dabei eine Äquivalenzbeziehung zwischen Clarkescher und approximativer Ko-Ableitung gefunden sowie eine Klasse nichtglatter Restriktionsmengen charakterisiert, für die sich in Analogie zum glatten Fall generische Aussagen zur globalen metrischen Regularität ableiten lassen. Die Ergebnisse der zuvor genannten Punkte sind Inhalt der Habilitationsschrift [4].

Literatur

1. R. HENRION, *Topological properties of the approximate subdifferential,* J. Math. Anal. Appl., **207** (1997), pp. 345-360.

2. R. HENRION, W. RÖMISCH, *Metric regularity and quantitative stability in stochastic programs with probabilistic constraints*, eingereicht bei: Math. Programming.

3. R. HENRION, *Characterization of stability for cone increasing mappings,* erscheint in: Set-Valued Anal.

4. R. HENRION, *The Approximate Subdifferential and Parametric Optimization,* Habilitationsschrift, Humboldt-Universität zu Berlin, 1997.

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

6. W. RÖMISCH, R. SCHULTZ, *Distribution sensitivity for certain classes of chance-constrained models with application to power dispatch,* JOTA, **71** (1991), pp. 569-588.

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.
Erfreulicherweise konnte die Forschungsgruppe in diesem Jahr ihre personelle Basis durch Drittmittelstellen deutlich stärken. Von besonderer Bedeutung war hierfür der Start des DFG-Schwerpunktprogramms „Interagierende stochastische Systeme von hoher Komplexität". Im Rahmen dieses Programms konnte die Forschungsgruppe 1,5 Wissenschaftlerstellen einwerben. Diese kommen Projekten im Rahmen der Untersuchung ungeordneter Modelle mit langreichweitiger Wechselwirkung sowie der Entwicklung von auf stochastischen Teilchensystemen basierenden numerischen Verfahren für Probleme der Aerosoldynamik zugute. Weiterhin konnte ein aus dem Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis" finanzierter Doktorand für die Mitarbeit auf dem Gebiet der Spin-Gläser und neuronalen Netze gewonnen werden.

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

4.5.2 Projekte

Tieftemperaturphasen in Modellen mit langreichweitiger Wechselwirkung

Bearbeiter: A. Bovier, Ch. Külske

Kooperation: M. Zahradník (Fakultät für Mathematik, Karls-Universität Prag), P. Picco, V. Gayrard (CNRS, Marseille)

Förderung: EU, DFG: „Untersuchung von Tieftemperaturphasen ungeordneter Modelle mit langreichweitiger Wechselwirkung“

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“, mit der die nicht-eindeutigen Zustandsgleichungen in der van-der-Waals-Theorie ad hoc beseitigt wurden, zu geben. Ein weitaus interessanterer Aspekt dieser Modelle wurde jedoch erst in den letzten Jahren intensiv untersucht: die rigorose Herleitung von Kontinuums-Theorien (Ginzburg-Landau-Theorie, Phasenfeldmodelle), 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 ist die Untersuchung von *ungeordneten* Systemen mit Kac-Wechselwirkung (Spin-Gläser, Hopfield-Modelle, Random-Field-Modelle) das wesentliche Ziel unserer Forschung.

Zu diesem Thema wurde in [1,2] ein erstes Resultat in einem eindimensionalen Modell, dem Kac-Hopfield-Modell erzielt. Die hier verwandten Methoden sind jedoch nicht auf den Fall höherer Dimensionen übertragbar, und die sich stellenden Probleme sind ungleich schwieriger. Zu ihrer Behandlung sind zunächst geeignete Methoden zur Untersuchung der Tieftemperaturphasen von Spin-Systemen mit langreichweitiger Wechselwirkung zu entwickeln. In einem ersten Schritt wurde hierzu in [3] eine Version des Peierls-Arguments entwickelt, die es erlaubt, in Modellen mit exakter Spin-Flip-Symmetrie die Existenz eines Phasenüberganges in zwei und mehr Dimensionen sowie scharfe Abschätzungen an die kritische Temperatur zu beweisen. Zur Behandlung nicht-symmetrischer Modelle, wozu insbesondere Modelle mit Unordnung zählen, genügen Peierls-Argumente jedoch nicht, sondern es ist hier vonnöten, konvergente Cluster-Entwicklungen zur Verfügung zu haben. In dieser Richtung wurde im vergangenen Jahr intensiv mit M. Zahradník gearbeitet. In der ersten Phase, die kurz vor dem Abschluß steht, soll hier eine allgemeine Version der Pirogov-Sinai Theorie entwickelt werden, die für Modelle mit schwacher, aber langreichweitiger Wechselwirkung anwendbar ist. Die wesentliche Idee hierbei ist eine gleichzeitige Verwendung von Hoch- und Tieftemperaturentwicklungen.

Unabhängig von diesem Programm wurde in [4] die Hochtemperaturphase eines Spin-Glas-Modells vom Kac-Typ untersucht. Hier ging es darum zu verstehen, inwieweit die Molekularfeldmodelle auch in echten Spin-Gläsern die Asymptotik langreichweitiger Gitter-Modelle wiedergeben. Für Temperaturen oberhalb der kritischen Temperatur konnte dies in dem Sinne bestätigt werden, daß die freie Energie sowie deren Fluktuationen gegen diejenigen des Molekularfeldmodelles konvergieren. Die Beweise verwenden Methoden der stochastischen Analysis.

Literatur

1. A. BOVIER, V. GAYRARD, P. PICCO, *Distribution of overlap profiles in the one-dimensional Kac-Hopfield model*, Commun. Math. Phys., **186** (1997), pp. 323-379.

2. A. BOVIER, V. GAYRARD, P. PICCO, *Typical profiles of the Kac-Hopfield model*, in: „Mathematical aspects of spin glasses and neural networks“(A. Bovier, P. Picco, eds.), Progr. Probab., **41**, pp. 187-243, Birkhäuser, Boston-Basel-Berlin, 1997.

3. A. BOVIER, M. ZAHRADNÍK, *The low-temperature phase of Kac-Ising models*, J. Statist. Phys., **87** (1997), pp. 311-332.

4. A. BOVIER, *The Kac version of the Sherrington-Kirkpatrick model at high temperatures*, WIAS-Preprint No. 348 (1997), erscheint in: J. Stat. Phys. (1998).

Spin-Gläser und Neuronale Netze

Bearbeiter: A. Bovier

Kooperation: V. Gayrard (CNRS, Marseille)

Förderung: EU

Eine ausführliche Darstellung der Fragestellungen, denen wir uns in diesem Projekt widmen, wurde im Jahresbericht 1994 gegeben. Ein umfangreicher Übersichtsartikel ist soeben erschienen [1], eine elementarere Zusammenfassung ist in [2] zu finden.
In der Untersuchung des Standard-Hopfield-Modells wurde in diesem Jahr ein vorläufiger Abschluß erreicht. Insbesondere wurde im sogenannten „Replika-symmetrischen" Bereich der Parameter α und β ein einfacher, auf Konvexitätseigenschaften beruhender Beweis der mit Hilfe des heuristischen „Replika-Tricks" erhaltenen Resultate gegeben. Darüber hinaus konnten die Gibbs Maße explizit im Sinne des von Newman entwickelten „Metastate"-Formalismus [2] konstruiert werden [3]. Dabei zeigt sich bereits eine äußerst komplizierte asymptotische Volumenabhängigkeit der Gibbs Maße: gesteuert von einem stochastischen Prozeß mit Werten in $\mathbb{R}^{\mathbb{N}}$ durchläuft es den gesamten Raum der Produktmaße auf $\{-1,1\}^{\mathbb{N}}$. Aufgrund heuristischer Resultate erwartet man für größere Werte von α ein noch komplizierteres Verhalten, indem auch komplexe Mischungen von Produktmaßen relevant werden. Ein rigoroses Verständnis dieser Phänomene scheint derzeit noch nicht erreichbar zu sein.

Literatur

1. A. BOVIER, V. GAYRARD, *Hopfield models as generalized random mean-field models*, in: „Mathematical aspects of spin glasses and neural networks"(A. Bovier, P. Picco, eds.), Progr. Probab., **41**, pp. 3-91, Birkhäuser, Boston-Basel-Berlin, 1997.

2. A. BOVIER, V. GAYRARD, *Statistical mechanics of neural networks: The Hopfield model and the Kac-Hopfield model*, Markov Proc. Related Fields, **3** (1997), pp. 393–423.

3. C. M. NEWMAN, D. L. STEIN, *Thermodynamic chaos and the structure for short-range spin glasses*, in: „Mathematical Aspects of spin glasses and neural networks"(A. Bovier, P. Picco, eds.), Progr. Probab., **41**, pp. 187-243, Birkhäuser, Boston-Basel-Berlin, 1997.

4. A. BOVIER, V. GAYRARD, *Metastates in the Hopfield model in the replica symmetric regime*, WIAS-Preprint No. 341 (1997), erscheint in: Math. Phys., Anal., Geom. (1998).

Katalytische Verzweigungsstrukturen

Bearbeiter: K. Fleischmann

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

Eine ausführliche Beschreibung der Motivation für dieses Forschungsgebiet wurde im Jahresforschungsbericht 1995, S. 133, gegeben. Im Mittelpunkt der Tätigkeit in diesem Berichtsjahr stand die vertiefte Untersuchung der *stetigen Super-Brownschen Bewegung X^ρ in einem Super-Brownschen Medium ρ* ([1]). Dies beschreibt eine Population von Teilchen, die sich im R^d chaotisch bewegen und kritisch binär verzweigen. Die Verzweigung ist nur in Gegenwart von *Katalysatoren* möglich, die sich selbst auch chaotisch bewegen und kritisch binär verzweigen. Die Abbildung zeigt eine zweidimensionale Simulation.
In diesem Jahr stand die Untersuchung der *lokalen Struktur* dieser katalytischen Super-Brownschen Bewegung X^ρ im Mittelpunkt der Untersuchungen. Es wurde nachgewiesen ([5]), daß in den Dimensionen 2 und 3 außerhalb des Katalysators (der sich in Lebesgue Nullmengen befindet) die Populationen *glatte Dichten* besitzen, welche die Wärmeleitungsgleichung lösen. In der kritischen Dimension 2 folgt dann mit Selbstähnlichkeitsargumenten, daß im lokalen Langzeitverhalten *Konvergenz* gegen eine gleichmäßig verteilte Grenzpopulation X^ρ_∞ mit zufälliger Intensität unendlicher Erwartung stattfindet, im Unterschied zur Dimension 3, [2]. (Persistenz war bereits im Vorjahr gezeigt worden, [4].)
Eine weitere Aktivität bestand darin, das Langzeitverhalten *markierter Teilchensysteme* zu untersuchen ([6]; DFG-Unterstützung: 436 RUS 17/112/96). Dies ist eng verbunden mit dem Studium von L^1-Normen von (nicht-negativen) Lösungen von *Reaktions-Diffusions-Systemen.* Eine Dichotomie bezüglich lokalem Sterben und Überleben wurde unter ziemlich allgemeinen, natürlichen Bedingungen nachgewiesen.
Schließlich wurde eine Arbeit zur *allgemeinen Strukturtheorie* von Superprozessen vollendet ([3]).

Literatur

1. D. A. DAWSON, K. FLEISCHMANN, *A continuous super-Brownian motion in a super-Brownian medium*, J. Theoret. Probab., **10(1)** (1997), pp. 213–276.

2. D. A. DAWSON, K. FLEISCHMANN, *Longtime behavior of a branching process controlled by branching catalysts*, Stochastic Process. Appl., **71(2)** (1997), pp. 241–257.

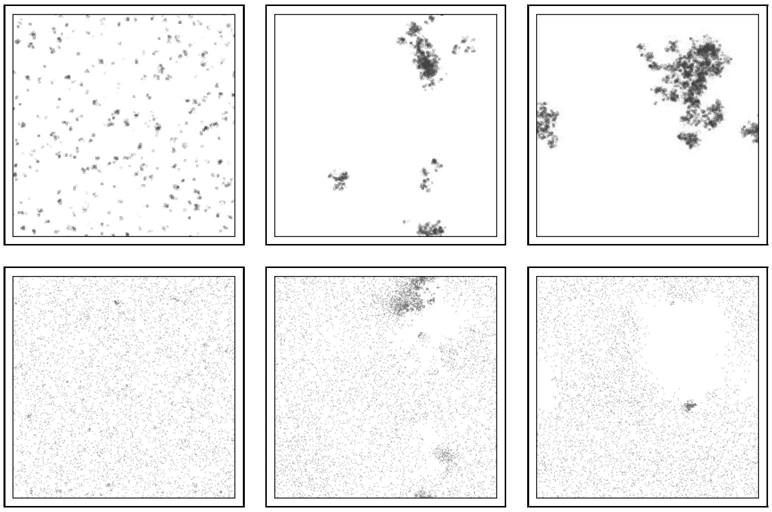
3. D. A. DAWSON, K. FLEISCHMANN, G. LEDUC. *Continuous dependence of a class of superprocesses on branching parameters, and applications*, WIAS-Preprint No. 317 (1997), eingereicht bei: Ann. Probab.

4. A. M. ETHERIDGE, K. FLEISCHMANN. *Persistence of a two-dimensional super-Brownian motion in a catalytic medium*, WIAS-Preprint No. 277 (1996), erscheint in: Probab. Theory Related Fields, **110(1)** (1998).

5. K. FLEISCHMANN, A. KLENKE. *Smooth density field of catalytic super-Brownian motion*, WIAS-Preprint No. 331 (1997), eingereicht bei: Ann. Appl. Probab.

6. K. FLEISCHMANN, V. A. VATUTIN, *Long-term behavior of a critical multitype spatially homogeneous branching particle process and a related reaction-diffusion system*, WIAS-Preprint No. 350 (1997).

Simulation of the catalyst ρ and the reactant X^ρ



$t = 5$ $\qquad$ $t = 900$ $\qquad$ $t = 3500$

The first row shows a discrete version of ρ (critical binary branching simple random walk) on a 250×250 grid with periodic boundaries, originally started from a "uniformly" distributed field. The number of particles per site is indicated by different grey scales. The "movie" clearly exhibits the well-known tendency of clustering in $d = 2$.

The second sequence of pictures shows a simulation of the analogous discrete version of X^ρ, for the same realization of the branching rate ρ. The figure illustrates that the reactant X^ρ is uniformly spread out outside the catalytic clusters, except a few "hot spots" related to the catalyst, and that within the catalytic clumps mainly killing of the reactant happens.

Phasentrennung und kristalline Gleichgewichtsformen

Bearbeiter: D. Ioffe

Kooperation: J.-D. Deuschel (TU Berlin), G. Giacomin (Universität Zürich), O. Hryniv (z. Zt. WIAS), Ch.-E. Pfister (EPF Lausanne), R. S. Schonmann (UCLA, Los Angeles)

Die sogenannte Wulff-Konstruktion liefert eine phänomenologische Beschreibung der Gleichgewichtsformen von Kristallen als diejenige mit der geringsten Oberflächenenergie zwischen dem Kristall und dem ihn umgebenden Dampf. Die entsprechende mathematische Problemstellung ist eine Verallgemeinerung des klassischen isoperimetrischen Problems. Schon auf dieser makroskopischen Ebene ist die zugrundeliegende Theorie bei weitem nicht trivial [2]. Eine weitaus schwierigere Herausforderung ist es, eine umfassende rein statistisch mechanische Theorie zu entwickeln, die den „Wulff-shape“ direkt aus der Struktur der mikroskopischen Wechselwirkungen zwischen den Molekülen heraus bestimmt. Viele Jahre lang wurde dieses Problem als äußerst kompliziert angesehen und konnte selbst im Kontext der einfachsten zweidimensionalen Modelle der statistischen Mechanik, wie z. B. eines Ising-Modells oder einer Bernoulli-Perkolation, nicht gelöst werden. Ein Durchbruch kam Ende der 80er Jahre mit dem wegweisenden Buch [4], in dem das Problem für Ising-Kristalle mit ebener Oberfläche bei sehr niedrigen Temperaturen rigoros gelöst wurde. Die Hauptprobleme, mit denen sich die Dobrushin–Kotecký–Shlosman-Theorie (DKS) auseinandersetzte, waren die Statistik fluktuierender Phasengrenzen und Grenzeigenschaften reiner Phasen. Auf ihrem Weg zur Lösung der Probleme stützten sich die Autoren von [4] in besonderem Maße sowohl auf perturbative Techniken, die durch die Annahme einer tiefen Temperatur ermöglicht wurden, als auch auf die spezifische Geometrie zweidimensionaler zufälliger Felder.

Das Hauptziel des vorliegenden Projektes ist die Entwicklung einer Theorie, die über diese Beschränkungen hinausgeht. In [7] wurde erstmalig ein umfassendes Gegenstück zur DKS-Theorie für ebene Ising-Ferromagneten im Sinne von DKS für unterkritische Temperaturen entwickelt. Ein nicht-perturbativer Ansatz zum Studium der fluktuierenden Phasengrenzen wird in [6] geliefert und soll in [5] substantiell für den Kontext selbstvermeidender Irrfahrten und Vielecke vertieft werden. Höherdimensionale Probleme der Phasentrennung und der Tröpfchenkondensation betrachteten wir zuerst in [1] und danach in [3], wo makroskopische kristalline Gleichgewichtsformen des Typs für eine Klasse von SOS („solid-on-solid“) Modellen mit konvexen Interaktionspotentialen beschrieben werden sollen.

Literatur

1. E. Bolthausen, D. Ioffe, *Harmonic crystall on the wall: A microscopic approach*, Comm. Math. Phys., **187** (1997), pp. 323-566.

2. J. E. Brothers, F. Morgan, *The isoperimetric theorem for generalized integrands*, Michigan Math. J., **41** (1994), pp. 419–431.

3. J.-D. Deuschel, G. Giacomin, D. Ioffe, *Multidimensional sample path LD principle and related non-Gaussian droplet construction*, in Vorbereitung.

4. R. L. Dobrushin, R. Kotecký, S. Shlosman, *Wulff Construction: a Global Shape from Local Interactions*, AMS translation ser., Vol. **104** (1992).

5. O. Hryniv, D. Ioffe, *On the number of self-avoiding polygons*, in Vorbereitung.

6. D. Ioffe, Ch.-E. Pfister, *Ornstein–Zernike behaviour and analyticity of shapes for self-avoiding walks on* $\mathbf{Z}^d$, in Vorbereitung.

7. D. Ioffe, R. S. Schonmann, *Dobrushin–Kotecký*–Shlosman theorem up to the critical temperature I, WIAS-Preprint No. 355 (1997), eingereicht bei: Comm. Math. Phys.

Elektronentransport in ungeordneten Materialien

Bearbeiter: A. Liemant

Kooperation: L. Brehmer (Universität Potsdam)

In Zusammenarbeit mit L. Brehmer von der Universität Potsdam wurden die Untersuchungen zum Hoppingtransport von Ladungsträgern in ungeordneten Materialien weiter betrieben. Die Ladungsträger springen auf einem ungeordneten Gitter von räumlich und energetisch lokalisierten Zuständen (x,E) gemäß einer Hoppingrate

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

unter Berücksichtigung des Pauliprinzips. $x'(x)$ bezeichnet die mikroskopische (makroskopische) 3-dimensionale Ortskoordinate mit $x = \varepsilon x'$. Der Ansatz für die Hoppingrate ist recht allgemein. Es wird lediglich gefordert, daß die Sprungweiten hinreichend klein sind (endliches zweites Moment)

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

und die Hoppingrate s einer detaillierten Gleichgewichtsbedingung

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

genügt. Eine strenge mathematische Theorie zur Behandlung einer solchen komplexen mikroskopischen Transportdynamik existiert gegenwärtig nicht. Wir vereinfachen, indem wir die Dynamik mittels einer (mean field) Hoppingratengleichung für die 1-Partikel Verteilungsfunktion beschreiben. Dies ermöglicht es zum einen, auf einer makroskopischen Raumskala zusätzlich Inhomogenitäten für die Materialcharakteristiken (dies sind die räumliche und energetische Zustandsdichte N und $g(E)$ und die Hoppingrate w) zu berücksichtigen. Zum anderen ist es möglich, eine makroskopische Drift-Diffusionsgleichung für die Ladungsdichte $\rho_t(x)$ zu gewinnen,

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho_t(x)}{\partial t} =& \nabla\cdot\big[D(x,h_t(x))\,\nabla\rho_t(x) - \sigma^N(x,h_t(x))\,\nabla N(x) - \\ & \sigma^\Theta(x,h_t(x))\,\nabla\Theta(x) + \sigma^\psi(x,h_t(x))\,\nabla\psi(x)\big],\end{aligned}$$

wobei $h_t(x) = \rho_t(x)/eN(x)$ die relative Ladungsdichte bezeichnet.
Die Gradienten der räumlichen Zustandsdichte N, des Parameters Θ der Energiezustandsdichte $g_\Theta(E)$ und einer Potentialfunktion ψ verursachen Driftströme. Der Diffusionskoeffizient D und die Leitfähigkeiten σ^N, σ^Θ und σ^ψ hängen explizit von den räumlich inhomogenen Materialcharakteristiken ab, wobei D und σ^ψ einer verallgemeinerten Einsteinrelation genügen. Die zentrale Größe ist die elektrische Leitfähigkeit

$$\sigma^\psi(x,h) = \frac{S_2'\, e^2\,(N(x))^2}{6kT} \iint \frac{s(x,E;x,Q)\, g_{\Theta(x)}(E)\, g_{\Theta(x)}(Q)\, dE\, dQ}{(1+\exp[(E-\zeta(x,h))/kT])(1+\exp[(\zeta x(,h)-Q)/kT])}$$

(e Elementarladung, k Boltzmannkonstante, T absolute Temperatur).

Literatur

1. A. LIEMANT, *A drift-diffusion equation for charge transport in inhomogeneous materials*, WIAS-Preprint No. 384 (1997).

Stochastische Teilchensysteme und Approximation der Boltzmann-Gleichung

Bearbeiter: W. Wagner

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

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

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

mit

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

Hier beschreibt die Funktion $f(t,x,v)$ die Konzentration von Teilchen mit der Geschwindigkeit v am Ort x zur Zeit t. Die Gleichung (1) besitzt eine quadratische Nichtlinearität, die sich aus der paarweisen elementaren Wechselwirkung ergibt. Diese besteht darin, daß bei der „Kollision“ zweier Teilchen sich ihre Geschwindigkeiten entsprechend (2) ändern, wobei $\mathcal{S}^2$ die Einheitssphäre ist und B der Kollisionskern genannt wird.
Auf Grund der hohen Dimension (f ist eine Funktion von sieben Veränderlichen) spielen stochastische Teilchensysteme nicht nur bei der theoretischen Fundierung, sondern insbesondere bei der numerischen Behandlung der Gleichung (1) eine entscheidende Rolle. Stochastische Partikelverfahren beruhen auf der Modellierung eines geeigneten großen ($n \sim 10^6 - 10^7$) Systems von Simulationsteilchen

$$\Big(x_i(t), v_i(t)\Big), \quad i = 1, \ldots, n, \quad t \geq 0, \tag{3}$$

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. Bei der numerischen Behandlung kinetischer Gleichungen mittels stochastischer Partikelverfahren treten Fluktuationen auf, d. h. die zu berechnenden Werte werden durch zufällige Schwankungen überlagert. Deshalb besteht in vielen Anwendungsbereichen, wie z. B. bei der Berechnung makroskopischer Größen hinter einem umströmten Körper, ein wichtiges Problem in der Konstruktion von Verfahren mit reduzierten Fluktuationen.
Für die Boltzmann-Gleichung (1) wurde in den Arbeiten [1], [2] ein neuer Zugang zu diesem Problem der Varianzreduktion entwickelt. Er basiert auf der Benutzung eines Systems von Teilchen mit variablen Gewichten, wobei die elementare Wechselwirkung in der Abspaltung von neuen Teilchen mit entsprechend (2) gewählten Geschwindigkeiten besteht und somit auch die Teilchenanzahl variabel ist. Der neue Algorithmus beinhaltet das klassische DSMC-Verfahren („direct simulation Monte Carlo“) als Spezialfall und ermöglicht eine künstliche Steuerung des

Teilchenstromes und somit eine gezielte Beeinflussung der Varianz in bestimmten Bereichen des Rechengebiets.
In der Arbeit [3] wurden verschiedene Algorithmen zur Reduktion der Teilchenanzahl untersucht. Diese Methoden erlauben es, die relevanten makroskopischen Momente (mittlere Geschwindigkeit, Temperatur, Wärmefluß) zu erhalten. Es wurden einerseits verschiedene theoretische Abschätzungen des Approximationsfehlers, d. h. des Abstandes zwischen ursprünglichem und reduziertem Systems, angegeben. Andererseits wurde anhand numerischer Testrechnungen gezeigt, daß die Reduktionsalgorithmen auch bei häufiger Anwendung keinen negativen Effekt auf die Qualität der numerischen Lösung haben.
Eine weitere wichtige Komponente der stochastischen Partikelverfahren für die Boltzmann-Gleichung ist der sogenannte Zeitzählmechanismus, durch welchen die auf einem gegebenen Zeitintervall notwendige Anzahl von Kollisionen bestimmt wird. In der Arbeit [4] wurden für das DSMC-Verfahren verschiedene neue Zeitzählmechanismen entwickelt und numerisch getestet. Sie bewirken eine stabilere Arbeit des Verfahrens in Situationen, in denen sogenannte „seltene" Ereignisse (z. B. ein einzelnes Teilchen mit sehr hoher Geschwindigkeit) eine Rolle spielen. Insofern ordnen sich auch diese Ergebnisse in das oben beschriebene Problem der Varianzreduktion ein.

Literatur

1. S. RJASANOW, W. WAGNER, *A stochastic weighted particle method for the Boltzmann equation*, J. Comput. Phys., **124** (1996), no. 2, pp. 243–253.

2. S. RJASANOW, W. WAGNER, *Numerical study of a stochastic weighted particle method for a model kinetic equation*, J. Comput. Phys., **128** (1996), no. 1, pp. 351-362.

3. S. RJASANOW, T. SCHREIBER, W. WAGNER, *Reduction of the number of particles in the stochastic weighted particle method for the Boltzmann equation*, WIAS-Preprint No. 320 (1997).

4. S. RJASANOW, W. WAGNER, *On time counting procedures in the DSMC method for rarefied gases*, WIAS-Preprint No. 349(1997).

Stochastische Partikelsysteme als numerische Verfahren für Probleme der Aerosoldynamik

Bearbeiter: A. Eibeck, W. Wagner

Kooperation: H. Babovsky (TU Ilmenau), K. Sabelfeld (Institut für Numerische Mathematik, Novosibirsk, und WIAS), A. Kolodko (Institut für Numerische Mathematik, Novosibirsk)

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

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

$$\frac{\partial}{\partial t} f_l(t,x) + (V, \nabla_x) f_l(t,x) = \tag{1}$$

$$D\Delta_x f_l(t,x) + \frac{1}{2} \sum_{i+j=l} K_{i,j} f_i(t,x) f_j(t,x) - f_l(t,x) \sum_{i=1}^{\infty} K_{l,i} f_i(t,x) + F_l(t,x)$$

benutzt. Die Lösung $f_l(t,x)$ entspricht der Konzentration von Teilchen der Größe $l = 1,2,\dots$ am Ort x zur Zeit t. Weiterhin bezeichnet V die Geschwindigkeit des Trägermediums, D den Diffusionskoeffizienten und $F_l(t,x)$ einen Quellterm für Teilchen der Größe l.

Die Bearbeitung dieses Projekts wurde neu begonnen. Zielstellung ist die Weiterentwicklung, Testung und theoretische Fundierung stochastischer Algorithmen zur numerischen Behandlung der Smoluchowski-Gleichung (1). In der Arbeit [2] wurde für ein bisher auf heuristischer Basis benutztes Verfahren (siehe [1]) die Konvergenz für wachsende Teilchenanzahl gegen die Lösung einer diskretisierten Version der Gleichung (1) gezeigt. In numerischen Testrechnungen wurde die Abhängigkeit des Verfahrens von verschiedenen Parametern (Zeitdiskretisierung, Teilchenzahl) untersucht.

Literatur

1. K. K. Sabelfeld, S. V. Rogazinskii, A. A. Kolodko, A. I. Levykin, *Stochastic algorithms for solving Smoluchowski coagulation equation and applications to aerosol growth simulation*, Monte Carlo Methods Appl., **2(1)** (1996), pp. 41–87.

2. A. A. Kolodko, W. Wagner, *Convergence of a Nanbu type method for the Smoluchowski equation*, Monte Carlo Methods Appl., **3(4)** (1997), pp. 255-273.

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 wirkt an interdisziplinären Anwendungsprojekten mit und entwickelt effiziente und problemorientierte Software.
Nichtparametrische statistische Verfahren haben sich in der Vergangenheit als sehr erfolgreich bei der stochastischen Modellierung in Wirtschafts- und Ingenieurwissenschaften erwiesen. Sie werden daher derzeit intensiv untersucht. Auch *stochastische numerische Verfahren* sind Gegenstand weltweiter Forschungen; Monte-Carlo-Methoden werden 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

- Data Mining und Klassifikation als Hilfsmittel beim Kredit–Scoring,
- Stochastische Modelle für Partikelverhalten in turbulenten Strömungen,
- Signalverarbeitung in Magnetresonanz- und Ultraschalltomografie,
- Statistische Verfahren für Ökonometrie und Finanzmathematik.

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

4.6.2 Projekte

Data Mining Software Clementine: Dendrogramme

Bearbeiter: H.-J. Mucha, J. Fuhrmann (FG 3), F. Huth (Technische Universität Berlin)

Kooperation: U. Grimmer (Forschungszentrum Daimler Benz AG, Ulm)

Zur Suche nach Strukturen und Anomalien in umfangreichen Datensammlungen können effektive Techniken der Clusteranalyse (automatische Klassifikation) eingesetzt werden. Zum besseren Verständnis von Daten und/oder Klassifikationsergebnissen können mehrdimensionale Dichteschätzungen hilfreich und bestens geeignet sein. Geeignet deshalb, weil bei Massendaten die Bedeutung eines einzelnen Objektes (Punktes im hochdimensionalen Raum) gegen Null geht und die üblichen Punkte-Plots schwer lesbar und auch rechentechnisch uneffektiv werden. Im allgemeinen werden der nichtparametrischen Dichteschätzung geeignete Projektionstechniken vorangestellt, die möglichst viele Informationen des hochdimensionalen Beobachtungsraumes in einen niedrigdimensionalen Unterraum abbilden. Die adaptive Clusteranalyse kann die zur Struktursuche geeigneten Projektionsparameter berechnen.
Dendrogramme sind anschauliche graphische Darstellungen der Ergebnisse hierarchischer Clusteranalysen. Ziel des Projektes war es, eine rechentechnisch effiziente graphische Darstellung von Baumstrukturen zu realisieren, die interaktive Aktionen mit 3D-Dendrogrammen auch im Falle umfangreicher Datenmengen ausführen kann.

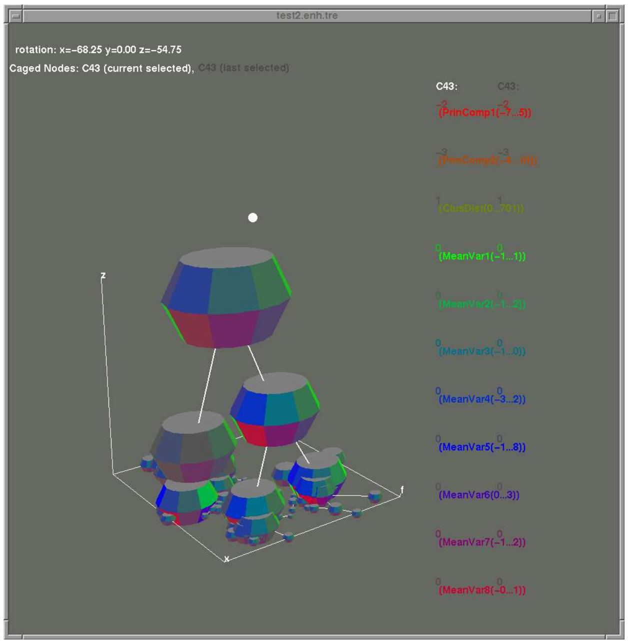


Abb. 1: 3D-Dendrogramm mit Clusterstatistik

Die Software wurde auf der Grundlage der OpenGL-basierten Toolbox gltools des WIAS entwickelt. Es können nichtparametrische Dichteschätzungen von unklassifizierten oder gruppierten Daten angezeigt werden. Interaktive Aktionen wie z. B. Drehungen und intuitive Bedienungsweisen erlauben eine schnelle Information des Benutzers über die Konturen der Punktwolken. Bei 3D-Dendrogrammen können die statistischen Kennwerte der Knoten (Cluster, Klassen) zusätzlich graphisch veranschaulicht werden. Damit können die Cluster auf einen Blick charakterisiert und Auffälligkeiten im Datenmaterial erkannt werden.

Literatur

1. U. GRIMMER, *Clementine: Data Mining Software,* in: *Classification and Multivariate Graphics: Models, Software and Applications,* WIAS-Report No. 10 (H.-J. Mucha, H. H. Bock, eds.), Berlin, 1996, pp. 25–31.

2. H.-J. MUCHA, *ClusCorr: Cluster Analysis and Multivariate Graphics under MS EXCEL,* in: *Classification and Multivariate Graphics: Models, Software and Applications.* WIAS-Report No. 10, (H.-J. Mucha, H. H. Bock, eds.), Berlin, 1996, pp. 97–105.

3. G. REINHARDT UND F.-K. HÜBNER, *Partitionierende Clusteranalzse mit AVS,* in: *Classification and Multivariate Graphics: Models, Software and Applications.* WIAS-Report No. 10 (H.-J. Mucha, H. H. Bock, eds.), Berlin, 1996, pp. 5–13.

Adaptive Verfahren der Bildverarbeitung

Bearbeiter: J. Polzehl, V. Spokoiny

Kooperation: F. Kruggel (Max-Planck-Institut für Kognitive Neurowissenschaften, Leipzig), F. Godtliebsen (Universität Tromsø, Norwegen)

Moderne Untersuchungsmethoden in Technik, Medizin, Umweltschutz, Meteorologie und Geologie liefern vielfach Daten in Form von zwei- und dreidimensionalen Bildern. Beispiele solcher Verfahren sind Satellitenaufnahmen, Radar, Röntgenverfahren, Ultraschall- und Magnet-Resonanz (MR)-Aufnahmen.
In der Regel sind die gewonnenen Daten fehlerbehaftet; es entsteht das Problem, aus den beobachteten Bildern die wesentliche, zugrundeliegende Struktur herauszufiltern. Diese Aufgabenstellung ist von vielen Autoren unter Nutzung verschiedener statistischer Modellansätze für verschiedene spezifische Anforderungen an das rekonstruierte Bild untersucht worden (siehe z. B. [2] für eine Auswahl von Verfahren im Kontext der Analyse von Magnet-Resonanz-Aufnahmen).
Ziele der Rekonstruktion sind z. B. ein Entrauschen der Bilder, das Finden homogener Bereiche und die Verstärkung von Kontrasten. Alternative Ziele können in der Klassifikation von Bildern (oder Teilen von Bildern) oder in der Analyse zeitlicher Veränderungen bei Folgen von Bildern bestehen.
Im Rahmen des Projektes wird ein neuartiges lokal adaptives Glättungsverfahren entwickelt, das über in diesem Kontext besonders wünschenswerte Eigenschaften wie Erhaltung von Ecken und Kanten (Kontrast) und „optimale“ Reduktion des Rauschens verfügt. Wir betrachten das folgende Regressionsmodell

$$Y = f(x) + \varepsilon$$

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

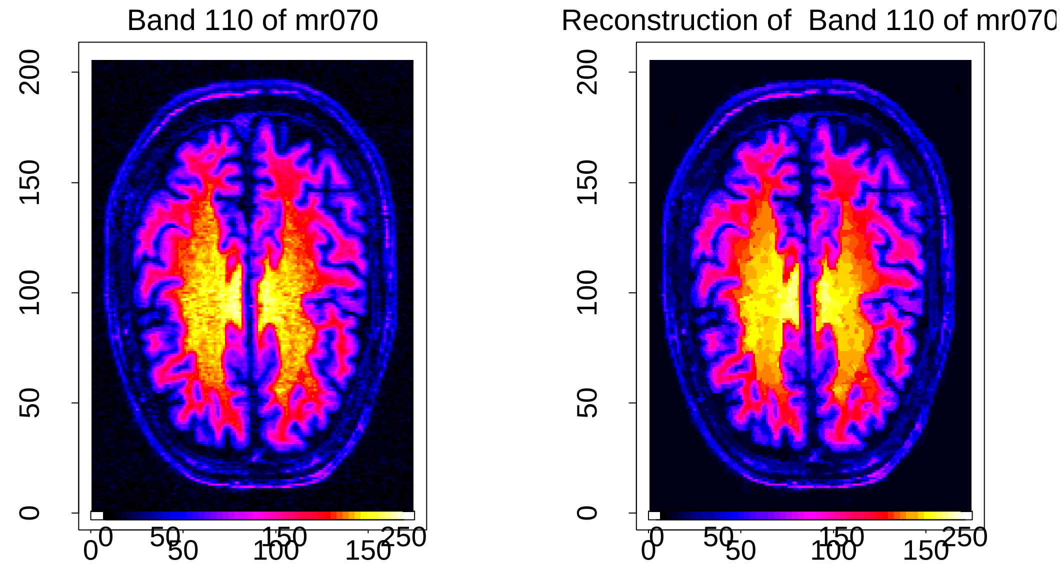


Abb. 1: Original und Rekonstruktion einer Schicht einer 3-dimensionalen MRI-Aufnahme

Bild 1 zeigt die Originaldaten und eine Rekonstruktion einer Schicht einer 3-dimensionalen MRI-Aufnahme (250 x 192 x 250 voxel).

Literatur

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

2. F. GODTLIEBSEN, E. SPJØTVOLL, J. S. MARRON, *A nonlinear Gaussian filter applied to images with discontinuities,* erscheint in: J. Nonparametr. Statist.

Stochastische Modelle und Monte-Carlo-Methoden für Nukleation, Koagulation und Transport von Partikeln in turbulenten Strömungen

Bearbeiter: K. Sabelfeld

Kooperation: S. Orszag, (Princeton University, USA), T. Vesala (Helsinki University, Finnland), O. Kurbanmuradov (Turkmenische Akademie der Wissenschaften, Aschchabad), I. A. Shalimova (Russische Akademie der Wissenschaften, Novosibirsk)

Die Untersuchung des turbulenten Transports von reagierenden Wirkstoffen und Brennprozessen stellt eine große theoretische und experimentelle Herausforderung dar (vgl. [12]). Bei der mathematischen Erfassung sind stochastische Modelle von besonderer Bedeutung, da die Wahrscheinlichkeitstheorie eine natürliche Beschreibung von Mischungen und Reaktionen kleiner Partikel in turbulenten Strömungen liefert (vgl. [4] und [1]). Schwerpunkt des Projekts ist die Untersuchung von Nukleation, Transformation und Transport von Aerosol-Partikeln in einer realistischen Umwelt (z. B. turbulente Atmosphäre, Wasser und Boden).
Solche Medien sind charakterisiert durch hohe Fluktuationen der physikalischen Felder. Hierbei ändern sich die zeitlichen und räumlichen Maßstäbe enorm. Dies ist die Ursache aller Schwierigkeiten bei der Benutzung konventioneller deterministischer Methoden, die auf der halbempirischen Gleichung des turbulenten Transports basieren. Deshalb ist die stochastische Betrachtungsweise, die die Natur der Fluktuationen effektiv beschreibt, von besonderem Interesse.
Die untersuchten Prozesse werden durch Randwertprobleme mit stochastischen Parametern für lineare und nichtlineare partielle Differentialgleichungen beschrieben. Es wurden stochastische Modelle benutzt, die sowohl den Itô-Typ stochastischer Differentialgleichungen als auch Systeme von gewöhnlichen Differentialgleichungen mit zufälligen Parametern umfassen (vgl. [6], [3]).
Die stochastischen Algorithmen basieren auf neuen Eulerschen und Lagrangeschen Modellen, die die Bewegung der Partikel in turbulenten und porösen Medien beschreiben und auf probabilistischen Darstellungen der Lösungen der Smoluchowski–Koagulations-Gleichung beruhen (s. [10]).
Die Forschungen zu Aerosol-Formungs-Prozessen erfassen eine Vielfalt von Phänomenen und Anwendungen in Physik, Chemie, Biologie, Medizin und Aerosol-Wissenschaft in der Atmosphäre. Beispiele sind die Berechnung der Nukleationsrate in den Wasser–Säure-Systemen (s. [13]) (ein Schwerpunkt in der Smog-Forschung), Koagulations-Prozesse im Aerosol-Reaktor für die Produktion von Kunststoffen und moderne Aerosol-Technologie für die Landwirtschaft (vgl. [2], [12], [9]). Im Prinzip kann jede Inhomogenität im Gas zu Differenzen in den Geschwindigkeiten der Partikel führen. Dann ist die relative Geschwindigkeit zwischen zwei Partikeln positiv, und es findet eine Kollision und vermutlich Koagulation statt. Folgende Phänomene führen zur Koagulation (s. [12], [9]): Brownsche Bewegung, Gravitationsfall, freie molekulare Kollision, turbulente Bewegung der tragenden Strömung, akkustische Wellen, Gradienten der Dichte, der Konzentration und der Temperatur, elektrische Ladungen und weitere.
Die einfachste inhomogene Form der Smoluchowski-Gleichung ist (s. [10]):

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

wobei $n^E(t,x) = \left\{n_i^E(t,x)\right\}_{i=1}^{\infty}$,

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

und $v(t,x)$ ein stochastisch simulierender Geschwindigkeitsvektor mit gegebener Verteilung ist. Falls die Koagulation in einer turbulenten Strömung betrachtet wird, ist die Abschätzung der Partikelentwicklung ein sehr schwieriges und auch noch nicht gelöstes Problem. Mathematisch kann man dieses Problem durch Smoluchowski-Gleichungen mit zufälligen Koeffizienten beschreiben (s. [8]).
Folgende Zielstellungen wurden verfolgt:

- Entwicklung neuer stochastischer Algorithmen für die numerische Lösung von partiellen und gewöhnlichen Differentialgleichungen mit zufälligen Parametern. Diese Algorithmen basieren auf neuen lokalen Integralgleichungen (sphärischer Mittelwert) und dem „Double Randomization“-Prinzip , s. [7];

- Entwicklung und Analyse stochastischer Methoden für die numerische Simulation der inhomogenen Eulerschen turbulenten Geschwindigkeitsfelder für verschiedene „Atmospheric Stratifications“, s. [3];

- Untersuchung neuer Lagrangescher stochastischer Zweipartikelmodelle für voll entwickelte Turbulenz, s. [3];

- Anwendung Eulerscher und Lagrangescher stochastischer Modelle zur Simulation des Transports von Aerosolpartikeln in turbulenter Atmosphäre (vgl. [6], [3]);

- Aufbau und Untersuchung stochastischer Algorithmen für die Lösung der inhomogenen Smoluchowski-Gleichungen mit Anwendungen in der Numerik der Nukleation und Koagulation von Partikeln verschiedener Werkstoffe (vgl. [8], [11], [13]).

Literatur

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

2. K. P. KOUTZENOGII, A. I. LEVYKIN, K. K. SABELFELD, *Numerical simulation of the kinetics of aerosol formation in the free molecular collision regime,* Journal of Aerosol Science, **27** (1996), No. 5, pp. 665–679.

3. O. KURBANMURADOV, K. K. SABELFELD, D. KOLUHIN, *Stochastic Lagrangian models for two-particle motion in turbulent flows. Numerical results,* Monte Carlo Methods and Appl., **3** (1997), No. 3, pp. 199–223.

4. A. S. MONIN, A. M. YAGLOM, *Statistical Fluid Mechanics,* M. I. T. Press, Cambridge, **2** (1975).

5. K. K. SABELFELD, *Monte Carlo Methods in Boundary Value Problems,* Springer Verlag, Berlin (1991), p. 283.

6. K. K. SABELFELD, O. KURBANMURADOV, *Stochastic Lagrangian models for two-particle motion in turbulent flows,* Monte Carlo Methods and Appl., **3** (1997), No. 1, pp. 53–72.

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

8. K. K. SABELFELD, A. A. KOLODKO, *Monte Carlo simulation of the coagulation processes governed by Smoluchovsky equation with random coefficients,* Monte Carlo Methods and Appl., **3** (1997), No. 4, pp. 275–310.

9. P. SAFFMAN, J. S. TURNER, *On the collision of drops in turbulent clouds*, J. Fluid Mech., **1** (1956), pp. 16–30.

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

11. A. A. KOLODKO, W. WAGNER, *Convergence of a Nanbu type method for the Smoluchowski equation,* Monte Carlo Methods and Appl., **3** (1997), No. 4.

12. M. M. R. WILLIAMS, S. K. LOYALKA, *Aerosol Science. Theory and Practice*, Pergamon, New York, 1991.

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

Diskretisierung von Attraktoren in zufälligen dynamischen Systemen

Bearbeiter: P. E. Kloeden

Kooperation: B. Schmalfuß (Fachhochschule Merseburg), S. Shott, D. Stonier (Doktoranden, Deakin University, Geelong, Australien)

Als Numerische Dynamik wird neuerdings das Gebiet der Forschungen zur Diskretisierung dynamischer Systeme bezeichnet, speziell zur Reproduktion dynamischen Verhaltens in diskretisierten dynamischen Systemen, die durch Anwendung eines numerischen Verfahrens wie z. B. des Runge–Kutta-Verfahrens entstehen. Die meisten Ergebnisse betreffen bis jetzt deterministische Systeme, die durch autonome gewöhnliche Differentialgleichungen erzeugt werden, wie z. B. das Resultat in [6] über die Diskretisierung beliebig geformter Attraktoren. Bis jetzt sind nur wenige Ergebnisse zu nichtautonomen Systemen bekannt, sowohl zu deterministischen als auch zu stochastischen. Die Forschungsgruppe zur Stochastischen Dynamik um Prof. L. Arnold in Bremen hat kürzlich einen Begriff eines Kozyklen-Attraktors entwickelt (vgl. [1]), der besonders geeignet für Diskretisierungs- und Störungsuntersuchungen erscheint. Dieses Konzept wurde in [8], [9] und [10] auf deterministische Systeme übertragen. Das Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung einer entsprechenden Theorie einer stochastischen numerischen Dynamik, aufbauend auf einem vorbereitenden Resultat in [2]. Ein Überblick über dieses Problem wird in [5] gegeben.

Bereits früher wurde MAPLE-Software entwickelt für symbolisches Rechnen im Bereich der stochastischen Analysis, für stochastische Differentialgleichungen und die dazugehörige Numerik, wie in der Monografie [7] dargestellt. Diese Software ist Teil des MAPLE-public-domain-Softwarepakets „stochastics“. Eine Zielstellung im Rahmen des Projektes ist, diese Software um nützliche Routinen für stochastische dynamische Systeme zu erweitern, wie z. B. Linearisierung um eine gegebene Lösung, und eine vollständige Dokumentation der Software und der zugrundeliegenden theoretischen Fakten zu erstellen. Ein WIAS-Report hierzu ist in Vorbereitung.

Literatur

1. L. ARNOLD, *Random Dynamical Systems,* Springer-Verlag, Heidelberg, 1998.

2. L. ARNOLD, P. E. KLOEDEN, *Discretization of a random dynamical system near a hyperbolic point,* Math. Nachr., **181** (1996), pp. 43–72.

3. H. CRAUEL, F. FLANDOLI, *Attractors for random dynamical systems,* Probab. Theory Related Fields, **100** (1994), pp. 365–393.

4. P. E. KLOEDEN, *Lyapunov functions for cocycle attractors in nonautonomous difference equations*, WIAS-Preprint No. 385 (1998), erscheint 1998 in: Izv. Akad. Nauk RM Mathematika.

5. P. E. KLOEDEN, H. KELLER, B. SCHMALFUSS, *Towards a theory of random numerical dynamics,* Random Dynamical Systems, Festschrift zu Ehren von Ludwig Arnold (F. Colonius, M. Gundlach, W. Kliemann, Hrsg.), Springer-Verlag, 1998.

6. P. E. KLOEDEN, J. LORENZ, *Stable attracting sets in dynamical systems and their one-step discretizations*, SIAM J. Numer. Anal., **23** (1986), pp. 986–995.

7. P. E. KLOEDEN, E. PLATEN, *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations,* Springer-Verlag, Heidelberg, 1992.

8. P. E. KLOEDEN, B. SCHMALFUSS, *Lyapunov functions and attractors under variable time-step discretization*, Discrete Conts. Dynamical Systems, **2** (1996), pp. 163–172.

9. ——, *Cocycle attractors sets of variable time-step discretizations of Lorenzian systems,* J. Difference Eqns. Appl., **3** (1997).

10. ——, *Nonautonomous systems, cocycle attractors and variable time-step discretization,* Numer. Algorithms, **14** (1997), pp. 141–152.

11. P. E. KLOEDEN, D. J. STONIER, *Cocycle attractors in nonautonomously perturbed differential equations,* erscheint in: Dynamics Conts. Discrete Impulsive Systems, 1998.

Simulation der Telegrafengleichung unter realistischen Versuchsbedingungen

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

Kooperation: R. Willenbrock (SonoTech, Berlin), Y. Kashtanov (Universität St. Petersburg)

Förderung: BMBF

In diesem Projekt geht es darum, Ideen, die aus der Laser-Tomografie stammen, auf die Ultraschall-Tomografie zu übertragen. Ziel ist es, die Auflösungsmöglichkeiten bei Ultraschalluntersuchungen in den Bereichen Medizin und Materialprüfung zu verbessern. Dies soll durch eine Analyse der Form des reflektierten bzw. transmittierten Ultraschallimpulses geschehen.
Das grundlegende Problem des Projekts besteht in der Validierung der These, daß die tatsächlich beobachtete Pulsverformung durch eine Ausbreitung gemäß der Telegrafengleichung

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi + \frac{2\lambda}{c}\frac{\partial}{\partial t}\phi - \Delta\phi = 0$$

(mit geeigneten Randbedingungen) erklärt werden kann.
R. Willenbrock und W. Metzner führen hierzu Präzisionsmessungen im Megahertzbereich durch, jeweils an einfachen (homogenen) Proben verschiedener Länge aus Polyethylen, Plexiglas und als Referenzmaterial Wasser. Ausgehend von diesen einfachen Meßsituationen soll schrittweise erreicht werden, realistische Versuchsbedingungen erfolgreich zu reproduzieren.
Zur Visualisierung und Analyse der gemessenen Daten wurde im Rahmen des Projekts ein Programm entwickelt, das den Benutzer beim Vergleich verschiedener Messungen durch automatische Funktionen (Skalierungen, Autokorrelation, Rauschfilter, Hilbert- und Fouriertransformation usw.) unterstützt. Weiterhin ist der Aufbau eines Wavelet-Moduls geplant, das eine Analyse im Zeit–Frequenz-Bereich erlaubt.

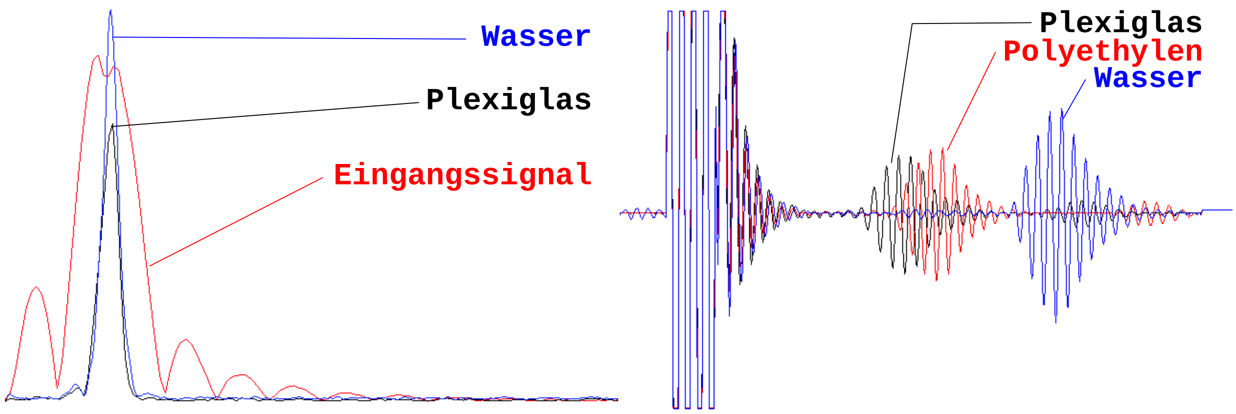


Abb. 1: Links: Gesendetes und reflektierte Signale im Fourierraum
Rechts: Reflektierte Signale

Zur Lösung der Telegrafengleichung wurden verschiedene Ansätze untersucht, u. a.

- die Transmission-Line-Methode (Y. Kashtanov [2])

- stochastische Methoden von M. Kac [1], E. Orsingher und A. S. Veselovskaya [3] (H. Zacharias-Langhans).

Beim Vergleich von gemessenen und simulierten Daten hat sich jedoch gezeigt, daß der Unterschied zwischen gesendetem und empfangenem Signal nicht allein durch die Telegrafengleichung erklärt werden kann, sondern in erster Linie durch den Frequenzgang des Empfangsgerätes bestimmt wird. Für die „Responsefunction“ des Empfängers wurde zwar inzwischen ein passables Modell gefunden, aber die Rekonstruktion des „wahren“ Signals („Deconvolution“) ist ein numerisch unstabiles Problem.
Nach dem aus unserer Sicht vorzuziehenden Modell von M. Kac läßt sich eine Lösung der Telegrafengleichung aus einer Lösung der Wellengleichung durch den Ersatz der Zeitvariablen t durch eine Zufallsvariable $T_\lambda(t)$, die „randomisierte Zeit“, gewinnen. Wir untersuchen nun, ob das Verfahren, diese Transformation beim gemessenen und nicht beim unbekannten „wahren“ Signal durchzuführen, zum einen mathematisch gerechtfertigt ist und zum anderen die Unterschiede zwischen den verschiedenen Materialproben erklären kann.

Literatur

1. M. KAC, *Some stochastic problems in physics and mathematics*, Lect. Pure Appl. Sci., No. 2, 1956.

2. Y. KASHTANOV, *A note on the transmission line modeling method for wave equations*, Manuskript, 1997.

3. A. S. VESELOVSKAYA, *On the solution of the mixed problem of the telegraph equation by means of a Monte Carlo method*, Vestnik LGU, (1986), pp. 96–98.

Dynamische stochastische Algorithmen

Bearbeiter: P. Mathé, A. Mader

Kooperation: H. Babovsky (Technische Universität Ilmenau), U. Voll (Universität München)

Die Untersuchungen zur Konvergenz schnellmischender Markovketten wurden fortgesetzt. Im Hinblick auf die Anwendung von Markovketten auf Gittern ist die Mischungsgeschwindigkeit von Ketten auf Produkträumen interessant. Die in [2] erhaltenen Ergebnisse auf Produktgruppen wurden in [3] auf den Fall diskreter Produkträume übertragen. Als wichtige Anwendung erscheint die Bestimmung der Konvergenz von Metropolisketten. Während in [3] noch vorausgesetzt wurde, daß die invariante Verteilung selbst Produktstruktur hat, ist es kürzlich gelungen, eine Klasse von Verteilungen zu beschreiben, für die die Mischung der dazugehörigen Metropoliskette sehr gut durch die Mischungsgeschwindigkeit der unterliegenden Kette abgeschätzt werden kann. Wichtiges Hilfsmittel sind die „Comparison Techniques“ aus [1]. Die erhaltenen Abschätzungen sollen Grundlage für die zukünftige Untersuchung des zeitlich inhomogenen Falls sein.

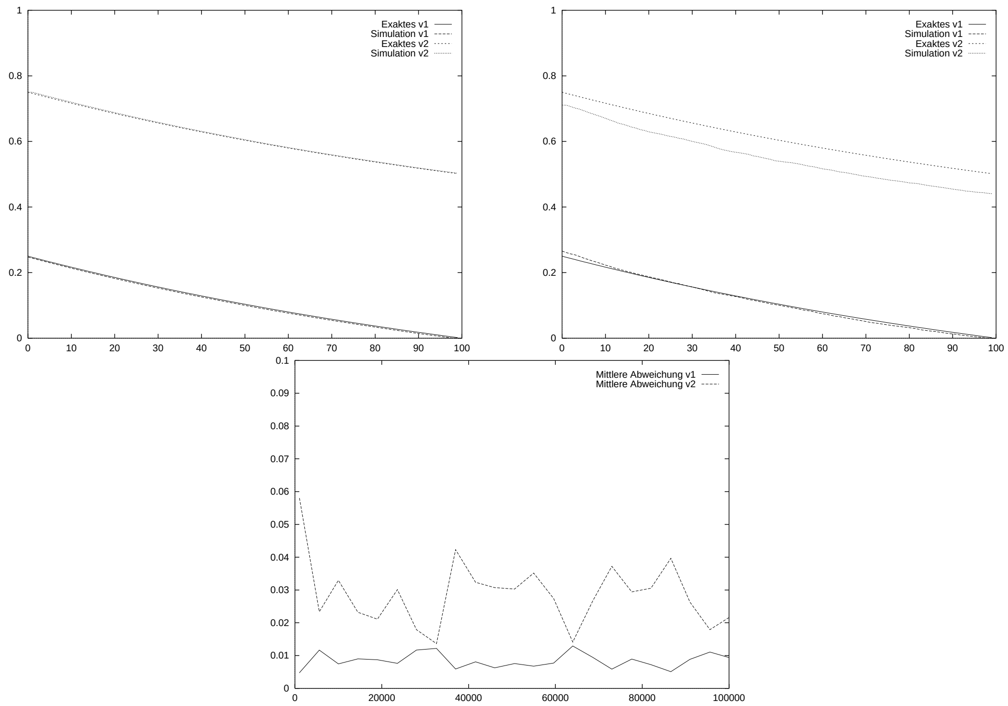


Abb. 1: Oben: Simulation mit deterministischer bzw. zufälliger Einströmung; unten: der Fehler bei zufälliger Einströmung nimmt trotz steigender Teilchenzahl nicht ab.

Die zur numerischen Lösung praxisrelevanter Fragestellungen der Gasdynamik nötigen Algorithmen für Evolutionsprobleme wurden z. B. in [4] und [8] mathematisch gerechtfertigt. Für stationäre Probleme wurden die systematischen Fehler der numerischen Experimente mit Hilfe der Monte Carlo Direct Simulation (MCDS) Methode in [5] untersucht. In der Simulation einfacher Modelle konnten die in Abb. 1 skizzierten Defekte beobachtet werden. Ziel ist es, diese Abweichungen zu modellieren. Die z. B. in [6] gemachten Aussagen konnten durch Simulationen nachvollzogen werden (vgl. [7]).

Literatur

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

2. P. Mathé, *Efficient mixing of product walks on product groups,* WIAS-Preprint No. 284 (1996).

3. ——, *Relaxation of product Markov chains on product spaces,* WIAS-Preprint No. 313 (1997).

4. H. Babovsky, *A convergence proof for Nanbu's Boltzmann simulation scheme*, European J. Mech. B/Fluids, **8** (1989), pp. 41–55.

5. ——, *Time averages of simulation schemes as approximations to stationary kinetic equations*, European J. Mech. B/Fluids, **11** (1992), pp. 199–212.

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

7. H. Babovsky, A. Mader, *Macroscopic modelling of kinetic gas flows in thin layers,* eingereicht bei: ZAMM.

8. W. Wagner, *A convergence proof for Bird's direct simulation Monte Carlo method for the Boltzmann equation*, J. Statist. Phys., **66** (1992), pp. 1011–1044.

Probabilistische Lösung partieller Differentialgleichungen und stochastische Resonanz

Bearbeiter: G. N. Milstein

Kooperation: M. V. Tretjakov (Ural-Universität Jekaterinburg, Rußland)

Förderung: Alexander von Humboldt-Stiftung

Die bekannten Algorithmen zur numerischen Lösung von stochastischen Differentialgleichungen (SDG) basieren auf Zeitdiskretisationen. Zur approximativen Lösung von Randwertproblemen für partielle Differentialgleichungen in beschränkten Gebieten sind jedoch neue Methoden erforderlich, die Raumdiskretisierungen verwenden.
In [1] werden Randwertaufgaben für elliptische Differentialgleichungen gelöst. Für deren numerische Lösung werden spezielle Methoden der schwachen Approximation entwickelt, die im Hinblick auf die Behandlung partieller Differentialgleichungen durch Monte-Carlo-Methoden ausreichend sind. Spezielle Methoden zur starken Approximation von räumlichen Irrfahrten werden in [2] betrachtet. Alle diese Algorithmen basieren auf der Konstruktion geeigneter Markovketten. Untersucht werden Fragen der Konvergenz, der Approximationsgüte und der numerischen Komplexität dieser Verfahren.
Die Approximation von raumzeitlichen Irrfahrten ist notwendig für starke Methoden der numerischen Lösung von SDG in beschränkten Gebieten. Sie ist ebenfalls erforderlich für die Modellierung der Austrittszeit von zufälligen Trajektorien von SDG in beschränkten Gebieten. In [3] ist es gelungen, die parabolische Diffusion durch zufällige Irrfahrten auf Grenzen von kleinen Hyperrechtecken zu approximieren. Die Arbeit [4] behandelt die Entwicklung stochastischer numerischer Methoden für nichtlineare parabolische partielle Differentialgleichungen.
In [5] wird ein neues Verfahren für die numerische Modellierung von Systemen von SDG entwickelt, die mit stochastischer Resonanz zusammenhängen. Das Phänomen der stochastischen Resonanz im engeren Sinne entsteht als Ergebnis des Zusammenspiels zwischen kleinem Rauschen und periodischen Kräften in bistabilen Systemen. Im weiteren Sinne bezeichnet stochastische Resonanz einen umfangreichen Kreis von Erscheinungen, bei denen eine gewisse Charakteristik eines physikalischen Prozesses extrem abhängig von der Intensität des Rauschens ist. Untersuchungen dieser Abhängigkeit erfordern eine Langzeitmodellierung von Systemen von SDG. Die Arbeit [5] basiert wesentlich auf den Ergebnissen von [6] und [7].
Zur Stabilität von Gleichgewichtszuständen unter zufälligen Störungen existiert eine umfangreiche Literatur. Wichtige Ergebnisse auf diesem Gebiet hängen mit den Begriffen des Lyapunov-Exponenten (Khasminskii), des Lyapunov-Momentexponenten (Arnold), der großen Abweichungen (Baxendale) und des Stabilitätsindex (Arnold–Khasminskii) zusammen. Diese Begiffe werden in [8] - [10] auf die Stabilität von invarianten Mannigfaltigkeiten übertragen.

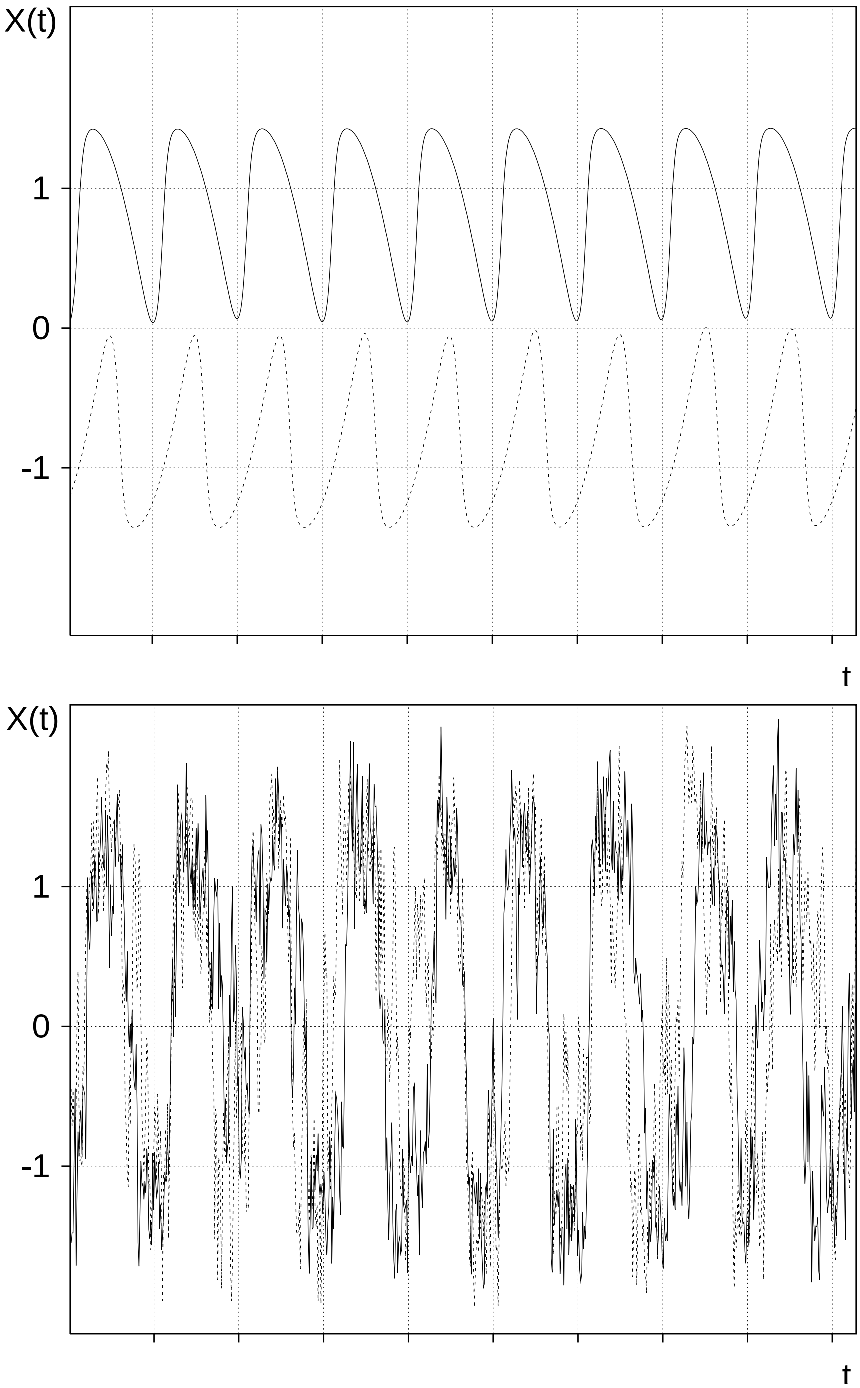


Abb. 1: Stichprobentrajektorien zu den letzten und mittleren Oszillatoren eines Systems von 33 Oszillatoren. Oben: schwaches Rauschen; unten: stärkeres Rauschen.

Literatur

1. G. N. MILSTEIN, *Weak approximation of a diffusion process in a bounded domain,* Stochastics Stochastics Reports, **62** (1997), pp. 147–200.

2. ——, *On the mean-square approximation of a diffusion process in a bounded domain,* WIAS-Preprint No. 347 (1997).

3. G. N. MILSTEIN, M. V. TRETYAKOV, *Space-time random walk for stochastic differential equations in a bounded domain,* WIAS-Preprint No. 352 (1997).

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

5. M. V. TRETYAKOV, *Numerical studies of stochastic resonance,* WIAS-Preprint No. 322 (1997).

6. G. N. MILSTEIN, M. V. TRETYAKOV, *Mean-square numerical methods for stochastic differential equations with small noises,* SIAM J. Sci. Comput., **18** (1997), No. 4, pp. 1067–1087.

7. ——, *Numerical methods in the weak sense for stochastic differential equations with small noise,* SIAM J. Numer. Anal., **34** (1997), No. 6, pp. 2142–2167.

8. G. N. MILSTEIN, *Stability index for invariant manifolds of stochastic systems,* Random Comput. Dynamics, **5** (1997), No. 4.

9. ——, *Stability index for orbits with nonvanishing diffusion,* WIAS-Preprint No. 359 (1997).

10. ——, *Orbital stability index for nonlinear stochastic systems,* The 8th International Colloquium on Differential Equations, Plovdiv, Bulgarien, 18. - 23. August, 1997.

Statistische Verfahren für Ökonometrie und Finanzmathematik

Bearbeiter: V. Spokoiny

Kooperation: W. Härdle, S. Sperlich (Humboldt-Universität zu Berlin, SFB 373), A. Juditsky (INRIA, Grenoble, Frankreich), E. Guerre (Universität Paris 6, Frankreich), R. Liptser (Universität Tel-Aviv, Israel), L. Dümbgen (Medizinische Universität Lübeck)

In Rahmen dieses Projektes werden die folgenden Probleme untersucht:

- Statistische Verfahren für unvollständige Finanzmärkte
- Komponentenanalyse für ökonometrische Daten
- Single-Index-Modelle und qualitative Hypothesen.

Statistische Verfahren für unvollständige Finanzmärkte. Bei Untersuchungen der Finanzmärkte trifft man häufig auf das Problem, daß jede zu untersuchende Größe von vielen anderen abhängt und die Art der jeweiligen Abhängigkeit unbekannt ist. Dies führt dazu, daß das für diese Größe konstruierte Modell unvollständig ist. Dabei unterscheidet man zwischen lokalen und globalen (oder, mit anderen Worten, zwischen Mikro- und Makro-) Charakteristiken des Modells. Die Mikrocharakteristiken hängen von vielen unbekannten Faktoren ab und lassen sich nicht abschätzen. Beim Makro-Ansatz kann man erwarten, daß die Einflüsse vieler unterschiedlicher Faktoren zu einem mittleren Verhalten des Modells führen. Das Ziel unserer Untersuchung war, die Charakteristiken des Makro-Modells zu bestimmen. Eine adaptive nichtparametrische Schätzmethode wurde in [3] entwickelt. Die Ergebnisse zeigen, daß diese Methode unter gewissen nichtrestriktiven Annahmen eine geschwindigkeitsoptimale Schätzung der Makroparameter des Modells liefert.

Komponentenanalyse für ökonometrische Daten. Dieses Teilprojekt wird in Kooperation mit W. Härdle und S. Sperlich (SFB 373, Humboldt-Universität zu Berlin) durchgeführt. Das Anwendungsbeispiel beinhaltet die Modellierung des Arbeitsangebotes für Frauen in Ostdeutschland. Untersucht wird mit Hilfe der betrachteten Modelle, welche Faktoren die Zielgröße beeinflussen und welcher Art ihr jeweiliger Einfluß ist. Das Verhalten von Frauen auf dem deutschen Arbeitsmarkt ist ein vieldiskutiertes Thema in der Wirschafts- und Sozialwissenschaft. Hierbei ist von Interesse, in welcher Hinsicht sich seit der Vereinigung der beiden deutschen Staaten das Verhalten der ostdeutschen Frauen von dem der westdeutschen unterscheidet. In unserem Anwendungsbeispiel greifen wir die Analyse des Arbeitsangebotes für ostdeutsche Frauen heraus und fragen, welche der hier betrachteten Einflüsse signifikant sind und welche Art einer Abhängigkeit (linear oder nichtlinear) vorliegt.

Die interessierende Antwortvariable ist die „tatsächliche“ Wochenarbeitszeit. Als erklärende Variable werden berücksichtigt: das Alter der Frau, ihr Stundenlohn, der Prestigeindex ihres Berufs (Treiman Prestige Index), die Miete oder Abzahlung für Wohnung/Haus, das Nettomonatseinkommen ihres Lebenspartners, ihre Ausbildungszeit, die Arbeitslosenrate des jeweiligen Bundeslandes und die Anzahl ihrer Kinder unter 16 Jahren.

Eine allgemeine Methode für eine solche Komponentenanalyse wird in [5] entwickelt. Diese Methode basiert auf der Idee des adaptiven Testens nichtparametrischer Hypothesen (siehe [4]). Die Daten wurden dem Socio-Economic Panel für Deutschland für das Jahr 1992 entnommen.

Single-Index-Modelle und qualitative Hypothesen. Single-Index-Modelle werden häufig bei der ökonometrischen Modellierung verwendet; sie verallgemeinern klassische lineare Modelle. Die Single-Index-Modellannahme läßt sich als ein gewisser Kompromiß zwischen restriktiven linearen Annahmen und rein nichtparametrischen Annahmen betrachten. Untersucht werden in Single-Index-Modellen zumeist die Indexkoeffizienten, die eine natürliche ökonometrische Interpretation haben. Die existierenden Methoden kann man in direkte und indirekte klassifizieren. Die indirekten Methoden, wie z. B. die nichtparametrische Kleinste-Quadrate-Schätzung, sind asymptotisch optimal; die Berechnung einer solchen Schätzung führt jedoch auf ein hochdimensionales Optimierungsproblem (siehe [6]).
Es existieren auch direkte Methoden, die es ermöglichen, die Indexkoeffizienten relativ einfach zu schätzen. Ein typisches Beispiel ist die Average-Derivative-Schätzung. Die Eigenschaften dieser Schätzung wurden aber bisher nur unter sehr starken Modellannahmen untersucht. Eine alternative direkte Schätzmethode wird in [2] entwickelt. Es wird gezeigt, daß diese Schätzung unter realistischen Modellannahmen geschwindigkeitsoptimal und adaptiv ist.
Eine allgemeine Methode für das Testen qualitativer Hypothesen (Positivität, Monotonie oder Konvexität einer unbekannten Funktion) wird in [1] entwickelt. Es wird gezeigt, daß diese Methode gleichzeitig asymptotisch optimal und adaptiv in bezug auf unbekannte Eigenschaften der Modellfunktion ist.

Literatur

1. L. Dümbgen, V. Spokoiny, *Optimal nonparametric testing of qualitative hypotheses,* WIAS-Preprint No. 389 (1998).

2. M. Hristache, V. Spokoiny, *Direct estimation of the index coefficients in a single-index model*, WIAS-Preprint, in Vorbereitung.

3. R. Liptser, V. Spokoiny, *On estimating a dynamic function of stochastic system with averaging,* WIAS-Preprint No. 381 (1997).

4. V. Spokoiny, *Adaptive hypothesis testing using wavelets*, Ann. Statist., **24** (1996), pp. 2477–2498.

5. W. Härdle, S. Sperlich, V. Spokoiny, *Component analysis for additive models,* Discussion paper SFB 373, No. 52, Humboldt-Universität zu Berlin.

6. R. L. Klein, R. H. Spady, *An efficient semiparametric estimator for binary response models*, Econometrica, **61** (1993), No. 2, pp. 387–421.

Nichtparametrische Diskriminanzanalyse

Bearbeiter: J. Polzehl

Kooperation: S. Klinke (Humboldt-Universität zu Berlin, SFB 373), H. Kauderer (Daimler Benz AG, Ulm)

Die Diskriminanzanalyse (Klassifikation) befaßt sich mit der Zuordnung von Objekten zu einer endlichen Menge (Labels $\{y_i\}_{i=1,k}$) vorgegebener Populationen anhand beobachteter Merkmalsvektoren x. Die Beschreibung der Populationen erfolgt durch Wahrscheinlichkeitsräume $(\mathcal{X}, \mathcal{A}, \mathbf{P}_i)$; die unbekannten Verteilungen P_i werden in der Regel anhand von Trainingsstichproben mit bekanntem Populationslabel y geschätzt.
Das resultierende statistische Modell läßt sich in der Form

$$y = f(x) + \varepsilon$$

darstellen.
Konkrete Diskriminanzanalyseverfahren definieren sich über die Art der Schätzung von f. Klassische parametrische Modelle führen zu Einschränkungen in der Form der Entscheidungsgrenzen und damit in einer Reihe von Anwendungen zu deutlich inadäquaten Modellen.
Nichtparametrische Ansätze wie k-Nearest-Neighbour-Verfahren (k-NN), Classification und Regression Trees (CART) und Neural Networks (NN) ermöglichen eine wesentlich flexiblere, adäquate Modellierung. Aktuelle Weiterentwicklungen nichtparametrischer Klassifikationsverfahren kombinieren Eigenschaften dieser Verfahren und versuchen durch lokal-adaptive Modellierung eine optimale Rekonstruktion von f unter Vermeidung der sich aus dem „curse of dimensionality“ ergebenden Probleme. In die letzte Modellklasse ordnen sich auf univariaten Projektionen basierende Verfahren (CART, Projection Pursuit, NN) ein.
Charakteristisch für Klassifikationsprobleme ist eine gegenüber Regressionsmodellen veränderte Risikofunktion (0/1 Verlust statt L_p-Norm), (vgl. [2]). Daraus ergibt sich ein deutlich anderes optimales Bias–Varianz-Verhältnis in Diskriminanzanalysemodellen. Bisherige Untersuchungen zu k-NN und lokal-adaptiven Verfahren basieren meist auf der optimalen Rekonstruktion der Regressionsfunktion f.
Zielstellung des Projektes ist die Entwicklung lokaler Adaptations- und Projektionsverfahren ausgehend von dem für Klassifikationsprobleme charakteristischen „bias-variance trade-off“.
Viele Klassifikationsverfahren setzen quantitative Merkmale voraus. Im Rahmen einer durch die Daimler Benz AG geförderten Diplomarbeit werden Skalierungsverfahren auf ihre Eignung zur Transformation nominaler und ordinaler Merkmale im Kontext der Klassifikation untersucht.

Literatur

1. J. Polzehl, *Projection pursuit discriminant analysis*, Comput. Statistics Data Analysis, **20** (1995), pp. 141–157.

2. J. H. Friedman, *On bias, variance, 0/1-loss, and the curse-of-dimensionality*, Technical Report, Dept. of Statistics, Stanford University, 1996.

Modellwahl und Konfidenzbereiche in heteroskedastischen nichtlinearen Regressionsmodellen

Bearbeiter: J. Polzehl

Kooperation: O. Bunke, B. Droge, M. H. Neumann (Humboldt-Universität zu Berlin, SFB 373)

Innerhalb dieses Projektes wurden Strategien für eine datenabhängige Auswahl geeigneter nichtlinearer Regressionsmodelle unter Einbeziehung von Fragestellungen der Varianzmodellierung und von Modelltransformationen untersucht. Nichtlineare Regressionsmodelle werden auf vielen Gebieten bei der Analyse experimenteller Daten zur Beschreibung des Zusammenhanges zwischen Variablen genutzt. Die Analyseresultate können stark vom gewählten parametrischen Modell abhängen.
Durch die systematische Anwendung empirischer Modellwahlkriterien stellen wir Werkzeuge zum Vergleich verschiedener Modelle hinsichtlich ihrer Eignung für spezielle Aufgabenstellungen sowie Strategien und Verfahren zur Auswahl unter diesen Modellen bereit. Zur Einschätzung der Genauigkeit von Parameterschätzungen, Vorhersagen und Kalibrationsergebnissen werden Konfidenz-, Vorhersage- und Kalibrationsintervalle in heteroskedastischen nichtlinearen Regressionsmodellen untersucht. Die entwickelten Intervalle basieren auf modernen Resamplingmethoden (Bootstrap). Damit kann, im Gegensatz zu traditionellen Methoden, auf einschränkende Modellannahmen weitgehend verzichtet werden.

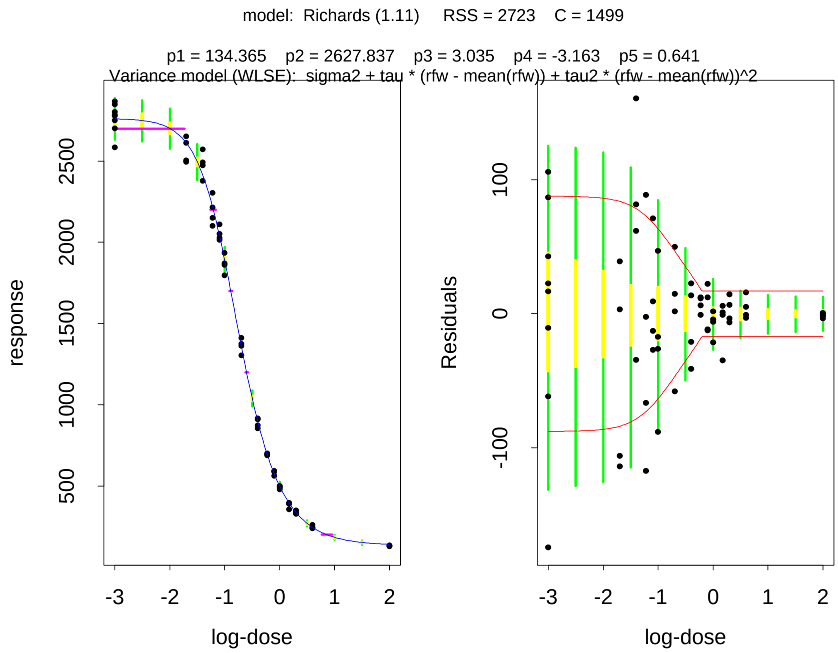


Abb. 1: Analyseergebnisse für ein radioimmunologisches Kalibrationsexperiment (Cortisol), Daten: INRA, Jouy-en-Josas

Literatur

1. O. Bunke, B. Droge, J. Polzehl, *Selection of models and confidence intervals in heteroscedastic nonlinear regression*, American Statistical Association, 1995 Proceedings of the Biopharmaceutical Section, Alexandria, VA, USA, (1995), pp. 233–238.

2. O. Bunke, B. Droge, J. Polzehl, *Splus tools for model selection in nonlinear regression*, erscheint in: Computational Statistics.

3. M. H. Neumann, J. Polzehl, *Simultaneous bootstrap confidence bands in nonparametric regression*, erscheint in: Journal of Nonparametric Statistics.

Entscheidungstheorie für nichtparametrische Experimente

Bearbeiter: G. Golubev, M. Nussbaum

Kooperation: R. Khasminskii (Wayne State University, Detroit, USA), W. Härdle (Humboldt-Universität zu Berlin), V. Koltchinski (University of New Mexico, Albuquerque, USA), I. Grama (Stipendiat der Alexander von Humboldt-Stiftung, z. Z. Gießen), M. Jähnisch (Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Berlin)

In der asymptotischen Theorie statistischer Experimente geht es um die Approximation allgemeiner Modelle durch einfachere; es entsteht eine Theorie, die Grundlagenprobleme der mathematischen Statistik mit Hilfe abstrakter Konzepte behandelt. Ein zentrales Thema der Forschungsgruppe in den letzten Jahren war in diesem Zusammenhang die asymptotische Äquivalenz nichtparametrischer Experimente zu Gaußschen Folgen im Sinne des Defizienzabstandes. Ein wichtiges Hilfsmittel hierbei sind Resultate über coupling von Wahrscheinlichkeitsmaßen, insbesondere die sogenannte Ungarische Konstruktion (KMT-Ungleichung). Eine spezielle funktionelle Version wurde in [1] bereitgestellt; diese ist Voraussetzung für das in [2] bewiesene Resultat über die Gaußsche Approximation eines nichtparametrischen Regressionsmodells, das aus einer parametrischen Verteilungsfamilie durch zeitliche Variation des Parameters entsteht. Eine Verallgemeinerung auf ein in Zeit und Verteilung nichtparametrisches Regressionsmodell ist die Zielstellung der Dissertationsschrift [3]. Ein Ausgangspunkt sind neue Resultate über die Ungarische Konstruktion für den (zweidimensionalen) sequentiellen empirischen Prozeß (vgl. [4]); die benötigte funktionelle Version wurde in Zusammenarbeit mit V. Koltchinski erarbeitet. Die Resultate von [2] für ein Regressionsmodell aus unabhängigen Beobachtungen fanden eine überraschende Anwendung, indem ein Modell diskreter Beobachtungen eines Markovschen Diffusionsprozesses mit kleinem Rauschen [5] im Sinne statistischer Äquivalenz hierauf zurückgeführt werden konnte.
Ein weiteres Teilprojekt betraf inverse Probleme für partielle Differentialgleichungen, speziell die Regularisierung inverser Probleme für parabolische und elliptische Differentialgleichungen durch nichtparametrische Schätzung. Beispielsweise ist im linearen parabolischen Anfangswertproblem

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad u(t,0) = u(t,1), \quad \frac{\partial u}{\partial t}(t,0) = \frac{\partial u}{\partial t}(t,1)$$

die glatte Funktion $\theta(x) = u(0,x)$ aus den Messungen $Y(t) = u(T,x) + \varepsilon n(x)$, $x \in [0,1]$ zu identifizieren, wobei $n(x)$ ein Gaußsches Rauschen ist. Für derartige inverse Randwertprobleme wurde eine neuartige Minimax-Theorie exponentieller Ordnung entwickelt. Damit im Zusammenhang steht die Entwicklung von Regularisierungsmethoden für semiparametrische Modelle. Ein wichtiger Schritt konnte mit der Behandlung des partiellen linearen Modells vollzogen werden, das weit mehr Flexibilität bietet als die parametrischen Ansätze (vgl. [7]). In diesem Modell schätzt man den unbekannten Parameter $\theta \in \mathbf{R}^n$ aus den beobachteten Daten $Y_i = \theta^T Z_i + m(X_i) + \xi_i$, wobei ξ_i ein Gaußsches Rauschen ist. Die Hauptschwierigkeit des Modells besteht darin, daß die glatte Funktion $m(\cdot)$ unbekannt ist. Eine Minimax-Theorie zweiter Ordnung wurde für dieses Problem entwickelt, um die beste Regularisierung und die adaptive Schätzung zu finden. Semiparametrische Methoden dieser Art werden in Ökonometrie und Medizin zunehmend angewendet.

Literatur

1. I. GRAMA, M. NUSSBAUM, *A nonstandard Hungarian construction for partial sums*, WIAS-Preprint No. 324 (1997).

2. ——, *Asymptotic equivalence of nonparametric generalized linear models*, WIAS-Preprint No. 289 (1996), erscheint in: Probab. Theory Related Fields.

3. M. JÄHNISCH, *Asymptotische Äquivalenz für ein Modell unabhängiger nicht identisch verteilter Daten*, Dissertationsschrift, in Vorbereitung.

4. N. CASTELLE, F. LAURENT-BONVALOT, *Strong approximations of bivariate uniform empirical processes,* erscheint in: Ann. Inst. H. Poincaré, Probab. Stat.

5. V. GENON-CATALOT, C. LARÉDO, M. NUSSBAUM, *Asymptotic equivalence of density and diffusion drift estimation,* in Vorbereitung.

6. G. GOLUBEV, R. KHASMINSKII, *Statistical approach to inverse boundary value problems for partial differential equations,* WIAS-Preprint No. 370 (1997).

7. G. GOLUBEV, W. HÄRDLE, *On adaptive estimation in partial linear models,* WIAS-Preprint No. 371 (1997).

4.7 Forschungsgruppe Kontinuumsmechanik

4.7.1 Zusammenfassung

Die Forschung der Gruppe hat sich auf drei Gebiete konzentriert:

- Ausbreitung von Schallwellen und Stoßwellen in Kontinua,
- thermodynamische Modellbildung für mehrkomponentige Körper,
- Phasenumwandlungen in Festkörpern.

Diese Auswahl der schwerpunktmäßig bearbeiteten Fragen wurde einerseits durch die Möglichkeiten der praktischen Anwendung motiviert und andererseits durch wachsende mathematische Interessen auf dem Gebiet der Theorie hyperbolischer Gleichungssysteme geweckt.
Die Forschungsgruppe versucht, die Ergebnisse in

- Medizin (Ultraschalldiagnostik, Lithotripsie),
- Elektronikindustrie (Rißausbreitung und Bruch in Verbindungselementen),
- Umwelttechnik (Kontaminationsbereiche in Böden)

umzusetzen.

Die ersten konkreten Verbindungen mit der Industrie liegen vor.

Gleichzeitig ergaben sich umfangreiche mathematische Fragen, die sich hauptsächlich im Bereich der schwachen Lösungen von hyperbolischen Gleichungssystemen stellten. Zum Beispiel wurde eine völlig neue seminumerische Methode zur Untersuchung von Stoßwellen (besonders Randwertprobleme und Reflexion) entwickelt. Sie beruht auf der physikalisch motivierten Zeitdiskretisierung. Allerdings fehlt für diese Methode noch der Beweis der Konvergenz.
Gleichzeitig werden sowohl wissenschaftliche als auch didaktische Kontakte mit Berliner Universitäten entwickelt. Besonders eng ist die Zusammenarbeit mit Physikern, die der Forschungsgruppe von Prof. Ingo Müller (Technische Universität Berlin) angehören.

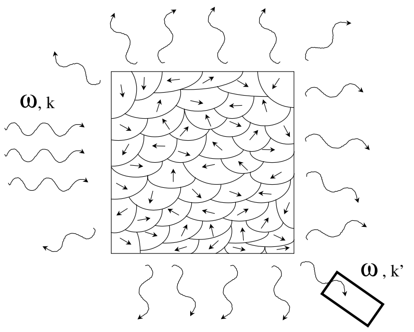
4.7.2 Projekte

Streuung elastischer Wellen an Inhomogenitäten

Bearbeiter: W. Dreyer, K. Wilmański

Kooperation: E. Neumann, M. Vijayendra (BAM, Berlin)

Mittels der Streuung von Schallwellen lassen sich Materialfehler in vielen Körpern zerstörungsfrei nachweisen. Die Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) untersucht Materialfehler in polykristallinen Metallen. Die nebenstehende Abbildung zeigt einen Ausschnitt des typischen Gefüges eines solchen Materials, welches aus Körnern mit kubischer Kristallsymmetrie aufgebaut ist. Die Kristallhauptrichtungen sind statistisch verteilt, und dies wird durch die Pfeile angedeutet. Wird in einem derartigen Körper eine elastische Welle erzeugt, so kommt es aufgrund der statistischen Verteilung der Kristallhauptrichtungen zu Streuungen. Die mittlere Phasengeschwindigkeit wird zu einer Funktion der eingestrahlten Frequenz ω, und es kommt darüber hinaus zu einer frequenzabhängigen mittleren Dämpfung. Beide Größen werden in einem Detektor gemessen, der unter einem Winkel zur Einfallsrichtung aufgestellt ist.



Das Ziel der Untersuchung ist die Berechnung von Phasengeschwindigkeit und Dämpfung.
Das mathematische Modell fällt in die Klasse der Eigenwertprobleme und ist wie folgt aufgebaut. Lokal, d. h. in einem Korn, lautet die Differentialgleichung für den Ortsanteil des Verschiebungsfeldes $v_j(x)$

$$L_{ij}v_j = 0 \qquad \text{mit} \qquad L_{ij} = \rho_0\omega^2\delta_{ij} + \partial_k C_{ikjl}\partial_l. \tag{1}$$

Die Steifigkeitsmatrix C_{ikjl} hat die Darstellung

$$C_{ikjl} = O_{im}O_{kn}O_{jr}O_{ls}C^{KS}_{mnrs} \quad , \tag{2}$$

$$C^{KS}_{mnrs} = \lambda\,\delta_{mn}\delta_{rs} + \mu\,(\delta_{mr}\delta_{ns} + \delta_{ms}\delta_{nr}) + \mu'\,\delta_{mnrs}. \tag{3}$$

Hier sind λ und μ die Lame Koeffizienten eines Korns, μ' ist der Anisotropiefaktor für kubische Symmetrie, und das Symbol δ_{mnrs} ist 1, wenn alle Indizes gleich sind und 0 sonst. Die orthogonalen Matrizen O_{im} sind Drehungen, welche das Kristallsystem KS eines individuellen Korns auf das Laborsystem drehen.
Von Interesse ist aber nicht die Gleichung (1), sondern eine entsprechende Gleichung für Mittelwerte $\langle v_j\rangle, \langle C_{ikjl}\rangle$, die hier als Scharmittel eingeführt werden. Das heißt, wir betrachten Mittelwerte über eine Gesamtheit von Körpern, die alle die in Abb. 1 gezeichnete Struktur haben.
Die bereits durchgeführten Rechnungen wurden von der Bundesanstalt für Materialforschung mittels einer Eigenwertgleichung vorgenommen, die auf einer Aufspaltung von L gemäß

$$L_{ij} = L^0_{ij} + \varepsilon L^1_{ij} \quad , \quad \varepsilon = \frac{\mu'}{\mu} \tag{4}$$

basiert. Die formale Darstellung der Eigenwertgleichung lautet dann

$$\left(L^0_{ij} - \varepsilon \left\langle L^1_{ij} \right\rangle - \varepsilon^2 \left(\left\langle L^1_{ir} (L^0)^{-1}_{rs} L^1_{sj} \right\rangle - (L^0)^{-1}_{ir} \left\langle L^1_{rs} \right\rangle \left\langle L^1_{sj} \right\rangle \right) \right) \left\langle v_j \right\rangle = 0. \tag{5}$$

Dies ist bekannt als Kellersche Näherung [1], die Terme ab der Ordnung ε^3 vernachlässigt. Eine sorgfältige Untersuchung hat gezeigt, daß hierdurch hinsichtlich der Dämpfung keine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten zu erzielen ist.
Wir sind der Ansicht, daß die getroffene Wahl des Kleinheitsparameters ε nicht angemessen ist, da die Bedingung $\varepsilon \ll 1$ bei den zur Untersuchung anstehenden Materialien nicht erfüllt ist.
Wir argumentieren stattdessen folgendermaßen: Wir bilden anstelle von (4)

$$L_{ij} = \left\langle L_{ij} \right\rangle + L'_{ij} \quad , \quad v_j = \left\langle v_j \right\rangle + v'_j, \tag{6}$$

und erhalten ohne die Einschränkung $\varepsilon \ll 1$:

$$\left[\left\langle L_{ij} \right\rangle - \left\langle L'_{ir} \left\langle L_{rs} \right\rangle^{-1} L'_{sj} \right\rangle + \left\langle L'_{ir} \left\langle L_{rs} \right\rangle^{-1} L'_{st} \left\langle L_{tk} \right\rangle^{-1} L'_{kj} \right\rangle \right] \left\langle v_j \right\rangle = 0. \tag{7}$$

Die Eigenschaften und Unterschiede dieser Eigenwertgleichung zu der formalen Entwicklung (5) werden zur Zeit untersucht.

Literatur

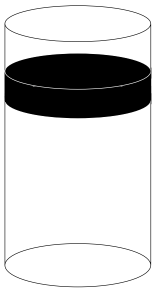
1. F. E. STANKE, G. S. KINO, *A unified theory for elastic wave propagation in polycrystalline materials*, J. Acoust. Soc. Amer., **75(3)** (1984).

Anwendungen des Maximum-Entropie-Prinzips

Bearbeiter: W. Dreyer, M. Kunik

Kooperation: T. Ruggeri (Universität Bologna, Italien)

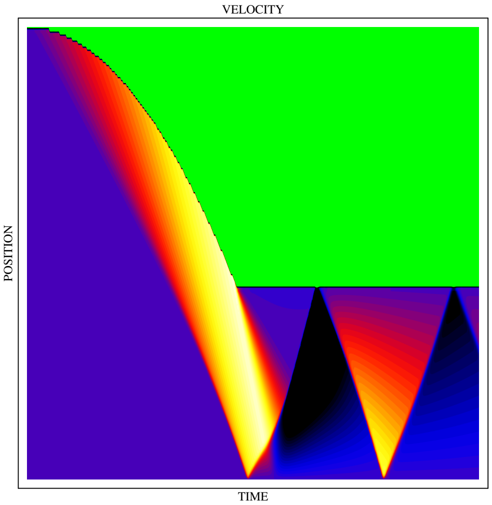
Das Problem der Entstehung und zeitlichen Entwicklung von Schockwellen tritt in den Forschungsaktivitäten der Forschungsgruppe Kontinuumsmechanik in mehreren Zusammenhängen auf. Diese sind beispielsweise: (i) Stoßwellen in organischen Substanzen, (ii) Ultraschalldiagnostik, (iii) Kavitation, insbesondere der Kollaps gasgefüllter Blasen. Ein wichtiger Teilaspekt ist in allen diesen Fällen die Wechselwirkung von Stoßwellen untereinander und mit möglicherweise bewegten Wänden, die durch Blasenoberflächen oder eine Membran realisiert sein können.
Ursprünglich planten wir die Untersuchung dieses Problemkreises für Gase durchzuführen, mittels der in nahezu vollendeter Form vorliegenden *Erweiterten Thermodynamik* (ET). Diese beschreibt thermodynamische Prozesse mit Systemen quasilinearer PDGs vom Typ *symmetrisch hyperbolisch mit konvexer Erweiterung*.
Die ET erzeugt diese Systeme über das *Maximum Entropie Prinzip* (MEP). Dieses Prinzip verknüpft die *kinetische Gastheorie* mit der phänomenologischen ET. Auf der Skala der kinetischen Gastheorie gibt es zwei extreme Bereiche, wo die Thermodynamik entweder durch Dominanz von Teilchenkollisionen oder durch freien Flug der Gasteilchen bestimmt wird.
Das MEP in klassischer Form sorgt zu jedem Zeitpunkt für maximale Entropie. Dies ist angebracht, wenn Teilchenkollisionen der dominierende Effekt sind, aber nicht, wenn Eigenschaften des freien Fluges makroskopisch sichtbar werden. Dies passiert in verdünnten Gasen und/oder bei hohen Machzahlen. In diesen Fällen benötigt die ET in klassischer Formulierung viele Variable zur Zustandsbeschreibung. Zur Vermeidung der Einführung vieler Variablen, was dann natürlich auf große hyperbolische Systeme führt, haben wir das MEP einer Revision unterzogen. Zur Berücksichtigung der freien Flugphasen, gemäß ihrer Bedeutung, unterdrücken wir die Maximierung der Entropie in Zeitintervallen der Dauer τ_{ME}. Die bekannten Systeme der ET folgen dann im Grenzfall $\tau_{ME} \to 0$.
Dies eröffnet zwei Vorteile: (i) durch Wahl einer geeigneten Zeit $\tau_{ME} \geq 0$ besteht die Möglichkeit, die oben genannten Fälle mit niedrigen Variablenzahlen zu behandeln, (ii) Randbedingungen lassen sich selbst für thermodynamische Größen formulieren, die keine unmittelbare physikalische Interpretation besitzen und somit vom Experimentator nicht kontrollierbar sind.



Zur Illustration betrachten wir ein Gas in dem gezeichneten Zylinder/Kolben System. Wir beschreiben hier den thermodynamischen Zustand durch die Variablen Massendichte ρ, Geschwindigkeit v und Temperatur T. Kolben und Zylinderwand werden als adiabat vorausgesetzt, und der Kolben bewegt sich gemäß $3 - 0.5t^2$ während $0 \leq t \leq 2.1$. Von der Zeit $t = 2.1$ an wird der Kolben angehalten. Die Anfangsdaten sind $\rho(0,x) = 1, v(0,x) = 0$ und $T(0,x) = 1$. Im Grenzfall von sehr vielen Entropiemaximierungen resultiert eine globale Lösung der schwachen Eulergleichungen, die in eindimensionaler Form lauten

$$
\begin{aligned}
&\oint_{\partial\Omega} (\rho dx - \rho v dt) = 0,\\
&\oint_{\partial\Omega} \left(\rho v dx - \left(\rho v^2 + \rho T\right) dt\right) = 0,\\
&\oint_{\partial\Omega} \left(\rho \left(\tfrac{3}{2}T + \tfrac{1}{2}v^2\right) dx - \rho \left(\tfrac{5}{2}T + \tfrac{1}{2}v^2\right) v dt\right) = 0.
\end{aligned}
\tag{1}
$$

Hier ist Ω ein konvexer Bereich in Raum/Zeit mit stückweise glattem, positiv orientiertem Rand $\partial\Omega$.



Das Konturbild zeigt unterhalb der Weltlinie des Kolbens das Geschwindigkeitsfeld des Gases. Da die Geschwindigkeit des Kolbens zu Anfang Null ist, nicht aber seine Beschleunigung, entsteht eine schwache Unstetigkeit, die als Beschleunigungswelle mit Schallgeschwindigkeit in das homogene Gas hineinläuft. Die schwache Unstetigkeit steilt sich auf und wird zur Zeit $t_{krit} = \frac{3}{4}\sqrt{\frac{5}{3}}$ eine Stoßwelle, d.h. eine starke Unstetigkeit in allen Variablen. Diese Stoßwelle erreicht etwas später den unteren Kolbenboden, wird dort reflektiert und bewegt sich nun durch das inzwischen inhomogen gewordene Gas auf den Kolben zu, wo eine weitere Reflexion stattfindet, usw.

Literatur

1. W. DREYER, *Maximization of the entropy in non-equilibrium*, J. Phys. A.: Math. Gen., **20** (1987).

2. W. DREYER, M. KUNIK, *The maximum entropy principle revisited*, WIAS-Preprint No. 367 (1997).

3. ——, *Reflections of Eulerian shockwaves at moving adiabatic boundaries*, WIAS-Preprint No. 383 (1997).

Molekulardynamik

Bearbeiter: W. Dreyer, M. Kunik

Kooperation: W. Weiss (TU Berlin)

Die Molekulardynamik (MD) geht aus von der Formulierung der Dynamik von Mikroteilchen und leitet durch Mittelwertbildung die Gesetze der phänomenologischen Thermodynamik des aus diesen Mikroteilchen zusammengesetzten Körpers ab.
Im Rahmen der Aktivitäten der Forschungsgruppe wird die MD als mächtiges Hilfsmittel für folgende Fragestellungen eingesetzt:
(i) Formulierung von Randbedingungen, welche die Thermodynamik zur Lösung von Feldgleichungen benötigt. Häufig treten in der Thermodynamik Größen ohne unmittelbare physikalische Interpretation auf. Dann ist die MD die einzige Methode, um zu motivierbaren Randbedingungen zu kommen.
(ii) Zur Formulierung von Materialgleichungen komplexer Materialien und der hiermit einhergehenden Stabilitätsprobleme ist die Kenntnis der Entropie und des Entropieflusses von entscheidender Bedeutung. Es ist bekannt, daß die klassische Ersetzung *Entropiefluß = Wärmefluß / Temperatur* i. a. nicht stimmt und zu Paradoxien führt. Häufig ist die Bestimmung von Entropie und Entropiefluß in der phänomenologischen Thermodynamik nicht eindeutig möglich, kann aber molekulardynamisch ermittelt werden, da es auf der Mikroebene eindeutige Definitionen gibt.
Zur Illustration betrachten wir eine stationäre Gasströmung, die auf einen als adiabat angenommenen Keil auftrifft. Der bei Überschallströmung auftretende Machsche Kegel soll molekulardynamisch ermittelt werden.

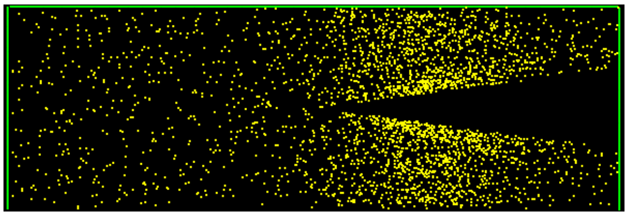


Abb. 1: Überschallströmung gegen einen Keil

Die Teilchen des Gases mit Orten $\mathbf{x}^\alpha(t)$ und Geschwindigkeiten $\dot{\mathbf{x}}^\alpha(t)$, $\alpha = 1,2,...,N$ genügen den Newtonschen Gleichungen

$$m\ddot{\mathbf{x}}^\alpha(t) = \mathbf{G}^\alpha + \sum_{\beta\neq\alpha} \mathbf{K}^{\alpha\beta}. \qquad (1)$$

Hier ist m die Masse eines Teilchens, $\mathbf{G}^\alpha$ eine auf das Teilchen α wirkende äußere Kraft, und $\mathbf{K}^{\alpha\beta}$ bezeichnet die Wechselwirkungskraft zwischen den Teilchen α und β.
Der Übergang zu den thermodynamischen Größen wird mittels einer Fensterfunktion $\chi(\mathbf{x})$ durchgeführt. Der Ort $\mathbf{x}$ ist hier im Sinne der Kontinuumsmechanik zu verstehen, und gibt den Ort eines makroskopisch kleinen Volumens V_r mit Ausdehnung r an. $\chi(\mathbf{x}-\mathbf{x}^\alpha(t))$ ist 1, falls $\mathbf{x}-\mathbf{x}^\alpha(t) \in V_r$, und 0, falls $\mathbf{x}-\mathbf{x}^\alpha(t) \notin V_r$. Beispielsweise lauten die Massendichte, die

Impulsdichte und der Impulsfluß ausgedrückt durch die mikroskopischen Daten

$$
\begin{aligned}
\rho(t,\mathbf{x}) &= \sum_{\alpha=1}^{N} m\chi(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\alpha}(t)),\\
\rho v_i(t,\mathbf{x}) &= \sum_{\alpha=1}^{N} m\dot{x}_i^{\alpha}(t)\chi(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\alpha}(t)),\\
P_{ij}(t,\mathbf{x}) &= \sum_{\alpha=1}^{N}\left(m\dot{x}_i^{\alpha}(t)\dot{x}_j^{\alpha}(t)\chi(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\alpha}(t)) - \frac{1}{2}\sum_{\beta\neq\alpha} K_i^{\alpha\beta}(t)R_j^{\alpha\beta}(t)\int_0^1 d\mu\,\chi(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\alpha}(t)-\mu\mathbf{R}^{\alpha\beta}(t))\right).
\end{aligned}
\tag{2}
$$

v_i bezeichnet die i-te Komponente der Geschwindigkeit, und $\mathbf{R}^{\alpha\beta}$ ist der Relativabstand zwischen den Teilchen α und β.
Mittels der Fensterfunktion teilen wir den in Abb. 1 dargestellten Gasraum in makroskopisch kleine Volumenelemente auf und bestimmen durch Zeitmittelung für jeden dieser Bereiche die vorliegende Massendichte. Das Resultat ist in Abb. 2 dargestellt.

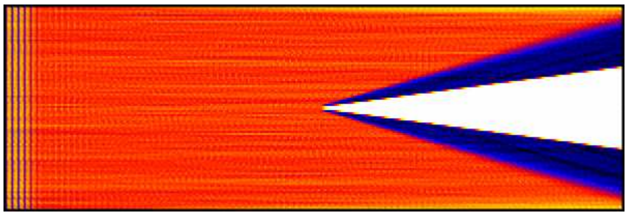


Abb. 2: Konturgraphik des Feldes der Massendichte

Literatur

1. W. DREYER, M. KUNIK, *Reflections of Eulerian shock waves at moving adiabatic boundaries*, WIAS-Preprint No. 383 (1997).

Röntgenbeugungsexperimente mit Superlegierungen

Bearbeiter: W. Dreyer

Kooperation: W. Reimers (HMI, Berlin), J. Olschewski (BAM, Berlin)

Ein prominentes Beispiel für einkristalline mehrphasige Legierungen sind sogenannte Nickelbasis-Superlegierungen, die als Turbinenschaufelmaterial unter großer mechanischer Last und bei Temperaturen um $1100°C$ in Flugturbinen im Einsatz sind. Eine einkristalline Superlegierung ist aus zwei Phasen (γ und γ') aufgebaut, die auf einem gemeinsamen kubisch flächenzentrierten Kristallgitter präsent sind. Im allgemeinen konstituiert die $\gamma-$Phase die Matrix, in welcher $\gamma'-$Teilchen in Form von nahezu periodisch angeordneten Kuben ausgefallen sind. Beide Phasen haben leicht unterschiedliche Gitterkonstanten, und da an den Phasengrenzen ein kohärenter Übergang stattfindet, kommt es zu Eigenspannungen.
Am Hahn-Meitner-Institut (HMI) werden diese Eigenspannungen und insbesondere die unterschiedlichen Gitterkonstanten mittels Röntgenbeugungsintensitätsverteilungen gemessen. Die Interpretation der gemessenen Röntgenintensität, d. h. die Zuordnung der Maxima zu den in γ und γ' vorliegenden Gitterkonstanten ist ein großes Problem und kann nur dann in eindeutiger Weise vorgenommen werden, wenn zusätzlich berechnete Intensitätsverteilungen vorliegen.
Das zugehörige mathematische Modell konstituiert sich aus
(i) dem Gleichgewicht der Kräfte

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0, \tag{1}$$

(ii) dem Hookeschen Gesetz für die Spannungen

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\left(\varepsilon_{kl} - \varepsilon^*_{kl}\right), \tag{2}$$

mit ortsabhängiger Steifigkeitsmatrix C_{ijkl} aus der kubischen Symmetriegruppe und dem Feld ε^*_{kl} der Eigenverzerrungen. Beide Größen sind als bekannt vorausgesetzt.
(iii) der kinematischen Relation, die Verzerrungen ε_{kl} und Verschiebungen u_i verknüpft,

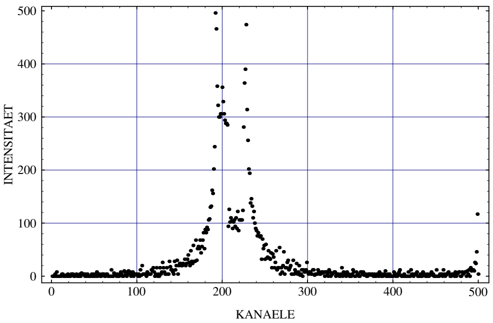
$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right). \tag{3}$$

Die Berechnung der Felder der Verschiebungen, Verzerrungen und Spannungen wird wie folgt durchgeführt: Zunächst wird das Problem mit ortsabhängiger Steifigkeitsmatrix C_{ijkl} auf ein Hilfsproblem mit ortsunabhängiger Steifigkeitsmatrix C^H_{ijkl} zurückgeführt. Hierzu wird diese Ortsabhängigkeit auf eine Hilfsverzerrung ε^H_{kl} verlagert gemäß

$$C_{ijkl}\left(\varepsilon_{kl} - \varepsilon^*_{kl}\right) = C^H_{ijkl}\left(\varepsilon_{kl} - \varepsilon^*_{kl} - \varepsilon^H_{kl}\right). \tag{4}$$

Dieses Problem kann nun mittels Fouriertransformation analytisch gelöst werden. Die gesuchten Verzerrungen folgen anschließend durch Lösung einer Fredholmschen Integralgleichung, deren Lösung iterativ über eine Neumannsche Reihe gefunden wird.
Für eine gegebene Richtung stellt die Röntgenintensitätsverteilung eine Häufigkeitskurve für das Auftreten von Verzerrungen in dieser Richtung dar.

Das nebenstehende Bild zeigt das Resultat einer Rechnung, die für eine einzelne fehlangepaßte Kreisscheibe in einer zweidimensionalen Matrix durchgeführt wurde. In diesem Fall erwarten wir beispielsweise in der 1-Richtung das Auftreten dreier Maxima, welche den entsprechenden Gitterkonstanten im Einschluß und in der Matrix zugeordnet werden können. Während i. allg. durch reine Messung keine Zuordnung der Maxima zu Matrix und Einschluß vorgenommen werden kann, ist dies infolge des aus der Rechnung bekannten vollständigen Verzerrungsfeldes natürlich möglich.



Literatur

1. W. Dreyer, W. Müller, J. Olschewski, *An approximate analytical 2D solution for the stresses and strains in eigenstrained cubic materials*, Internat. J. Solids Structures, im Druck.

Schallwellen und Stoßwellen in porösen Stoffen

Bearbeiter: K. Wilmański

Kooperation: I. Edelman (AdWR, Moskau, Rußland), T. Ruggeri (Universität Bologna, Italien), F. Ueberle (Dornier Medizintechnik, Germering)

Die Ausbreitung der thermomechanischen Wellen in porösen Stoffen ist durch Anwendungen in zerstörungsfreien Prüfverfahren, medizinischen Diagnostik- und Therapiemethoden, Seismik und Bodenuntersuchungen durch Schwingungen und Sprengungen motiviert. Im Rahmen der Theorie der Schallwellen in porösen Körpern wurde das eigene zweikomponentige Modell mit Diffusion und Porositätsänderung untersucht. Die Dispersionsrelation für lineare Wellen ergab dabei

$$\left(\omega^2 - k^{*2} - i\pi\omega - \varphi\beta k^{*2}\frac{i\omega}{1+i\omega}\right) \times \left(\omega^2 - \left(\frac{U^F}{U^S}\right)^2 k^{*2} - i\frac{\pi\omega}{\rho_0^F} - \frac{\varphi\beta}{\rho_0^F}k^{*2}\frac{i\omega}{1+i\omega}\right) +$$

$$+\frac{1}{\rho_0^F}\left(i\pi\omega + \varphi\beta k^{*2}\frac{i\omega}{1+i\omega}\right)^2 = 0.$$

Hier ist ω die dimensionslose Frequenz der monochromatischen Welle, k^* bezeichnet die (komplexe) Wellenzahl, U^F und U^S sind die Ausbreitungsgeschwindigkeiten der longitudinalen Wellen im Fluid und im Skelett, ρ_0^F bezeichnet die Anfangsmassendichte des Fluids. Die Konstanten π, φ, β beschreiben Kopplungseffekte in dem neuen Modell. Diese Konstanten wurden aus in der Literatur angegebenen experimentellen Daten für mehrere Stoffe gewonnen. Die Bestimmung der Materialkonstanten für solche Stoffe, die besonders in der medizinischen Anwendung von großer Bedeutung sind, werden weiter untersucht.

Die Dispersionsrelation wurde gelöst und sowohl die Ausbreitungsgeschwindigkeiten als auch die Dämpfung der monochromatischen Wellen wurde für verschiedene Materialkonstanten analysiert. Es wurde festgestellt, daß das Modell drei Moden der Schallwellen beschreibt. Die übliche longitudinale Welle $P1$ und die Scherwelle S werden schon seit langer Zeit in der Medizin benutzt (z. B. Ultraschalldiagnostik). Die zweite longitudinale Welle $P2$, die auch experimentell schon seit längerer Zeit bekannt ist, wird bis jetzt nicht angewandt. Mit Hilfe der erzielten theoretischen Ergebnisse läßt sich vorhersagen, daß die $P2$-Welle eine große diagnostische Bedeutung haben kann. Wegen ihrer hohen Dämpfung ist eine geringe Modifikation der Ultraschallgeräte notwendig. Nach der ersten Reaktion der praktizierenden Ärzte kann diese Anwendung besonders wichtig in Mikrosonden bei Herztransplantationen sein.

Die Forschung auf dem Gebiet der Stoßwellen in porösen Körpern ist hauptsächlich durch die Anwendung in Lithotripsie und Orthopädie motiviert. Die in diesem Jahr abgeschlossene Aufgabe betrifft die Untersuchung der Möglichkeit der Entstehung von Stoßwellen in porösen Körpern in Abhängigkeit von der Amplitude (Stärke) der Schallwellen. In der Arbeit auf diesem Gebiet wurde angenommen, daß die Eigenschaften des Skeletts linear sind und die für das Wachstum der Stoßwellen notwendige Nichtlinearität in dem Stoffgesetz des Fluids vorhanden ist. Diese Bedingungen sind nur näherungsweise in der Biomechanik erfüllt. Für die Werte der Materialparameter, die typisch für biologische Gewebe sind, wurde gefunden, daß die

Stoßwellen tatsächlich nach realistischen Zeiten wachsen können. Diese kritische Zeit ist durch die Formel gegeben

$$t_c = -\frac{1}{\Gamma_2} \ln\left(1 - \frac{\Gamma_2}{\mathbf{a}_0 \Gamma_1}\right), \qquad \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1} > 0,$$

wo $\mathbf{a}_0$ die Anfangsamplitude der Störung bezeichnet. Die Koeffizienten Γ_1, Γ_2 sind explizit von Materialeigenschaften abhängig. Offensichtlich ist das Wachstum der Stoßwellen nur für genügend große Amplituden möglich.
Die Arbeit enthält auch die Rankine-Hugoniot Bedingungen für zweikomponentige poröse Körper, die die Konstruktion der schwachen Lösungen der Feldgleichungen ermöglichen. Diese Lösungen werden weiter erforscht. Die wichtige Frage nach den Auswahlkriterien für Stoßwellen, die zur Eindeutigkeit führen, bleibt bis jetzt unbeantwortet.

Literatur

1. K. WILMAŃSKI, *On the acoustic waves in two-component inear poroelastic materials*, WIAS-Preprint No. 312 (1997).

2. K. WILMAŃSKI, *On the time of existence of weak discontinuity waves in poroelastic materials*, WIAS-Preprint No. 366 (1997), erscheint 1998 in: Arch. Mech.

3. K. WILMAŃSKI, *Acoustic waves in isothermal two-component poroelastic materials with diffusion*, erscheint 1998 in: Cont. Mech. Therm.

Schadstofftransporte in porösen Materialien

Bearbeiter: B. Albers, K. Wilmański

Kooperation: W. Geiger (Universität GH Essen)

Für die Modellierung von Transportvorgängen mit Massenaustausch in porösen Stoffen sind zwei grundlegende Schritte notwendig:
* die Struktur der Massenquellen für verschiedene Austauschmechanismen muß gefunden werden (z. B. heterogene chemische Reaktionen, Ablagerungen von Schadstoffen),
* die Stoffparameter für das neue Modell müssen bestimmt werden.
Die zweite Frage wurde mit Hilfe der analytischen und numerischen Simulationen untersucht. Die Kopplungseffekte im zweikomponentigen Körper wurden sowohl für kleine als auch große Verzerrungen analysiert. Im stationären Fall sind die folgenden Felder zu bestimmen:

ρ^F - Massendichte des Fluids,
$\mathbf{x}'^F$ - Geschwindigkeit des Fluids,
$\mathbf{F}^S$ - Deformationsgradient des Skeletts,
n - Porosität.

Die Geschwindigkeit des Skeletts ist gleich Null. Diese Felder erfüllen die folgenden Feldgleichungen

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Div}(\rho^F \mathbf{X}'^F) = 0, \quad \mathbf{X}'^F := \mathbf{F}^S \mathbf{x}'^F, \\
&\rho^F (\mathrm{Grad}\ \mathbf{x}'^F)\mathbf{X}'^F = \ \mathrm{Div}\ \mathbf{P}^F - \pi \mathbf{x}'^F, \\
&\mathrm{Div}\mathbf{P}^S + \pi \mathbf{x}'^F = 0, \qquad \mathrm{Div}\ (\Phi_0 \mathbf{X}'^F) = -\frac{n - n_0}{\tau},
\end{aligned}$$

wobei die Lagrangesche Beschreibung benutzt wird und $\mathbf{P}^F$, $\mathbf{P}^S$ die partiellen Spannungen der Komponenten und n_0 die Anfangsporosität bezeichnen. Außer π, Φ_0 und τ enthält das Modell die zusätzliche Kopplungskonstante β und die Konstante α, welche die Ausfuhr des Fluids durch den freien Rand beschreiben. Die letzte Aufgabe - die Formulierung des Randwertproblems für die durchlässigen Ränder des porösen Körpers - wurde bereits ausführlich bearbeitet.
Die analytischen Lösungen für den axialsymmetrischen linearen Fall eines Zylinders wurden gefunden. Die Ergebnisse werden für die Beschreibung des Massenaustausches zwischen dem Kohlenstoffmantel und Siliziumgas in Kristallzuchtaufgaben benutzt. Eine ähnliche nichtlineare Aufgabe für große Verzerrungen wurde mit Hilfe der Störungsmethode numerisch analysiert. Die Ergebnisse für Stoffkonstanten werden in der Analyse der Stoßwellen in biologischen Geweben (siehe: Projekt „Schallwellen und Stoßwellen in porösen Körpern“) angewandt. Besonders wichtig ist hier die Bestimmung der Relaxationszeit ($\tau \approx 0.01s$ für biologische Gewebe), die die Änderung der Porosität und demzufolge die Dämpfung der Wellen stark beeinflußt.

Literatur

1. B. ALBERS, *Randbedingungen für den zweikomponentigen porösen Körper auf dem Rand des Skeletts*, WIAS-Preprint No. 360 (1997).

2. K. WILMAŃSKI, *The thermodynamical model of compressible porous materials with the balance equation of porosity*, WIAS-Preprint No. 310 (1997), erscheint 1998 in: Transp. In Porous Media.

Martensitische Umwandlung

Bearbeiter: K. Wilmański

Kooperation: I. Müller (TU Berlin), M. Šilhavý (ČAdW, Prag)

Spannungsinduzierte martensitische Phasenumwandlungen gehören zu den experimentell bestuntersuchtesten Fällen der Solid-Solid-Umwandlungen. Die Modellbildung, die in der Forschungsgruppe unternommen wurde, bezieht sich auf Vorgänge, die im inneren Bereich der Spannungs-Dehnungs-Hysterese stattfinden. Die Modelle, die man in der Literatur finden kann, sind nicht in der Lage, diese Vorgänge zu beschreiben. In dem neuen Modell wurde berücksichtigt, daß die Kraft-Dehnungs-Kurven, die in dehnungskontrollierten Experimenten beobachtet werden, durch eindimensionale Modelle nicht widergespiegelt werden können. In der freien Gibbsschen Energie muß ein Beitrag vorhanden sein, der die Energie der heterogenen Verzerrung beschreibt:

$$g(\sigma,z) = zg_M(\sigma) + (1-z)g_A(\sigma) + A(\sigma,z),$$

wo g, g_A und g_M die Gibbssche freie Energie der Probe, der reinen austenitischen Phase und der reinen martensitischen Phase beschreiben. z ist die Phasenfraktion der martensitischen Phase und A ist der Beitrag der Energie der heterogenen Verzerrung. In üblichen Modellen dieser Phasenumwandlung wird angenommen, daß die Energie A proportional zu dem Faktor $z(1-z)$ mit einem konstanten Koeffizienten ist. Für das neue Modell werden die Grundlagen aus der statistischen Mechanik gewonnen. Das Modell wird mathematisch mit Hilfe der Annahme der Konvexität Rank 1 bearbeitet. Insbesondere wurde ein Variationsprinzip formuliert. Die Untersuchungen auf diesem Gebiet werden in Zusammenarbeit mit der Forschungsgruppe von Prof. Ingo Müller (Technische Universität Berlin) und mit Prof. Miroslav Silhavy (Tschechische Akademie der Wissenschaften Prag) durchgeführt.

Literatur

1. K. WILMAŃSKI, *Papers on Ersatz-model of stress-induced pattern formation in shape memory alloys*, Report No. 425, FB 10, Universität-GH Essen, 1993.

4.8 Gruppenübergreifende Projekte

4.8.1 Projekte

Modellierung, Simulation und Optimierung der Oberflächenhärtung von Stahl

Bearbeiter: J. Fuhrmann (FG 3), D. Hömberg (FG 1), M. Uhle (FG 3)

Kooperation: O. Biro (Technische Universität Graz), J. Sokolowski (Université de Nancy I)

Zur Rückbindung der wissenschaftlichen Arbeit an die Praxis wurde verstärkt der Dialog mit der Industrie gesucht. Dazu diente die Präsentation des im letzten Jahr mit Hilfe von Komponenten der *pdelib* (siehe S. 58) entwickelten Solvers für die Simulation des Oberflächenhärtens auf der HANNOVER MESSE. Erstes konkretes Ergebnis ist ein Antrag auf Förderung durch die *Stiftung Industrieforschung* mit dem Thema „Optimierung des Härtens und Umschmelzens mit Laser- und Elektronenstrahl“, an dem zwei Unternehmen aus Sachsen als Pilotunternehmen beteiligt sind.

Die wissenschaftliche Arbeit konzentrierte sich im vergangenen Jahr auf drei Schwerpunkte:

Numerische Simulation der Oberflächenhärtung
Die Entwicklungsarbeit an dem Programm zur Oberflächenhärtung von Stahl wurde fortgesetzt. Die Beschreibung des zugrundeliegenden Modells sowie umfangreiche Simulationsrechnungen sind in [2] dokumentiert. Die folgende Abbildung zeigt die zeitliche Entwicklung der Temperatur und des Volumenanteils der einzelnen Phasen in einem Punkt im Bereich der Härtezone während einer Laserhärtung mit zusätzlicher Schwingung orthogonal zur Vorschubrichtung.

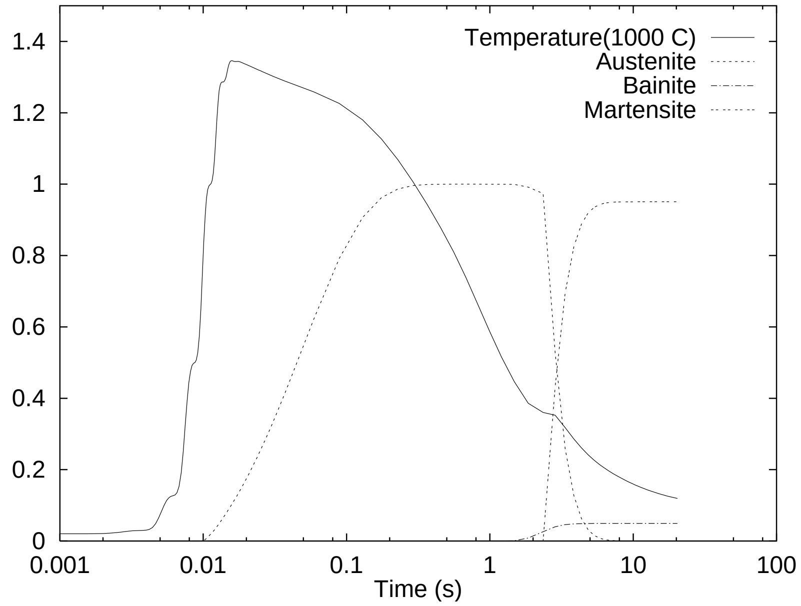


Abb. 1: Zeitliche Evolution der Temperatur und der Volumenanteile von Austenit, Bainit und Martensit im Bereich der Härtezone

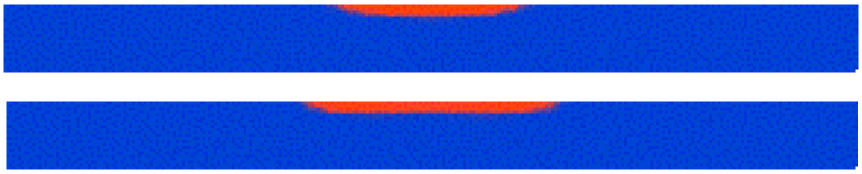


Abb. 2: Profil einer Laserhärtung mit sägezahnförmiger (oben) bzw. sinusförmiger Schwingung (unten) orthogonal zur Vorschubrichtung

Eine Möglichkeit zur Verbreiterung der Härtespur bietet die Oszillation des Laserstrahls orthogonal zur Vorschubrichtung. Abbildung 2 zeigt die Resultate für zwei verschiedene Schwingungsformen mit gleicher Amplitude.

Numerische Verfahren für die 3D-Simulation der induktiven Erwärmung

Die physikalischen Effekte bei der induktiven Wärmebehandlung werden mathematisch durch die Maxwellschen Gleichungen, die Wärmeleitungsgleichung, Materialgleichungen und der Aufgabenstellung angepaßte Rand- und Anfangswerte beschrieben, wobei die zeitliche Ableitung der Verschiebungsstromdichte sowohl im Metall wie auch im umgebenden Gebiet vernachlässigt werden kann. Eine wesentliche Reduzierung der Dimension des Gleichungssystems läßt sich mit der Einführung von vektoriellen und skalaren Potentialen erreichen, wobei die Aufgabenstellung durch zusätzliche Terme für die Coulomb-Eichung und daraus resultierende weitere Randbedingungen zu ergänzen ist [1]. Die numerische Berechnung der elektromagnetischen Felder erfordert im allgemeinen die Lösung von zwei gekoppelten Wirbelstromproblemen (Induktor Ω_{l_1}, Werkstück Ω_{l_2})

$$
\begin{aligned}
rot\frac{1}{\mu_l}rot\vec{A}_l - grad\frac{1}{\mu_l}div\vec{A}_l + \sigma\frac{\partial\vec{A}_l}{\partial t} + \sigma grad\Phi &= \vec{0}\\
div\left(-\sigma\frac{\partial\vec{A}_l}{\partial t} - \sigma grad\Phi\right) &= 0
\end{aligned}
$$

und eines stationären Magnetfeldproblems im nichtleitenden Gebiet Ω_n

$$
rot\frac{1}{\mu_n}rot\vec{A}_n - grad\frac{1}{\mu_n}div\vec{A}_n = \vec{0}.
$$

Zur Erreichung hoher Flexibilität bei der Beschreibung von Induktor- und Werkstückgeometrien verwenden wir finite Elemente zur Diskretisierung.

Im Berichtszeitraum wurden Arbeiten zur Modellierung, zur Gittergenerierung und zur Lösung der linearen Gleichungssysteme durchgeführt.

In Zusammenarbeit mit Herrn Dr. Biro (TU Graz) wurden geeignete zweidimensionale Modelle mit dem Programm FEM2D simuliert, um daran die Stromdichteverteilung im Induktor in Abhängigkeit von der Generatorfrequenz und der Permeabilität des Metalls zu studieren. Es zeigte sich dabei, daß bei den in der Praxis auftretenden Mittelfrequenzen und den zu erwartenden Werten für die Permeabilität im Eisen keine Vereinfachungen der Induktormodellierung möglich sind und das Induktorgebiet als Wirbelstromgebiet zu rechnen ist (Abb. 3).

Die numerischen Probleme an Grenzflächen zwischen hochpermeablem Eisen und Luft ($\mu_{Eisen} \gg \mu_{Luft}$) haben ihre Ursache in der Grenzflächenbedingung

$$
\vec{n}_n \cdot \frac{1}{\mu_n}div\vec{A}_n + \vec{n}_l \cdot \frac{1}{\mu_l}div\vec{A}_l = 0
$$

und der Stetigkeit aller Komponenten des Vektorpotentials. Deshalb sollen Kantenelemente zur Ortsdiskretisierung verwendet werden, bei denen nur die Tangentialkomponente des Vektorpotentials stetig ist.

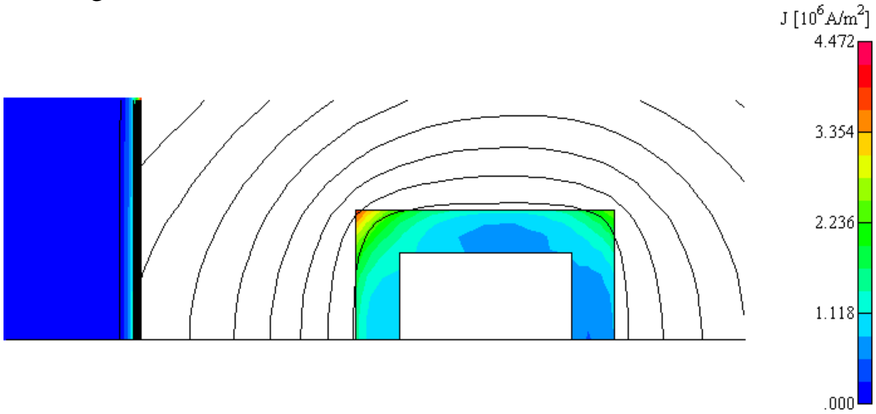


Abb. 3: Stromdichteverteilung im Induktor bei f=10 kHz und μ=200

Bei den hier auftretenden speziellen Geometrien ist es notwendig, gegebene innere Materialgrenzen exakt widerzuspiegeln. Dafür wurde im Berichtszeitraum das 3D-Gittergenerierungsprogramm T3D auf der Basis paralleler Schichten entwickelt, das die Konstruktion von Gittern mit Delaunay-Eigenschaften gestattet.
Zur Erzeugung einer blocktridiagonalen Matrixstruktur für FEM-Matrizen werden Verfahren zur Reduktion der Bandbreite [3] benutzt. Diese Matrixstruktur läßt sich so in Untersysteme zerlegen, daß Eigenschaften der ursprünglichen Matrix auf diese vererbt werden. Für die entstandene Gleichungssystemstruktur wurde ein Verfahren entwickelt, welches die parallele Lösung von Untersystemen gestattet. Diese Methode soll für die Konstruktion hierarchischer Vorkonditionierer genutzt werden.

Optimierung von Wärmebehandlungen

In [4] wurden notwendige Optimalitätsbedingungen für die optimale Steuerung des Laserhärtens mit punktweisen Zustandsbeschränkungen hergeleitet. Die praktische Umsetzung soll im Rahmen des oben erwähnten Förderungsantrags „Optimierung des Härtens und Umschmelzens mit Laser- und Elektronenstrahl“ erfolgen.
Bei den zahlreichen Diskussionen während der HANNOVER MESSE hat sich die Aufgabenstellung, die optimale Form eines Induktors zu finden, als besonders praxisrelevant herausgestellt. Dieses Problem soll in [5] mit Methoden des *Optimal Shape Design* untersucht werden. Grundlage ist eine Vektorpotentialformulierung der Maxwellschen Gleichungen, gekoppelt mit der Energiebilanz und einer Differentialgleichung für die Evolution des Austenitanteils, der als Maß für die Güte der erreichten Induktorform verwendet wird. Ziel ist es, eine Induktorgeometrie zu finden, die eine gewünschte Austenitverteilung möglichst gut approximiert.

Literatur

1. O. BIRO, K. PREIS, *On the Use of the Magnetic Vector Potential in the Finite Elemente Analysis of Three-Dimensional Eddy Currents*, IEEE Trans. on Magnetics, Vol. **25** (1989), pp. 3145–3159.

2. J. FUHRMANN, D. HÖMBERG, *Numerical simulation of surface heat treatments*, WIAS-Preprint No. 375 (1997), eingereicht in: Internat. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow.

3. N. E. GIBBS, W. G. POOLE, P. K. STOCKMEYER, *An algorithm for reducing the bandwidth and profile of a sparse matrix*, SIAM J. Numer. Anal., Vol. **13** (1976), pp. 236–250.

4. D. HÖMBERG, J. SOKOŁOWSKI, *Optimal control of laser hardening*, WIAS-Preprint No. 315 (1997), erscheint in: Adv. Math. Sci. Appl.

5. D. HÖMBERG, J. SOKOŁOWSKI, *Optimal shape design of inductor coils for surface hardening*, in Vorbereitung.

Komponenten für die Data Mining Software Clementine

Bearbeiter: J. Fuhrmann (FG 3), H.-J. Mucha (FG 6), G. Reinhardt (FG 3)

Kooperation: C. Steinborn (FU), U. Grimmer, G. Nakhaeizadeh, H. Kauderer (Forschungszentrum Daimler-Benz AG, Ulm)

3D-Dichteschätzung. Zur Suche nach Strukturen und Anomalien in umfangreichen Datensammlungen können effektive Techniken der Clusteranalyse (automatische Klassifikation) eingesetzt werden. Zum besseren Verständnis von Daten und/oder Klassifikationsergebnissen können mehrdimensionale Dichteschätzungen hilfreich und bestens geeignet sein. Geeignet deshalb, weil bei Massendaten die Bedeutung eines einzelnen Objektes (Punktes im hochdimensionalen Raum) gegen Null geht und die üblichen Punkte-Plots schwer lesbar und auch rechentechnisch uneffektiv werden.
Im allgemeinen werden der nichtparametrischen Dichteschätzung geeignete Projektionstechniken vorangestellt, die möglichst viele Informationen des hochdimensionalen Beobachtungsraumes in einen niedrigdimensionalen Unterraum abbilden. Die adaptive Clusteranalyse kann die zur Struktursuche geeigneten Projektionsparameter berechnen.
Die Software wurde auf der Grundlage der OpenGL-basierten Toolbox *gltools* des WIAS entwickelt. Es können nichtparametrische Dichteschätzungen von unklassifizierten oder gruppierten Daten angezeigt werden. Interaktive Aktionen wie z. B. Drehungen und intuitive Bedienungsweisen erlauben eine schnelle Information des Benutzers über die Konturen der Punktwolken.

Abb. 1: Nichtparametrische Dichteschätzung: Suche nach Strukturen in unklassifizierten Daten

Algorithmen für die partitionierende Clusteranalyse. Für die Clusterung von Daten wurden für eine vom Forschungszentrum der Daimler-Benz AG in Ulm vorgegebene Datenstruktur der L1- und L2-Algorithmus angepaßt und implementiert. Die Datenstruktur ist für Variablen vorgesehen, die quantitative, ordinale (ganzzahlig) und binäre Werte annehmen können. Qualitative Daten (symbolische Werte wie z. B. die Haarfarben „braun", „blond" und „schwarz" oder nominale ganzzahlige Werte wie z. B. die Kodierung 1, 2, ... für den Familienstand einer Person) können vor der Clusteranalyse in binäre Variablen rekodiert werden.
Beim L1-Algorithmus ist der Repräsentant eines Clusters aus den Medianen der einzelnen Variablen zu bestimmen. Durch eine Modifikation des quick-sort-Algorithmus (C. A. R. Hoare) gelingt es, den Median mit linearem Aufwand von $O(n_K)$ zu bestimmen (n_K = Anzahl der Variablen pro Cluster K). Damit liegt der Aufwand zur Bestimmung der Repräsentanten des L1-Algorithmus in der gleichen Größenordnung wie beim L2-Algorithmus, bei dem der Repräsentant eines Clusters aus den Mittelwerten der Attribute gewählt wird.
Allerdings muß beachtet werden, daß beim L1-Algorithmus ein Repräsentant durch Speicheroperationen (Sortieren) ermittelt wird, während beim L2-Algorithmus dies schnelle arithmetische Operationen sind.
Durch die Aufwandsreduzierung bei der Bestimmung der Repräsentanten wird der L1-Algorithmus für die Verarbeitung großer Datenmengen praktisch relevant. Da beim L1-Algorithmus nur absolute Differenzen benutzt werden (im Gegensatz zu den quadrierten Differenzen beim L2-Algorithmus), beeinflussen Ausreißer in den Daten weniger stark das Klassifikationsergebnis. Eine Integration in die Data Mining Software Clementine über das Forschungszentrum der Daimler-Benz AG in Ulm ist vorgesehen.

Distanzbasierte Klassifikation. Wenn Informationen über Klassen bereits vorliegen, dann steht meist das Vorhersageproblem im Mittelpunkt des Interesses. Hier konkurrieren vor allem statistische Methoden (z. B. Diskriminanzanalyse), neuronale Netze und Entscheidungsbaumverfahren. Die adaptive distanzbasierte Klassifikation wird bereits seit einem Jahr erfolgreich beim Kredit-Scoring auf der Basis kategorialer (qualitativer) Daten angewendet.
Liegen sowohl qualitative als auch quantitative Informationen über die zu klassifizierenden Objekte vor, dann kann das Modell der distanzbasierten Klassifikation z. B. nach der Diskretisierung der quantitativen Variablen angewendet werden. Ein Beispiel soll die Leistungsfähigkeit dieses Ansatzes graphisch veranschaulichen. Gegeben seien 2 Klassen mit je 150 Objekten im 20-dimensionalen Beobachtungsraum. Die Klasse 1 habe eine Normalverteilung mit dem Erwartungswert 0 und der Kovarianzmatrix I (Einheitsmatrix). Die Erwartungswerte der Klasse 2 seien nur um Wurzel von ein Zwanzigstel von 0 verschieden und die Kovarianzmatrix sei das Vierfache der Einheitsmatrix. Das ist ein bekanntes, schwieriges Klassifikationsproblem. Die Diskretisierung wurde hier durch äquidistante Einteilung in Teilintervalle durchgeführt. Die beiden Bilder der Abb. 2 zeigen die Hauptkomponentenprojektion der zufällig generierten Daten und die Hauptkomponentenprojektion dieser Daten nach erfolgter Diskretisierung und optimaler Skalierung. Abb. 3 gibt auch eine nichtparametrische 3D-Dichteschätzung der Klassen der diskretisierten und skalierten Daten wieder, was insbesondere im Falle großer Datenmengen geeigneter als der Punkteplot in Abb. 2 ist. Schließlich zeigt das letzte Bild die Fehlerkurve des Distanzklassifikators in Abhängigkeit vom Trennpunkt auf der Distanzachse.

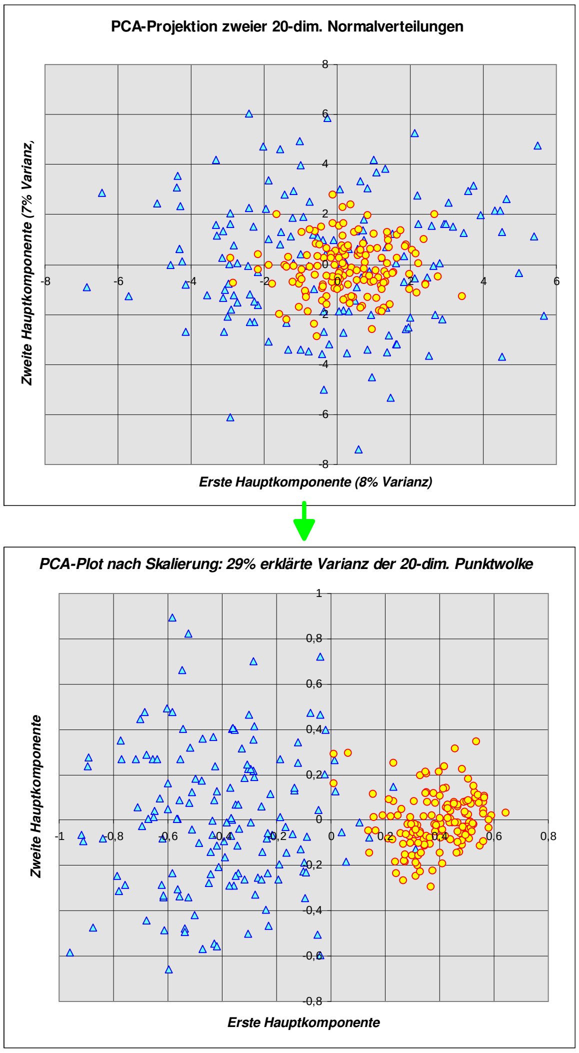


Abb. 2: Hauptkomponentenprojektion vor und nach der Diskretisierung und Skalierung

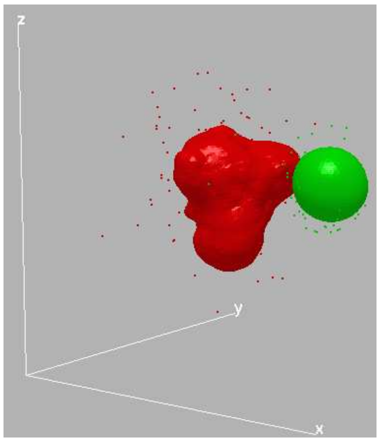


Abb. 3: Klassendichten. Die 3D-Projektion erklärt 35 % der Varianz der Punktwolke

Literatur

1. U. GRIMMER, *Clementine: Data Mining Software*, in: Classification and Multivariate Graphics: Models, Software and Applications, WIAS-Report No. 10 (1996).

2. H. KAUDERER, H.-J. MUCHA, *Supervised Learning with Qualitative and Mixed Attributes. A Local Scaling Approach to Discriminate between Good and Bad Credit Risks*, in: Information Systems and Data Analysis, Proc. 21th Annual Conference of the GfKl, Univ. of Potsdam 1997. Series „Studies in Classification, Data Analysis, and Knowledge Organization“, (Balderjahn, I., Mathar, R., Schader, M., eds.), Springer-Verlag, in Druck.

3. H.-J. MUCHA, R. SIEGMUND-SCHULTZE, K. DÜBON, *Adaptive Cluster Analysis Techniques - Software and Applications*, in: Data Science, Classification, and Related Methods, Series „Studies in Classification, Data Analysis, and Knowledge Organization“, (Hayashi, C., Ohsumi, N., Yajima, K., Tanaka, Y., Bock, H.-H., Baba, Y., eds.), Springer-Verlag Tokyo (1998), pp. 231–238.

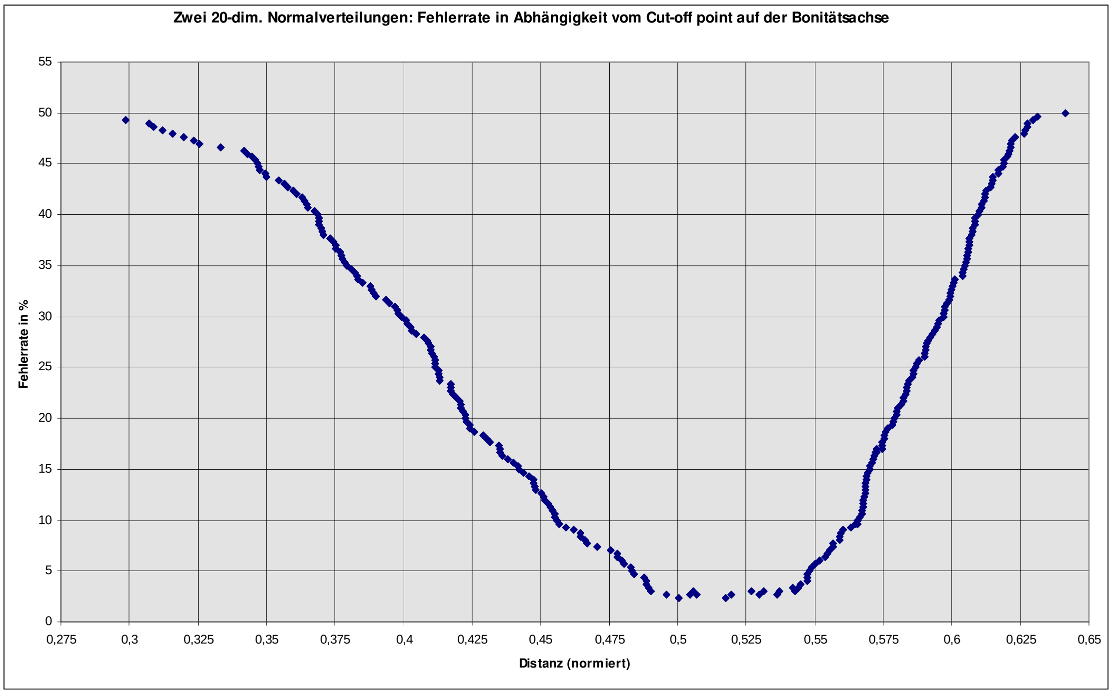


Abb. 4: Fehlerkurve über der Distanzachse

Approximation und Optimierung von Platten

Bearbeiter: H. Langmach (FG 3), J. Sprekels (FG 1), D. Tiba (Rumänische Akademie der Wissenschaften)

Kooperation: V. Arnautu (University of Iaşi, Dept. of Mathematics, Rumänien)

Die Auslenkung einer dünnen Platte unter Einwirkung einer Kraft $f = f(x_1, x_2)$ wird durch die Lösung $y = y(x_1, x_2)$ eines Randwertproblems zur biharmonischen Gleichung

$$\Delta(u^3 \Delta y) = f \quad \text{in } \Omega \subset \mathbb{R}^2 \tag{1}$$

beschrieben, wobei $u = u(x_1, x_2)$ die Dicke der Platte bedeutet. Als Randbedingung treten dabei folgende Fälle auf:

$$y = \Delta y = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \qquad \text{(gestützte Platte)}, \tag{2}$$

$$y = \frac{\partial y}{\partial n} = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \qquad \text{(eingespannte Platte)}. \tag{3}$$

Es wurde eine neue Methode zur Approximation und Optimierung von Platten erarbeitet, die auf der Dekomposition des Randwertproblems (1), (2) bzw. (1), (3) zur biharmonischen Gleichung in zwei elliptische Randwertprobleme beruht, die als Nebenbedingungen in ein Problem der Optimalen Steuerung eingehen. Dabei wird die Einhaltung der Randbedingungen für die Platte mittels eines im Zielfunktional aufgenommenen Strafterms erreicht. Neben dem Randwertproblem für die Platte wurde auch eine daraus abgeleitete Variationsungleichung behandelt. Die Konvergenz des Strafverfahrens konnte für beide Fälle unter allgemeinen Voraussetzungen bewiesen werden.
Der gewählte Zugang eröffnet die Möglichkeit, die Lösung des Problems mit Hilfe stückweise linearer finiter Elemente zu approximieren, die leicht implementiert werden können.
Im Zusammenhang mit der Optimierung von Platten wurden u. a. Probleme betrachtet, bei denen die zu optimierende Größe von der lokalen Dicke u der Platte abhängt (Minimierung des Volumens, optimal shape design). Die folgende Abbildung zeigt die Funktion $L = u^{-3}$ nach Minimierung des Volumens $\int_\Omega u(x_1, x_2) dx_1 dx_2$ der Platte bei vorgegebenen Restriktionen an L unter unsymmetrischer Last f.

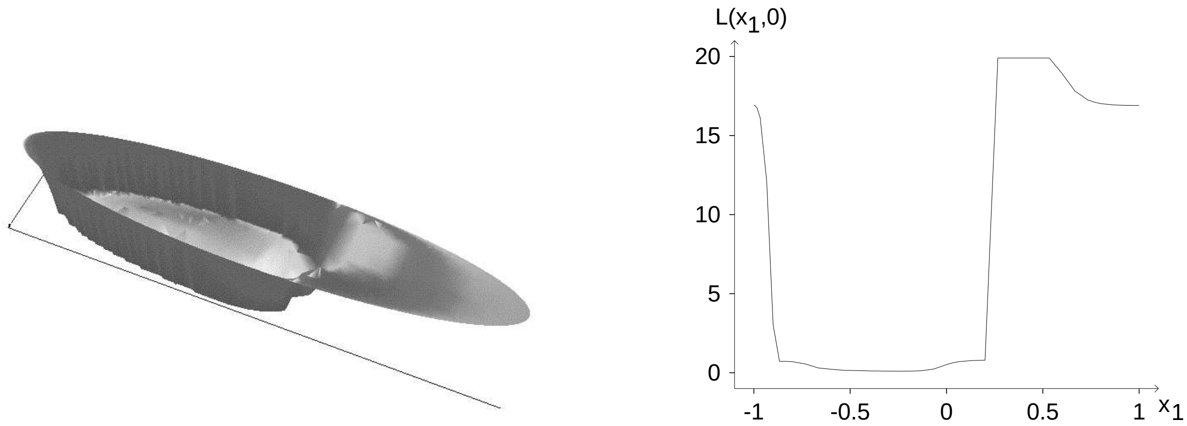


Abb. 1: Optimaler Wert für $L = u^{-3}$

Für die Lösung der in den genannten Problemklassen als Nebenbedingungen auftretenden elliptischen Randwertprobleme wurden die im WIAS entwickelten Softwarekomponenten *pdelib* (siehe S. 58) eingesetzt.

Literatur

1. V. ARNAUTU, H. LANGMACH, J. SPREKELS, D. TIBA, *On the approximation and optimization of plates*, WIAS-Preprint No. 357 (1997).

2. J. SPREKELS, D. TIBA, *A duality approach in the optimization of beams and plates*, WIAS-Preprint No. 335 (1997), eingereicht.

5 Wissenschaftlich-technische Dienste

5.1 Bibliothek

Zusammenfassung

Die Bibliothek des WIAS hat den Charakter einer Spezialbibliothek, die den Institutsmitarbeitern und Gästen, den Kooperationspartnern und der Fachöffentlichkeit zur Benutzung zugänglich ist. Sie stellt aus eigenen Beständen, sofern diese keinen einschränkenden Urheberrechts- oder Anbieterbedingungen unterliegen, an den gesamten Nutzerkreis bereit. Für die wissenschaftliche Arbeit der Institutsmitarbeiter beschafft sie auch Literatur durch Mitnutzung (Fernleihe oder Dokumentlieferung) fremder Bestände.

Das Profil der Bibliothek orientiert sich an den wissenschaftlichen Zielsetzungen des Instituts, seinem Forschungsprogramm und den konkreten jeweils bearbeiteten Projekten und Forschungsaufgaben in den Arbeits- und Forschungsgruppen.
Dementsprechend wird vorrangig *Fachliteratur* zur Analysis und Stochastik sowie speziell auf deren Anwendungsgebieten erworben. Hierzu gehören derzeit vor allem Gebiete der Mathematischen Physik und der Kontinuumsmechanik. Wichtige Standardwerke aus der Numerik (insbesondere für partielle Differentialgleichungen) werden schwerpunktmäßig beschafft.
Aktuell relevante Informatikliteratur entsprechend der Hard-, Soft- und Netware-Konfiguration des Instituts muß in begrenztem Umfang ebenfalls erworben werden, sofern sie nicht nur kurzfristig benötigt wird.

Folgende *Medienarten* werden gehalten: Zeitschriften, Bücher (Monographien, Sammelwerke, vereinzelt Lehrbücher), die teils als Einzelwerke, teils in Reihen erscheinen, Preprints und Reports, eigenständige CD-ROM (vornehmlich Datenbanken, vereinzelt Nachschlagewerke) sowie Disketten oder CD-ROM, die als Beigaben zu Büchern (Bookware) unselbständig sind; ferner Loseblattausgaben.

Die auf klassische und überwiegend auf moderne Technologien gestützte *Literaturinformation* erfolgt in enger Zusammenarbeit mit der in der Abteilung Rechentechnik angesiedelten Fachinformation.

Kostenpflichtige und lizenzbehaftete Online-Recherche kann nur Institutsangehörigen angeboten werden.

Inhaltlicher Bestandsaufbau

Als Institutsbibliothek haben wir von je her den *Bestandsaufbau* an der wissenschaftlichen Thematik des Instituts orientiert und in Auswahl initiativ oder auf Empfehlung durchgeführt. Die Verfügbarkeit von Datenbanken und Verlags- und Bibliotheks-Servern via Internet hat unsere Möglichkeiten für die gezielte Auswahl relevanter Titel noch verbessert. Die Zusammenarbeit zwischen den wissenschaftlichen Mitarbeitern und den Bibliotheksangestellten ist dadurch intensiviert worden.
Dieses partnerschaftliche Verhältnis zwischen Bibliothek und Forschungsgruppen ist darüber hinaus besonders durch die Serviceleistung *Leihverkehr mit fremden Bibliotheken* bedingt und gefördert: Die Wissenschaftler werden teilweise entlastet, und die Bibliothek gewinnt Kenntnis und Kompetenz in bezug auf den jeweiligen konkreten Literaturbedarf, die weitere Beratung ermöglicht. Bibliographische Recherchen in CD-ROM-Datenbanken, im Internet und

in eigenen Datensammlungen führt die Bibliothek sowohl für die Institutsmitarbeiter (neben der Selbstbedienung) als auch für die eigenen Arbeitsaufgaben durch.

Zahlenmäßige Bestandsentwicklung

- **Gesamtbestand**

  1997 wurden 211 Zeitschriften laufend gehalten, davon 153 durch Kauf erworbene (143 Fachzeitschriften und 10 sonstige) und 58 als Geschenk.

  Der Zugang an Bestandseinheiten betrug insgesamt rd. 3580 Stück, und zwar: 399 Bücher, 45 Erg.-Lfgn., 25 beigefügte CD-ROM und Disketten; 322 Zeitschriftenbände; 2792 Preprints/Reports. Aussonderungen wurden nicht vorgenommen.

  Damit beläuft sich der Gesamtbestand auf rd. 62 380 Medieneinheiten.

  Zeitschriften können nicht mehr in dem erforderlichen Maß gebunden werden, so daß für 1997 in der Zugangsstatistik rd. 400 Bände weniger sind. (Abgebrochene Zeitschriftenreihen sind bereits seit längerer Zeit mit einem ungebundenen Ende behaftet.)

- **Neu hinzugekommene Zeitschriftentitel Jhrg. 1997**

  Für den Jahrgang 1997 wurden im Vorjahr 18 Zeitschriftentitel neu bestellt, darunter 6 im Profil der FG Kontinuumsmechanik. Für weitere benötigte Titel kann die Gruppe bibliographische Information aus dem abonnierten CoDAS Web beziehen.

- **Abbestellte Zeitschriftentitel Jhrg. 1997**

  Um diese Profilanpassung zu ermöglichen und die jährliche Preissteigerung zusammen mit den im Plan 97 gekürzten Erwerbungsmitteln abzufangen, war 1996 eine rigorose Abbestellung erforderlich, so daß 33 Zeitschriftentitel ab 1997 nicht mehr im Bibliotheksbestand sind.

  1997 wurden die Abonnements bis auf 2 Titel für 1998 erneuert.

  Seit 1994 hat sich die Zahl der lfd. Fachzeitschriften von 202 auf 143 im Berichtsjahr bzw. 141 für den Jhrg. 1998 reduziert. Bei den Jahrgängen 1995, 96, 97 stehen den insgesamt 103 Abbestellungen (jeweils ausgelöst im Vorjahr) 44 Neu- bzw. Wiederbestellungen gegenüber.

- **Zusätzliche Erwerbungen**

  Der Bibliothek wurden durch Umwidmung zusätzliche Mittel für einmalige Beschaffungen zur Verfügung gestellt, die für Nachschlagewerke, Bücher, Zeitschriften-Rückergänzung und Einband verwendet wurden.

- **Die nächsten Veränderungen**

  werden sich durch das wachsende Angebot an elektronischen Versionen von Verlagszeitschriften ergeben, die dem Vernehmen nach (zumindest in den nächsten Jahren) auf etwa dem gleichen Preisniveau wie bisher die gedruckten Ausgaben liegen werden.

Damit werden zwar Mehrwert und Nutzungsvorteile angeboten, aber es entstehen auch Ungewißheiten und Nachteile sowie weitere Kosten durch Lizenzgebühren und ggf. optionalen Erwerb eines (stark rabattierten) Print-Exemplars. (Andere Kosten für Equipment usw. beim Käufer/Lizenznehmer außer Betracht gelassen!)

Mit der Umstellung auf vorrangig elektronischen Zugriff soll die permanente jährliche Preissteigerung begrenzt werden, aber gegenwärtig offensichtlich nur für längerfristig vertraglich gebundene (Groß)abnehmer (Bibliotheken-Konsortien), nicht für kleine Abonnenten.

Literaturbereitstellung aus eigenen Beständen

- Benutzungen *in der Bibliothek* und die Bereitstellung von kopierten Artikeln werden nicht registriert.
- Zeitschriften und Nachschlagewerke haben Präsenzcharakter und werden daher nur in dringenden Ausnahmefällen und kurzfristig verliehen.
- Arbeitsplatzliteratur wird in Dauerleihe an Sonderstandorte verliehen.
- Die Zahl der Entleihungen *aus der Bibliothek* an Büchern und Preprints oder Reports betrug 4 700; für fremde Einzelnutzer rd. 1 000.
- Direkte schriftliche oder telefonische Anfragen (außerhalb des Leihverkehrs) sind zahlenmäßig gering (rd. 80) und werden im üblichen Umfang (bis 20 S.) unentgeltlich geliefert.

Leihverkehr mit fremden Bibliotheken

- überwiegend aus Berliner Bibliotheken (sonst in Fernleihe) wurden für Institutsmitarbeiter rd. 530 Beschaffungsvorgänge (Mehrfachversuche nicht gezählt) erledigt.
- Das Schwergewicht liegt bei Büchern und Kongreßberichten. Es mehren sich die Fälle, in denen Bücher in Berliner Bibliotheken nicht vorhanden und beim Verlag vergriffen sind.
- Bei nicht verfügbaren Zeitschriftenartikeln wird künftig der kostenpflichtige Dokument-Lieferdienst „Subito“, der im November ans Netz ging, hilfreich sein.

5.2 Fachinformation

Die Fachinformation des WIAS bietet kontinuierlich und aktuell u. a. die Online-Recherchemöglichkeit in einem breiten Spektrum bibliographischer Datenbanken für alle Mitarbeiter des WIAS an. Stehen bei diesen Retrievalmöglichkeiten die Nutzung der beiden für die Mathematik wichtigsten Datenbanken „Zentralblatt für Mathematik und ihre Grenzgebiete" und „Mathematics Reviews" im Vordergrund, werden aufgrund der Zielstellung des WIAS, projektorientierte Forschung zu betreiben, im realisierten Datenbankretrieval auch andere naturwissenschaftliche und ingenieurwissenschaftliche Datenbanken zur uneingeschränkten Nutzung in der Fachinformation vorgehalten.
Komplexe Recherchen werden nach wie vor in bewährter Form in der Regel zentral in der Fachinformation durchgeführt. Grundlage hierzu sind die mit den Fachinformationszentren FIZ-Karlsruhe und FIZ-Technik jährlich abgeschlossenen Nutzungsverträge.
Das Spektrum der Recherchemöglichkeiten an den Wissenschaftler-Arbeitsplätzen konnte im Berichtszeitraum erweitert werden. Dazu zählen in erster Linie die institutsoffene Nutzung von „DB-MATH" (FIZ-Karlsruhe) und „MathSciNet" (AMS) über das WWW, deren Nutzung jetzt im WIAS für alle Rechnerplattformen realisiert wurde. Grundlage für diese Recherchemöglichkeiten sind entsprechende Pauschalverträge mit der DMV bzw. mit AMS.
Diese Online-Dienste werden durch Offline-Nutzung kostenpflichtiger Datenbanken auf CD-ROM zweckmäßig ergänzt. Von der Fachinformation wird darüber hinaus eine angemessene und effektive Nutzung der weltweiten Netzdienste (WWW) individuell angeboten und rege genutzt.
Im WWW aktuell und als elektronische Versionen angebotene mathematische Zeitschriften werden auf dem Server des WIAS, soweit sie für das im Institut bearbeitete Aufgabenspektrum von Relevanz sind, von der Fachinformation in der Kollektion „Electronic Journals" mit ihren aktuellen Links bereitgestellt. Diese Links verweisen entweder auf ein begrenztes Informationsangebot oder (in der Regel nur für authorisierte Nutzer und kostenpflichtig) auf Volltexte.
Dazu gehört z. B. der Dienst CoDASweb des „Institute of Physics" (IoP), über den Inhaltsangaben und Abstracts zu derzeit 63 physikalischen Journalen institutsoffen genutzt werden können.
Mit diesem Informationsangebot wird es den wissenschaftlichen Mitarbeitern des WIAS ermöglicht, sich effektiv über die veröffentlichte Fachinformation weltweit zu orientieren.
Auf dem WIAS-Server (http://www.wias-berlin.de) werden von der Fachinformation die im Institut erstellten Preprints, die den erreichten Forschungsstand widerspiegeln, in den derzeit üblichen Formaten bereitgestellt (http://www.wias-berlin.de/WIAS_publ_preprints). Die Benutzung des WWW als schnellem und effektivem Distributionsmittel für die Preprints erfordert deren einheitliche Beschreibung durch die Informationsanbieter. Hierzu hat sich der Dublin Core als beschreibende Metasprache zur Erschließung und zum Nachweis international durchgesetzt. Dieser Prozeß wurde im WIAS mit der Einreichung der Preprints verknüpft und weitestgehend automatisiert. Damit ist gewährleistet, daß die vom WIAS im WWW bereitgestellten Preprints weltweit recherchierbar sind.
Der Fachinformationsbeauftragte des WIAS arbeitet in der IuK-Kommission der wissenschaftlichen Fachgesellschaften mit. Dadurch ist sichergestellt, daß die nationalen und internationalen Empfehlungen auf dem Gebiet IuK im WIAS zügig umgesetzt werden.

5.3 Rechentechnik

Die Gruppe Rechentechnik besteht aus fünf Mitarbeitern. Zwei Mitarbeiter sind für die technische Betreuung der Rechner und deren Verkabelung 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. Bibliotheksautomatisierung 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 1996):

- 53 (53) PC (33 x 80486, 20 x Pentium) mit MS-DOS und MS Windows
- 1 (2) DEC VAX (1 x 4000-300) unter OpenVMS
- 46 (38) DEC Alpha (2 x 3000-300X, 5 x 3000-400, 1 x 3000-500, 7 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, 8 x 500/400, 2 x 500/500, 1 x 800 5/400, 1 x 4100 5/400, 1 x 433au) unter DEC UNIX (45), OpenVMS (1)
- 22 (19) Silicon Graphics (13 x Indy, 3 x Indigo2, 2 x Octane, 1 x Challenge S, 1 x Challenge DM, 1 x Onyx, 1 x Origin 2000) unter IRIX
- 1 (6) SUN (1 x SUNserver 630) unter SunOS
- 1 (1) HP (1 x HP 9000/715) unter HP UX

Neben dem Einsatz immer leistungsfähigerer Workstations und PCs bestimmten folgende Projekte die Entwicklung der Rechentechnik des WIAS im Jahr 1997:

1. ATM-Backbone

   Die Leistungsfähigkeit des Backbones wurde durch den Einsatz neuer Access-Switches (Fore ES3850) und Ersatz des ATM-Switches ASX200 16 Ports durch einen ASX1000 mit bis zu 64 Ports erhöht. Außerdem wurde das gesamte Netz auf LAN-Emulation umgestellt. Das ermöglichte den Anschluß von Servern direkt an das ATM. Server, bei denen der direkte Anschluß an das ATM aus technischen Gründen nicht möglich war, wurden mit Fast Ethernet über einen Switch (Fore ES3810) angeschlossen. Damit hat sich die Zugriffsgeschwindigkeit zu den Servern wesentlich erhöht.

2. WWW-Server

   Der bisher genutzte WWW-Server (HyperG auf SGI Challenge S) wurde abgelöst durch die neueste Version HyperWave auf einer DEC 3000 M 500. Dabei wurden alle Dokumente (ca. 5000) des alten Servers auf den neuen Server überführt und dabei in die Standardsprache HTML umgesetzt. Damit sind die Voraussetzungen gegeben, diesen Server weit mehr als bisher zu einem Arbeitsinstrument der Wissenschaftler des WIAS zu machen.

3. Grafiklabor

   Um die im Grafiklabor erzeugten Präsentationen bei Vorträgen im und außerhalb des WIAS vorführen zu können, wurde ein Notebook (SNI) mit Overhead-Display beschafft. Damit ist es möglich, unabhängig von den technischen Möglichkeiten des Veranstalters, Videos und Grafiken zu präsentieren.

4. Weitverkehrsnetz

   Das WIAS wurde im Jahr 1997 an das BWIN angeschlossen. Dadurch hat sich der Zugriff zu Rechnern außerhalb des WIAS wesentlich verbessert (von 64 kbit/s auf 10 Mbit/s Bandbreite). Außerdem wurde das WIAS durch Installation eines BRAIN-Routers in das BRAIN-Kernnetz aufgenommen. Dadurch wird es möglich, schnelle ATM-Verbindungen zu anderen Wissenschaftseinrichtungen in Berlin aufzubauen.

5. Compute-Server

   Der 1996 beschaffte Compute-Server SGI Origin 2000 hat nach anfänglichen Problemen mit der Systemsoftware bei einigen Aufgaben seine volle Leistungsfähigkeit bewiesen und wird daher immer stärker genutzt. Außerdem wurde ein DECServer 4100 mit 4 Prozessoren (400 MHz) und einem GByte RAM installiert. Diese Maschine dient als Server allen Nutzern und wurde sehr gut angenommen.

6 Publikationen, wissenschaftliches Leben

6.1 Veröffentlichungen

Monographien

A. BOVIER, P. PICCO (HRSGB.), *Mathematical aspects of spin glasses and neural networks*, Progress in Probability, Vol. **41**, Birkhäuser, Boston-Basel-Berlin 1997.

K. K. SABELFELD, I. A. SHALIMOVA, *Spherical Means for PDEs*, VSP, Utrecht, Tokyo, 1997.

Aufsätze in referierten Fachzeitschriften

U. BANDELOW, M. MÖHRLE, B. SARTORIUS, H.-J. WÜNSCHE, *Dispersive self Q-switching in DFB lasers: Theory versus experiment*, IEEE Journ. Sel. Top. Quant. Electron., **3** (1997), pp. 270–278.

J. REHBERG, H.-J. WÜNSCHE, U. BANDELOW, H. WENZEL, *Spectral properties of a system describing fast pulsating DFB-lasers*, Z. Angew. Math. Mech., **77** (1997), no. 1, pp. 75–77.

B. SARTORIUS, M. MÖHRLE, S. REICHENBACHER, H.-J. WÜNSCHE, U. BANDELOW, *Dispersive self Q-switching in self-pulsating DFB lasers*, IEEE Journ. of Quant. Electron., **33** (1997), no. 2, pp. 211–218.

A. BOVIER, *Comment on 'Capacity of the Hopfield model'*, J. Phys. A, **30** (1997), pp. 7993–7996.

A. BOVIER, V. GAYRARD, *The retrieval phase of the Hopfield model: A rigorous analysis of the overlap distribution*, Probab. Theory Related Fields, **107** (1997), pp. 61–98.

——, *Statistical mechanics of neural networks: The Hopfield model and the Kac-Hopfield model*, Markov Proc. Related Fields, **3** (1997), pp. 393–423.

——, *An almost sure central limit theorem for the Hopfield model*, Markov Proc. Related Fields, **3** (1997), pp. 151–173.

A. BOVIER, V. GAYRARD, P. PICCO, *Distribution of overlap profiles in the one-dimensional Kac-Hopfield model*, Comm. Math. Phys., **186** (1997), pp. 323–379.

A. BOVIER, M. ZAHRADNÍK, *The low temperature phase of Kac-Ising models*, J. Statist. Phys., **87** (1997), pp. 311–333.

G. BRUCKNER, *On the stabilization of approximation procedures for a class of integral equations of the first kind with noisy right-hand sides*, Journal of Inverse and Ill-posed problems, **5** (1997), pp. 117–127.

J. ELSCHNER, Y. JEON, I. H. SLOAN, E. STEPHAN, *The collocation method for mixed boundary value problems on domains with curved boundaries*, Numer. Math., **76** (1997), pp. 355–381.

Y. Jeon, I. H. Sloan, E. Stephan, J. Elschner, *Discrete qualocation methods for logarithmic-kernel integral equations on a piecewise smooth boundary*, Adv. Comput. Math., **7** (1997), pp. 547–571.

J. Elschner, I. G. Graham, *Quadrature methods for Symm's integral equation on polygons*, IMA J. Numer. Anal., **17** (1997), pp. 643–664.

D. A. Dawson, K. Fleischmann, *A continuous super-Brownian motion in a super-Brownian medium*, J. Theoret. Probab., **10** (1997), pp. 213–276.

——, *Longtime behavior of a branching process controlled by branching catalysts*, Stochastic Process. Appl., **71(2)** (1997), pp. 241–257.

K. Fleischmann, C. Mueller, *A super-Brownian motion with a locally infinite catalytic mass*, Probab. Theory Related Fields, **107** (1997), pp. 325–357.

A. Glitzky, K. Gröger, R. Hünlich, *Discrete-time methods for equations modelling transport of foreign-atoms in semiconductors*, Nonlinear Anal., **28** (1997), no. 3, pp. 463–487.

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

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

F. Guyard, R. Lauterbach, *Forced symmetry breaking perturbation for periodic solutions*, Nonlinearity, **10** (1997), pp. 291–310.

G. Hebermehl, R. Schlundt, H. Zscheile, W. Heinrich, *Eigen mode solver for microwave transmission lines*, COMPEL, Vol. **16** (1997), no. 2, pp. 108–122.

R. Henrion, *Topological properties of the approximate subdifferential*, J. Math. Anal. Appl., **207** (1997), pp. 345–360.

C. Andersson, L. Munck, R. Henrion, G. Henrion, *Analysis of N-dimensional data arrays from fluorescence spectroscopy of an intermediary sugar product*, Fresenius Journal of Analytical Chemistry, **359** (1997), pp. 138–142.

R. Hinder, E. Meister, *Regarding some problems of the Kutta-Joukovskii condition in lifting surface theory*, Math. Nachr., **184** (1997), pp. 191–228.

D. Hömberg, *Irreversible phase transitions in steel*, Math. Methods Appl. Sci., **20** (1997), pp. 59–77.

R. Model, M. Orlt, M. Walzel, R. Hünlich, *Reconstruction algorithm for near-infrared imaging in turbid media by means of time-domain data*, J. Opt. Soc. Amer. A, **14** (1997), pp. 313–324.

E. Bolthausen, D. Ioffe, *Harmonic crystal on the wall: A microscopic approach*, Comm. Math. Phys., **187** (1997), pp. 523–566.

H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, *On stationary Schrödinger-Poisson equations modelling an electron gas with reduced dimension*, Math. Methods Appl. Sci., **20** (1997), pp. 1283–1312.

O. KLEIN, *A semidiscrete scheme for a Penrose-Fife system and some Stefan problems in* $\mathbb{R}^3$, Adv. Math. Sci. Appl., **7** (1997), no. 1, pp. 491–523.

V. V. ANH, Y. HUANG, P. E. KLOEDEN, *Strong convergence of stochastic Taylor expansions for two-parameter random fields*, J. Stoch. Anal. Appl., **15** (1997), pp. 137–149.

N. A. BOBYLEV, P. E. KLOEDEN, *Periodic solutions of autonomous systems under discretization*, Numer. Funct. Anal. Optim., **18** (1997), no. 7 & 8, pp. 659–665.

P. DIAMOND, P. E. KLOEDEN, A. POKROVSKII, *Absolute retracts and a general fixed point theorem for fuzzy sets*, J. Fuzzy Sets Systems, **86** (1997), pp. 377–380.

P. DIAMOND, P. E. KLOEDEN, A. RUBINOV, A. V. VLADIMIROV, *Three metrics in the space of compact convex sets*, J. Setvalued Analysis, **5** (1997), pp. 267–289.

B. G. GARAY, P. E. KLOEDEN, *Discretization near compact invariant sets*, Random Comput. Dynamics, **5** (1997), pp. 93–123.

P. E. KLOEDEN, B. SCHMALFUSS, *Cocycle attractors of variable time-step discretizations of Lorenzian systems*, J. Difference Equations Appl., **3** (1997), pp. 125–145.

——, *Nonautonomous systems, cocycle attractors and variable time-step discretization*, Numer. Algorithms, **14** (1997), pp. 141–152.

A. AL-NAYEF, P. E. KLOEDEN, A. POKROVSKII, *Expansivity of nonsmooth functional differential equations*, J. Math. Anal. Appl., **208** (1997), pp. 453–461.

——, *Condensing operators, semi-hyperbolic mappings and neutral delay equations*, J. Differential Equations, **137** (1997), pp. 320–339.

P. E. KLOEDEN, J. MUSTARD, *Construction of permutations approximating Lebesgue measure preserving dynamical systems under spatial discretization*, J. Bifurcation Chaos, **7** (1997), pp. 401–406.

N. KUZNETSOV, P. E. KLOEDEN, *The problem of information stability in computer studies of continuous systems*, Math. Comput. Simulation, **43** (1997), pp. 143–158.

P. E. KLOEDEN, J. OMBACH, *Hyperbolic homeomorphisms and bishadowing*, Ann. Polon. Math., **XLV** (1997), pp. 171–177.

P. KREJČÍ, J. SPREKELS, *On a system of nonlinear PDEs with temperature-dependent hysteresis in one-dimensional thermoplasticity*, J. Math. Anal. Appl., **209** (1997), pp. 25–46.

P. KREJČI, I. STRAŠKRABA, *A uniqueness criterion for the Riemann problem*, Hiroshima Math. J., **27** (1997), pp. 307–346.

M. BROKATE, P. KREJČÍ, *Maximum norm wellposedness of nonlinear kinematic hardening models*, Cont. Mech. Thermodyn., **9** (1997), no. 6, pp. 365–380.

CH. KÜLSKE, *Metastates in disordered mean-field models: Random field and Hopfield models*. J. Statist. Phys., **88** (1997), pp. 1257–1293.

P. CHOSSAT, R. LAUTERBACH, *Le théorème de Hartman-Grobman et la réduction à l'espace des orbites*, C. R. Acad. Sci. Paris, t. 325, Série I (1997) pp. 595–600.

R. LAUTERBACH, J. SANDERS, *Bifurcation analysis for spherically symmetric systems*, J. Dynamics Differential Equations, **9** (1997), pp. 535–560.

N. HOFMANN, P. MATHÉ, *On quasi-Monte-Carlo simulation of stochastic differential equations*, Math. Comp., **66** (1997), no. 218, pp. 573–589.

G. N. MILSTEIN, *Weak approximation of a diffusion process in a bounded domain*, Stochastics Stochastics Rep., **62** (1997), pp. 147–200.

——, *Stability index for invariant manifolds of stochastic systems*, Random Comput. Dynamics, **5** (1997), no. 4.

G. N. MILSTEIN, M. V. TRET'YAKOV, *Mean-square numerical methods for stochastic differential equations with small noises*, SIAM J. Sci. Comput., **18** (1997), no. 4, pp. 1067–1087.

——, *Numerical methods in the weak sense for stochastic differential equations with small noise*, SIAM J. Numer. Anal., **34** (1997), no. 6, pp. 2142–2167.

P. HALL, M. NUSSBAUM, S. STERN, *On the estimation of a support curve of indeterminate sharpness*, J. Multivariate Anal., **62** (1997), no. 2, pp. 204–232.

D. PETERHOF, B. SANDSTEDE, A. SCHEEL, *Exponential dichotomies for solitary waves of semilinear elliptic equations on infinite cylinders*, J. Differential Equations, **140** (1997), pp. 266–308.

B. GRUND, J. POLZEHL, *Bias corrected bootstrap bandwidth selection*, J. Nonparametr. Statist., **8** (1997), pp. 97–126.

S. PRÖSSDORF, G. CHIOCCHIA, D. TORDELLA, *The lifting line equation for a curved wing in oscillatory motion*, Z. Angew. Math. Mech., **77** (1997) 4, pp. 295–315.

S. PRÖSSDORF, B. N. KHOROMSKIJ, *Fast computations with the harmonic Poincaré–Steklov operators on nested refined meshes*, Adv. Comput. Math., **8** (1997), pp. 1–25.

S. PRÖSSDORF, S. OKADA, *On the solution of the generalized airfoil equation*, J. Integral Equations Appl., **9** (1997), pp. 71–98.

O. KURBANMURADOV, K. K. SABELFELD, D. KOLUHIN, *Stochastic Lagrangian models for two-particle motion in turbulent flows. Numerical results*, Monte Carlo Methods and Applications, **3** (1997), no. 3, pp. 199–223.

K. K. SABELFELD, A. A. KOLODKO, *Monte Carlo simulation of the coagulation processes governed by Smoluchowski equation with random coefficients*, Monte Carlo Methods and Applications, **3** (1997), no. 4, pp. 255–286.

J. C. ALEXANDER, M. N. GRILLAKIS, C. K. R. T. JONES, B. SANDSTEDE, *Stability of pulses on optical fibers with phase-sensitive amplifiers*, Z. Angew. Math. Phys., **48** (1997), pp. 175–192.

J. C. ALEXANDER, C. K. R. T. JONES, B. SANDSTEDE, *Existence and stability of N-pulses on optical fibers with phase-sensitive amplifiers*, Phys. D, **106** (1997), pp. 167–206.

H. S. BALASURIYA, C. K. R. T. JONES, B. SANDSTEDE, *Viscous perturbations of vorticity conserving flows and separatrix splitting*, Nonlinearity, **11** (1998), pp. 47–77.

M. KRUPA, B. SANDSTEDE, P. SZMOLYAN, *Fast and slow waves in the FitzHugh-Nagumo equation*, J. Differential Equations, **133** (1997), pp. 49–97.

B. SANDSTEDE, *Constructing dynamical systems having homoclinic bifurcation points of codimension two*, J. Dynamics Differential Equations, **9** (1997), pp. 269–288.

——, *Convergence estimates for the numerical approximation of homoclinic solutions*, IMA J. Numer. Anal., **17** (1997), pp. 437–462.

——, *Instability of localised buckling modes in a one-dimensional strut model*, Philos. Trans. Roy. Soc. London Ser. A, **355** (1997), pp. 2083–2097.

——, *Stability of multiple-pulse solutions*, Trans. Amer. Math. Soc., **350** (1998), pp. 429–472.

B. SANDSTEDE, A. SCHEEL, C. WULFF, *Center-manifold reduction for spiral waves*, Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série I, Mathématique, **324** (1997), pp. 153–158.

——, *Dynamics of spiral waves in unbounded domains using center-manifold reductions*, J. Differential Equations, **141** (1997), pp. 122–149.

G. HÄCKL, K. R. SCHNEIDER, *Controllability near Takens-Bogdanov points*, J. of Dyn. and Control Systems, **2** (1997), pp. 583–598.

W. HÄRDLE, S. SPERLICH, V. G. SPOKOINY, *Semiparametric single index versus fixed link function modelling*, Ann. Statist., **27** (1997), no. 1, pp. 212–243.

O. LEPSKI, E. MAMMEN, V. SPOKOINY, *Ideal spatial adaptation to inhomogeneous smoothness: An approach based on kernel estimates with variable bandwidth selection*, Ann. Statist., **25** (1997), no. 3, pp. 929–947.

O. LEPSKI, V. SPOKOINY, *Optimal pointwise adaptive methods in nonparametric estimation*, Ann. Statist., **25** (1997), no. 6, pp. 2512–2546.

A. SHIRYAEV, V. SPOKOINY, *On sequential estimation of an autoregressive parameter*, Stochastics Stochastics Rep., **60** (1997), pp. 219–240.

P. COLLI, J. SPREKELS, *Stefan problems and the Penrose-Fife phase field model*, Adv. Math. Sci. Appl., **7** (1997), pp. 911–934.

L. P. SHILNIKOV, D. V. TURAEV, *Simple bifurcations leading to hyperbolic attractors*, Comput. Math. Appl., **34** (!997), no. 2–4, pp. 173–193.

——, *Super-homoclinic orbits and multi-pulse homoclinic loops in Hamiltonian systems with discrete symmetries*, Regular and Chaotic Dynamics, **2** (1997), no. 3/4, pp. 126–137.

A. A. KOLODKO, W. WAGNER, *Convergence of a Nanbu type method for the Smoluchowski equation*, Monte Carlo Methods Appl., **3(4)** (1997), pp. 255–273.

Beiträge zu Sammelwerken

R. ANTONOVA, I. BREMER, *Projektionsverfahren zur Simulation von Copolymerisations-prozessen*, in: Mathematik, Schlüsseltechnologie für die Zukunft (K.-H. Hoffmann, W. Jäger, Th. Lohmann, H. Schunck, Hrsg.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1997, pp. 75–82.

J. BORCHARDT, F. GRUND, D. HORN, T. MICHAEL, *Parallelized numerical methods for large-scale dynamic process simulation*, in: Proceedings of the 15th IMACS World Congress 1997 on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics (A. Sydow, ed.), Wissenschaft & Technik Verlag Berlin, Vol. **I** (1997), pp. 547–552.

A. BOVIER, V. GAYRARD, *Hopfield models as generalized random mean field models*, in: „Mathematical aspects of spin glasses and neural networks“ (A. Bovier, P. Picco, eds.), Progress in Probability, Vol. **41**, Birkhäuser, Boston-Basel-Berlin, pp. 3–91.

A. BOVIER, V. GAYRARD, P. PICCO, *Typical profiles of the Kac-Hopfield model*, in: „Mathematical aspects of spin glasses and neural networks“ (A. Bovier, P. Picco, eds.), Progress in Probability, Vol. **41**, Birkhäuser, Boston-Basel-Berlin, pp. 187–243.

G. BRUCKNER, S. HANDROCK-MEYER, M. LANGMACH, *On the identification of soil transmissivity from measurements of the groundwater level*, in: Proceedings of the Third Hellenic-European Conference of Mathematics and Informatics (E. A. Lipitakis, ed.), HERMIS 1997, pp.146–153.

G. BRUCKNER, M. YAMAMOTO, *Identification of point sources by boundary observations: uniqueness, stability and reconstruction*, in: Proceedings of the Third Hellenic-European Conference of Mathematics and Informatics (E. A. Lipitakis, ed.), HERMIS (1997), pp. 154–161.

J. FUHRMANN, *Numerical solution schemes for nonlinear diffusion problems based on Newton's method*, in: Proceedings of ALGORITHMY '97, 14th Conference on Scientific Computing, (A. Handlovičová, M. Komorníková, K. Mikula, eds.), Slovak Technical University Bratislava (1997), pp. 32–42.

——, *On numerical solution methods for nonlinear parabolic problems*, in: Proceedings of the First GAMM-Seminar at ICA Stuttgart „Modelling and Computation in Environmental Sciences“ (R. Helmig, W. Jäger, W. Kinzelbach, P. Knabner, G. Wittum, eds.), Vieweg Braunschweig (1997), pp. 170–180.

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, Hrsg.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1997, pp. 281–291.

A. GLITZKY, R. HÜNLICH, *Electro-reaction-diffusion systems for heterostructures*, in: Free Boundary Problems, Theory and Applications (M. Niezgódka, P. Strzelecki, eds.), Pitman Res. Notes Math. Ser., **363**, Addison Wesley Longman, 1996, pp. 305–313.

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. Schunck, Hrsg.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1997, pp. 91–103.

G. HEBERMEHL, R. SCHLUNDT, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *Improved numerical solutions for the simulation of microwave circuits*, in: Progress in Industrial Mathematics at ECMI 96 (Morton Brøns, M. Ph. Bendsøe, M. P. Sørensen, eds.), B. G. Teubner, Stuttgart, 1997, pp. 176–183.

G. HEBERMEHL, *Eigen mode solver for monolithic integrated circuits*, in: Abstracts ENUMATH 1997, Second European Conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 1997, pp. 244–245.

R. HINDER, E. MEISTER, *Integral equations arising from instationary flows around thin wings*, in: Boundary Element Topics (W. L. Wendland, ed.), 1997, pp. 167–188.

D. HÖMBERG, *An extended model for phase transitions in steel*, in: Free Boundary Problems, Theory and Applications (M. Niezgódka, P. Strzelecki, eds.), Pitman Res. Notes Math. Ser., **363**, Addison Wesley Longman, 1996, pp. 314–318.
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, Hrsg.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1997, pp. 303–313.

S. CYGANOWSKI, P. E. KLOEDEN, *Stochastic stability examined through MAPLE*, in: Proc. 15th IMACS World Congress 1997, **1**: Computational Mathematics (A. Sydow, ed.), Wissenschaft & Technik Verlag, Berlin, 1997, pp. 437–432.

P. KREJČI, J. SPREKELS, *A thermodynamic theory of hysteresis operators in one-dimensional thermoplasticity*, in: Facetten der Thermodynamik: Festschrift zum 60. Geburtstag von Prof. Dr. I. Müller (H. Struchtrup, ed.), Institut für Verfahrenstechnik, Technische Universität Berlin, 1997, pp. 189–200.

CH. KÜLSKE, *Limiting behaviour of random Gibbs measures: Metastates in some disordered meanfield models*, in: „Mathematical aspects of spin glasses and neural networks“, (A. Bovier, P. Picco, eds.), Progress in Probability, Vol. **41**, Birkhäuser, Boston-Basel-Berlin, pp. 151–161.

T. BARSCH, A. KUNOTH, K. URBAN, *Towards object oriented software tools for numerical multiscale methods for P.D.E.s using wavelets*, in: Multiscale Wavelet Methods for Partial Differential Equations (W. Dahmen, A. Kurdila, P. Oswald, eds.), Academic Press, 1997, pp. 383–412.

H.-J MUCHA, *Adaptive credit scoring - A distance approach*, in: SoftStat'97, Advances in Statistical Software 4, (W. Bandilla, F. Faulbaum, eds.), Gustav Fischer Verlag, Stuttgart, 1997, pp. 107–114.

CH. BÖCKMANN, J. BIELE, R. NEUBER, J. NIEBSCH, *Retrieval of multimodal aerosol size distribution by inversion of multiwavelength data*, in: Proceedings of European Symposium on Eurovironmental Securing III, SPIE, The International Society of Optical Engineering, Vol. 3104, 1997, pp. 27–38.

S. PRÖSSDORF, *Boundary element methods using splines and multiwavelets*, in: Proceedings of the Annual Meeting of the Japan Mathematical Society, Applied Mathematics, Matsumoto, 1997, pp. 94–103.

S. PRÖSSDORF, W. DAHMEN, B. KLEEMANN, R. SCHNEIDER, *Multiscale methods for the solution of the Helmholtz and Laplace equations*, Boundary Element Topics (W. L. Wendland, ed.), Springer, 1997, pp. 189–219.

S. PRÖSSDORF, W. MCLEAN, *Boundary element collocation methods with reduced inter-element smoothness*, IABEM Symposium on Boundary Integral Methods for Nonlinear Problems (L. Morino, W. L. Wendland, eds.), Kluwer Academic Publishers, 1997, pp. 155–160.

V. F. BUTUZOV, N. N. NEFEDOV, K. R. SCHNEIDER, *Singularly perturbed boundary value problems for systems of ODE's of Tichonov's type*, „Mathematical methods and applications", Proceedings of the V-th mathematical conference of Moscow State Social University, 1997, pp. 23–27.

V. F. BUTUZOV, N. N. NEFEDOV, K. R. SCHNEIDER, *Singularly perturbed boundary value problems modelling fast bimolecular reactions*, in: Proceedings of the IFAC Workshop „Singular Solutions and Perturbations in Control Systems", Pereslavl-Zalessky, Russia, July 7-11, IFAC Publications, Elsevier Science Ltd, Oxford, UK, 1997, pp. 55–58.

V. SPOKOINY, *Testing a linear hypothesis using Haar transform*, in: Proc. of XXIX Journée de Stat., Carcassonne, Frankreich, 1997, pp. 91–95.

6.2 Preprints, Reports

6.2.1 WIAS-Preprint-Serie

Preprints 1997[1]

[307] Andreas Rathsfeld: On the stability of piecewise linear wavelet collocation and the solution of the double layer equation over polygonal curves.

[308] Georg Hebermehl, Rainer Schlundt, Horst Zscheile, Wolfgang Heinrich: Eigen mode solver for microwave transmission lines.

[309] Georg Hebermehl, Rainer Schlundt, Horst Zscheile, Wolfgang Heinrich: Improved numerical solutions for the simulation of microwave circuits.

[310] Krzysztof Wilmański: The thermodynamical model of compressible porous materials with the balance equation of porosity.

[311] Hans Günter Bothe: Strange attractors with topologically simple basins.

[312] Krzysztof Wilmański: On the acoustic waves in two–component linear poroelastic materials.

[313] Peter Mathé: Relaxation of product Markov chains of product spaces.

[314] Vladimir Spokoiny: Testing a linear hypothesis using Haar transform.

[315] Dietmar Hömberg, Jan Sokołowski: Optimal control of laser hardening.

[316] Georg Hebermehl, Rainer Schlundt, Horst Zscheile, Wolfgang Heinrich: Numerical solutions for the simulation of monolithic microwave integrated circuits.

[317] Donald A. Dawson, Klaus Fleischmann, Guillaume Leduc: Continuous dependence of a class of superprocesses on branching parameters, and applications.

[318] Peter Mathé: Asymptotically optimal weighted numerical integration.

[319] Guillaume Leduc: Martingale problem for (ξ,Φ,k)–superprocesses.

[320] Sergej Rjasanow, Thomas Schreiber, Wolfgang Wagner: Reduction of the number of particles in the stochastic weighted particle method for the Boltzmann equation.

[321] Wolfgang Dahmen, Angela Kunoth, Karsten Urban: Wavelets in numerical analysis and their quantitative properties.

[322] Michael V. Tretyakov: Numerical studies of stochastic resonance.

[323] Johannes Elschner, Gunther Schmidt: Analysis and numerics for the optimal design of binary diffractive gratings.

[1] http://www.wias-berlin.de/WIAS_publ_preprints_1997

[324] Ion Grama, Michael Nussbaum: A nonstandard Hungarian construction for partial sums.

[325] Siegfried Prössdorf, Jörg Schult: Multiwavelet approximation methods for pseudodifferential equations on curves. Stability and convergence analysis.

[326] Peter E. Kloeden, Alexander M. Krasnosel'skii: Twice degenerate equations in the spaces of vector-valued functions.

[327] Nikolai A. Bobylev, Peter E. Kloeden: Periodic solutions of autonomous systems under discretization.

[328] Martin Brokate, Pavel Krejčí: Maximum Norm Wellposedness of Nonlinear Kinematic Hardening Models.

[329] Ibrahim Saad Abdel-Fattah: Stability Analysis of Quadrature Methods for Two-Dimensional Singular Integral Equations.

[330] Wolfgang Dreyer, Wolf Weiss: Geschichten der Thermodynamik und obskure Anwendungen des zweiten Hauptsatzes.

[331] Klaus Fleischmann, Achim Klenke: Smooth density field of catalytic super-Brownian motion.

[332] Vladimir G. Spokoiny: Image denoising: Pointwise adaptive approach.

[333] Jens A. Griepentrog: An application of the Implicit Function Theorem to an energy model of the semiconductor theory.

[334] Todd Kapitula, Björn Sandstede: Stability of bright solitary-wave solutions to perturbed nonlinear Schrödinger equations.

[335] Jürgen Sprekels, Dan Tiba: A duality approach in the optimization of beams and plates.

[336] R. Dobrushin, Ostap Hryniv: Fluctuations of the Phase Boundary in the $2D$ Ising Ferromagnet.

[337] Anton Bovier, Véronique Gayrard, Pierre Picco: Typical profiles of the Kac-Hopfield model.

[338] Annegret Glitzky, Rolf Hünlich: Global estimates and asymptotics for electro-reaction-diffusion systems in heterostructures.

[339] Hans-Christoph Kaiser, Joachim Rehberg: About a stationary Schrödinger-Poisson system with Kohn-Sham potential in nanoelectronics.

[340] Dan Tiba: Maximal monotonicity and convex programming.

[341] Anton Bovier, Véronique Gayrard: Metastates in the Hopfield model in the replica symmetric regime.

[342] Ilja Schmelzer: Generalization of Lorentz-Poincaré ether theory to quantum gravity.

[343] Gottfried Bruckner, Sybille Handrock-Meyer, Hartmut Langmach: An inverse problem from the 2D-groundwater modelling.

[344] Pavel Krejčí, Jürgen Sprekels: Temperature-Dependent Hysteresis in One-Dimensional Thermovisco-Elastoplasticity.

[345] Uwe Bandelow, Lutz Recke, Björn Sandstede: Frequency Regions for Forced Locking of Self-Pulsating Multi-Section DFB Lasers.

[346] Peter E. Kloeden, Jerzy Ombach, Alexei V. Pokrovskii: Continuous and inverse shadowing.

[347] Grigori N. Milstein: On the mean-square approximation of a diffusion process in a bounded domain.

[348] Anton Bovier: The Kac Version of the Sherrington-Kirkpatrick Model at High Temperatures.

[349] Sergej Rjasanow, Wolfgang Wagner: On time counting procedures in the DSMC method for rarefied gases.

[350] Klaus Fleischmann, Vladimir A. Vatutin: Long-term behavior of a critical multitype spatially homogeneous branching particle process and a related reaction-diffusion system.

[351] Pierluigi Colli, Jürgen Sprekels: Global solution to the Penrose-Fife phase-field model with zero interfacial energy and Fourier law.

[352] Grigori N. Milstein, Michael V. Tretyakov: Space-time random walk for stochastic differential equations in a bounded domain.

[353] Anton Bovier, Véronique Gayrard: Statistical mechanics of neural networks: The Hopfield model and the Kac-Hopfield model.

[354] Johannes Elschner, Olaf Hansen: A collocation method for the solution of the first boundary value problem of elasticity in a polygonal domain in $\mathbb{R}^2$.

[355] Dmitry Ioffe, Roberto H. Schonmann: Dobrushin-Kotecký-Shlosman theorem up to the critical temperature.

[356] Daniela Peterhof, Björn Sandstede: All-optical clock recovery using multi-section distributed-feedback lasers.

[357] Viorel Arnautu, Hartmut Langmach, Jürgen Sprekels, Dan Tiba: On the approximation and the optimization of plates.

[358] Leonid Fridman: Fast periodic oscillations in singularly perturbed relay control systems and sliding modes.

[359] Grigori N. Milstein: Stability index for orbits with nonvanishing diffusion.

[360] Bettina Albers: Randbedingungen für den zweikomponentigen porösen Körper auf dem Rand des Skeletts.

[361] Anastasya A. Kolodko, Wolfgang Wagner: Convergence of a Nanbu type method for the Smoluchowski equation.

[362] Lutz Recke, Klaus R. Schneider, Vadim V. Strygin: Spectral properties of coupled wave equations.

[363] Nikolai N. Nefedov, Klaus R. Schneider: Immediate exchange of stabilities in singular perturbed systems.

[364] Pavel Krejčí, Jürgen Sprekels: A hysteresis approach to phase-field models.

[365] Jürgen Sprekels, Songmu Zheng: Maximal attractor for the system of a Landau-Ginzburg theory for structural phase transitions in shape memory alloys.

[366] Krzysztof Wilmański: On the time of existence of weak discontinuity waves in poroelastic materials.

[367] Wolfgang Dreyer, Matthias Kunik: The Maximum Entropy Principle Revisited.

[368] Hans-Christoph Kaiser, Joachim Rehberg: About a one-dimensional stationary Schrödinger-Poisson system with Kohn-Sham potential.

[369] Andreas Rathsfeld: Edge asymptotics for the radiosity equation over polyhedral boundaries.

[370] Georgi Golubev, Rafail Khasminskii: Statistical approach to inverse boundary problems for partial differential equations.

[371] Georgi Golubev, Wolfgang Härdle: On adaptive estimation in partial linear models.

[372] Siegfried Prössdorf, Jörg Schult: Approximation and commutator properties of projections onto shift-invariant subspaces and applications to boundary integral equations.

[373] Ilja Schmelzer: Realism and empirical evidence.

[374] Sergei V. Pereverzev, Siegfried Prössdorf: A discretization of Volterra integral equations of the third kind with weakly singular kernels.

[375] Jürgen Fuhrmann, Dietmar Hömberg: Numerical simulation of the surface hardening of steel.

[376] Johannes Elschner, Gunther Schmidt: A rigorous numerical method for the optimal design of binary gratings.

[377] Robert Liptser, Vladimir Spokoiny: Moderate deviations for integral functionals of diffusion process.

[378] Georg Hebermehl, Rainer Schlundt, Wolfgang Heinrich, Horst Zscheile: Improved numerical methods for the simulation of microwave circuits.

[379] Valentin F. Butuzov, Nikolai N. Nefedov, Klaus R. Schneider: Singularly perturbed boundary value problems in case of exchange of stabilities.

[380] Grigori N. Milstein: The probability approach to numerical solution of nonlinear parabolic equations.

[381] Robert Liptser, Vladimir Spokoiny: On estimating a dynamic function of stochastic system with averaging.

[382] Jürgen Borchardt, Friedrich Grund, Dietmar Horn: Parallelized numerical methods for large systems of differential-algebraic equations in industrial applications.

[383] Wolfgang Dreyer, Matthias Kunik: Reflections of Eulerian shock waves at moving adiabatic boundaries.

[384] Alfred Liemant: A Drift–Diffusion Equation for Charge Transport in Inhomogeneous Materials.

6.2.2 WIAS-Report-Serie

Reports 1997[2]

[12] Yuri I. Ingster, Irina A. Suslina: Minimax nonparametric hypothesis testing for ellipsoids and Besov bodies.

[13] Rolf Hünlich, Annegret Glitzky, Wilfried Röpke: Reaktions-Diffusionsgleichungen in Heterostrukturen mit Anwendungen in der Halbleitertechnologie.

[14] Rainer J. Rumpel: Über periodische Lösungen von singulär gestörten Differentialgleichungen mit Gleitzuständen.

6.2.3 Preprints/Reports an anderen Einrichtungen

[1] E. Doedel, A. R. Champneys, T. F. Fairgrieve, Y. A. Kuznetsov, B. Sandstede, X. Wang, *Continuation and bifurcation software for ordinary differential equations (with HomCont)*, Preprint, Concordia University, Montreal, Kanada, 1997.

[2] M. Hanke, E. I. Macana, R. März, *On asymptotics in case of index 2 differential-algebraic equations*, Preprint 97-3, Humboldt-Universität zu Berlin, 1997.

[3] W. Härdle, S. Sperlich, V. Spokoiny, *Semiparametric single index versus fixed link function modelling*, Discussion paper, SFB 373 No. 52, Humboldt–Universität zu Berlin, 1997.

[4] H.-J. Mucha, *Clusteranalyse, Klassifikation und Grafik mit adaptiven Distanzen in Anwendungsbeispielen*, in Schriftenreihe des Fachbereichs Mathematik, Arbeitskreis Mathematik in Forschung und Praxis, 13. Symposium, Bad Honnef 1997, H.-G. B. W. Griem, ed., Gerhard–Mercator–Universität Gesamthochschule Duisburg, 1997, pp. 21–33.

[2] http://www.wias-berlin.de/WIAS_publ_reports#rep97

[5] N. N. NEFEDOV, K. R. SCHNEIDER, *Immediate exchange of stabilities in singularly perturbed systems*, DFG Schwerpunktreihe „Ergodentheorie, Analysis und Simulation dynamischer Systeme“ 40/97, Freie Universität Berlin, 1997.

[6] D. PETERHOF, B. SANDSTEDE, *All-optical clock recovery using multi-section distributed-feedback lasers*, DFG Schwerpunktreihe „Ergodentheorie, Analysis und Simulation dynamischer Systeme“ 36/97, Freie Universität Berlin, 1997.

[7] B. SANDSTEDE, A. SCHEEL, C. WULFF, *Bifurcations and dynamics of spiral waves*, DFG Schwerpunktreihe „Ergodentheorie, Analysis und Simulation dynamischer Systeme“ 48/97, Freie Universität Berlin, 1997.

6.3 Mitherausgabe von Zeitschriften

A. BOVIER, Editorial Board, *Journal of Statistical Physics*, Plenum Press, New York-London.

——, Editorial Board, *Markov Processes and Related Fields*, Polymat, Moskau.

H. GAJEWSKI, Advisory Board, *Mathematische Nachrichten*, 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.

P. E. KLOEDEN, Editorial Board, *Journal of Nonlinear Analysis: Theory, Methods and Applications*, Verlag Pergamon, Oxford, Großbritannien.

P. KREJČI, Editorial Board, *Applications of Mathematics*, Akademie der Wissenschaften, Prag, Tschechische Republik.

M. NUSSBAUM, Editorial Board, *Annals of Statistics*, Institute of Mathematical Statistics, Hayward, USA.

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

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

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

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

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

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

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

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

K. K. SABELFELD, Editor, *Monte Carlo Methods and Applications*, VSP, Utrecht, Niederlande.

——, Editorial Board, *Mathematics and Computers in Simulation*, Verlag Elsevier/North Holland, Niederlande.

J. SPREKELS, Editorial Board, *Advances in Mathematical Sciences and Applications*, Gakkotōsho, Tokio, Japan.

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

6.4 Vorträge und Gastaufenthalte von Mitarbeitern

B. ALBERS, *Randbedingungen für den zweikomponentigen Körper auf dem Rand des Skeletts*, Thermodynamisches Seminar, WIAS, Berlin, 2. Juli.

G. ALBINUS, *Kinetische Begründung makroskopischer Modelle (Hydrodynamik, Energiemodell) – Ein Überblick*, Teil I, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 9. April.

——, *Kinetische Begründung makroskopischer Modelle (Hydrodynamik, Energiemodell) - Ein Überblick*, Teil II, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 23. April.

——, *Konvexe Analysis und Simulation von Halbleiterbauelementen*, Arbeitsgemeinschaft „Simulation von Mikrostrukturen und elektronischen Bauelementen“ des Bayerischen Forschungsverbundes FORTWIHR, Technische Universität München, 18. November.

——, *Bemerkungen zu Dreyers Entropie-Maximum-Prinzip*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 10. Dezember.

U. BANDELOW, *Dynamics in multisection DFB lasers: Modeling versus experiments and application*, 21th Workshop „Compound Semiconductor Devices and Integrated Circuits“, Scheveningen, Niederlande, 26. Mai.

——, *Modeling of DFB-Lasers: Dynamics and forced synchronisation*, Semiconductor Laser Workshop, Pitlochry, Schottland, 21. September.

——, *2D multiband $k-p$ modeling of nanostructures*, 10^{th} III-V Semiconductor Device Simulation Workshop, Turin, Italien, 17. Oktober.

——, *Modenentwicklung und Dynamik*, „Forschungsseminar zum Halbleiterlaser“, Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Mathematik, 4. Dezember.

——, *Mode degeneracy and self-sustained pulsations*, „Forschungsseminar zum Halbleiterlaser“, Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Mathematik, 11. Dezember.

J. BORCHARDT, *Parallelisierung numerischer Verfahren für die chemische Prozeßsimulation*, Duisburger Kongreß „Mathematik in Industrie und Wirtschaft“, Duisburg, 11. März.

——, *Parallelized numerical methods for large-scale dynamic process simulation*, IMACS World Congress, Berlin, 29. August.

A. BOVIER, *Metastates and convergence of Gibbs measures of disordered systems*, Mathematische Fakultät, Prag, Tschechische Republik, 17. April.

——, *Statistische Mechanik ungeordneter Mean-Field-Modelle*, Mathematisches Kolloquium, Potsdam, 29. April.

——, *Metastates and convergence of Gibbs measures of disordered systems*, Università di Roma „Tor Vertga“, Rom, Italien, 15. Mai.

——, *Statistische Mechanik ungeordneter Mean-Field-Modelle*, Technische Universität München, 20. Mai.

——, *Rigorous results on the Hopfield model on complete graphs and on the lattice*, Workshop „Networks and random structures on trees", Sandbjerg, Dänemark, 22. Juni.

——, *The Kac version of the SK model at high temperatures*, CPT, Marseille, Frankreich, 22. Juli.

——, *Remarks on the Kac version of the SK model*, Workshop „Stochastic modelling of large random systems", Cambridge, Großbritannien, 12. September.

——, *Fluctuation of the free energy of the Kac version of the SK model at high temperatures*, Workshop „Probability Theory and Applications", Bielefeld, 9. Oktober.

——, *Statistical mechanics of disordered systems I*, 26th Lunteren Meeting, Lunteren, Niederlande, 17. November.

——, *Statistical mechanics of disordered systems II*, 26th Lunteren Meeting, Lunteren, Niederlande, 18. November.

——, *Probabilistic tools in the analysis of disordered systems: Part I: Large derivations in growing dimensions*, „AIO network Satellite meeting", Lunteren, Niederlande, 19. November.

——, *Probabilistic tools in the analysis of disordered systems: Part II: Martingales and concentration of measure*, „AIO network Satellite meeting", Lunteren, Niederlande, 20. November.

G. BRUCKNER, *On the regularization of an inverse vibration problem*, GAMM-Jahrestagung, Regensburg, 23. März.

——, *On the determination of soil permeability*, 2nd Saxon Symposium, Inverse Problems, Oybin, 26. September.

N. BUBNER, *Problèmes de contrôle optimal pour des matériaux à mémoire de forme*, Université de Nancy I, Institut Élie Cartan, Nancy, Frankreich, 14. Januar.

——, *Simulations numériques des transitions des phases dans des alliages à mémoire de forme*, Université Paris-Sud et CNRS, Orsay, Frankreich, 23. Januar.

——, *Mathematical modelling of martensitic phase transitions in shape memory alloys*, WIAS-Workshop „Phase Transitions: Microscopic and Mesoscopic Theory", Berlin, 6. Juni.

——, *Optimal control of martensitic phase transitions in shape memory alloys*, Fourth International Symposium „Methods and Models in Automation and Robotics", Międzyzdroje, Polen, 27. August.

——, *Modeling and control of martensitic phase transitions in shape memory alloys*, Symposium „Adaptive Structures and Material Systems", at the 1997 International Mechanical Engineering Congress, American Society of Mechanical Engineers, Dallas, Texas, USA, 18. November.

——, *Modeling and control of martensitic phase transitions in shape memory alloys*, Department of Mathematics, Virginia Tech, Blacksburg, Virginia, USA, 1. Dezember.

——, *Modeling and control of martensitic phase transitions in shape memory alloys*, Mathematical Physics Institute, California State University, Northridge, California, USA, 5. Dezember.

W. DREYER, *Geschichten der Thermodynamik und obskure Anwendungen des zweiten Hauptsatzes*, Festkolloquium an der Technischen Universität zu Ehren des 60. Geburtstages von Prof. Dr. Ingo Müller, Berlin, 25. Januar.

——, *Interpretation von Röntgenintensitätsverteilungen in einkristallinen Superlegierungen*, DFG-Unterkolloquium Einkristalle, Jülich, 8. April.

——, *Erweiterte Thermodynamik, Entropie und Hyperbolizität*, Seminar der Forschungsgruppe Kontinuumsmechanik, WIAS, Berlin, 18. April.

——, *Facetten der Unendlichkeit von Raum und Zeit*, Hochschule für Bildende Kunst, Frankfurt/Main, 21. Mai.

——, *Zur Thermodynamik des schwarzen Loches*, Thermodynamisches Seminar, Technische Universität Berlin, 4. Juni.

——, *Micro, meso and macro mechanics*, WIAS-Workshop „Phase Transitions: Microscopic and Mesoscopic Theory“, Berlin, 6. Juni.

——, *Geschichten der Thermodynamik und obskure Anwendungen des zweiten Hauptsatzes*, Kolloquium des FB Physik, Universität Gesamthochschule Paderborn, 12. Juni.

——, *The maximum entropy principle revisited*, IXth International Conference „Waves and Stability in Continuous Media“ (INCOWASCOM 97), Bari, Italien, 7. Oktober.

——, *Mikromechanische Betrachtungen zur Bruchmechanik*, WIAS-Workshop „Bruchmechanik“, Berlin, 7. November.

——, *The imbroglio of mean values in micro mechanics*, X. Workshop „Composite Forschung in der Mechanik“, Liborianum Paderborn, 9. Dezember.

W. DREYER, M. KUNIK, *Micromechanics without* KUBO *Formula*, Workshop „Nanoscale Simulation of Fracture, Interfaces and Deformation“, Universität Stuttgart, 3. Juli.

——, *Das Maximum-Entropie-Prinzip neu betrachtet: Globale Lösungen der Euler-Gleichungen für Anfangsdaten mit beliebig großer Schwankung*, WIAS, Berlin, 3. November.

——, *Reflexion von Stoßwellen an bewegten Wänden*, Thermodynamisches Seminar, WIAS, Berlin, 12. November.

F. DUDERSTADT, *Mikro-Makro-Untersuchungen an Polykristallen*, Workshop „Große plastische Formänderung“, Bad Honnef, 16. September.

——, *Numerische Simulation großer elastisch-viscoplastischer Deformationen von Polykristallen*, Kolloquium der FG Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen, WIAS, Berlin, 16. Oktober.

J. ELSCHNER, *A rigorous numerical method for the optimal design of binary gratings*, EOS Topical Meeting on Diffractive Optics, Savonlinna, Finnland, 6. Juli.

——, *Mellin techniques and Galerkin approximation for the double layer potential equation over polyhedral domains*, Workshop „Functional Analysis and Partial Differential Equations“, Han–sur–Lesse, Belgien, 9. Juni.

——, *Die erste Randwertaufgabe der Elastizitätstheorie in Gebieten mit Ecken*, WIAS-Workshop „Bruchmechanik“, Berlin, 6. November.

K. FLEISCHMANN, *A continuous super-Brownian motion in a super-Brownian medium*, Workshop „Stochastic Partial Differential Equations“, RIMS, Vancouver, Canada, 13. August.

——, *A continuous super-Brownian motion with a super-Brownian catalyst“*, Workshop „Stochastic Partial Differential Equations“, MSRI, Berkeley, USA, 16. September.

J. FÖRSTE, *Theoretische Untersuchungen zum Stabilitätsverhalten von Verdichtungssystemen*, 15. Arbeitskreissitzung des Teilverbundprojekts TURBOTECH, Köln, 23. Oktober.

J. FUHRMANN, *Numerische Verfahren und Softwarekomponenten für die Lösung nichtlinearer Transportprobleme in porösen Medien*, Berliner Kolloquium „Modellierung und experimentelle Untersuchungen zu Strömungs- und Stofftransport in Hydro- und Geosphäre“, IWAWI, Technische Universität Berlin, 20. Juni.

——, *A comparison of modular algebraic multigrid methods*, IMACS Symposium on Iterative Methods in Scientific Computation, Jackson Hole, Wyoming, USA, 9. Juli.

——, *Numerical solution schemes for nonlinear diffusion problems based on Newton's method*, ALGORITHMY '97, West Tatra Mountains, Slowakische Republik, 5. September.

——, *gltools: An openGL based visualization tool box for numerical and statistical applications*, Workshop „VISMATH'97“, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, 19. September.

——, *Wie entsteht eine Computersimulation?*, Technische Fachhochschule Wedding, 19. Dezember.

H. GAJEWSKI, *Analysis und Numerik von Halbleiter-Heterostrukturen*, Technische Hochschule Ilmenau, 6. Mai.

——, *Zur Analysis und Numerik von Drift-Diffusionsgleichungen*, Kolloquium des Interdisziplinären Zentrums für Nichtlineare Dynamik und des Instituts für Mathematik, Universität Potsdam, 23. Mai.

——, *Modellierung und Simulation des Ladungsträgertransports in Halbleitern*, Materialwissenschaftliche Tagung der Wissenschaftsgemeinschaft Blaue Liste, Berlin, 14. Oktober.

——, *Modellierung und Simulation von Halbleiterbauelementen*, BMBF-Abschlußkolloquium „Anwendungsorientierte Verbundvorhaben auf dem Gebiet der Mathematik“, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 30. Oktober.

——, *Über Lyapunov-Funktionen beim qualitativen und numerischen Studium nichtlinearer Drift-Diffusionsgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, Fachbereich Physik, 11. November.

A. GLITZKY, *Elektro-Reaktionsdiffusionssysteme in Heterostrukturen mit Clusterreaktionen*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 2. Juli.

J. A. GRIEPENTROG, *Zur Hölder-Stetigkeit schwacher Lösungen eines nichtglatten parabolischen RAWP vom Divergenztyp*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 8. Januar.

F. GRUND, *Numerische Methoden in der Prozeßsimulation*, GAMM-Jahrestagung, Regensburg, 25. März.

——, *Sparse-Matrix-Techniken für Vektor- und Parallelrechner*, DMV-Tagung „Wissenschaftliches Rechnen in der Elektrotechnik“, Technische Hochschule Darmstadt, 19. Juni.

——, *Sparse-Matrix-Techniques for vector and parallel computer*, SIAM’s 45th Anniversary Meeting, Stanford University, Palo Alto, USA, 15. Juli.

F. GUYARD, *Generalized heteroclinic cycles in systems with O(3) symmetry*, Workshop „Large Time Behavior in Dynamical Systems: Analysis and Numerics“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 31. Juli.

——, *Generalized heteroclinic cycles in systems with O(3) symmetry*, Workshop „Symmetries in Hamiltonian systems“, Guildford, Großbritannien, 5. September.

M. HANKE, *Asymptotische Stabilität bei Algebro-Differentialgleichungssystemen*, Oberseminar „Nichtlineare Dynamik“, Freie Universität Berlin, 4. November.

G. HEBERMEHL, *Höchstfrequenzschaltungen - erst rechnen, dann produzieren*, Berliner Tag der Mathematik, Technische Universität Berlin, 24. Mai.

——, *Simulation von Höchstfrequenzschaltungen, Teil I*, Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik, Feldtheoretisches Seminar, Berlin, 6. Juni.

——, *Verbesserte numerische Verfahren in der feldtheoretischen Simulation von monolithisch integrierten Höchstfrequenzschaltungen*, DMV-Tagung „Wissenschaftliches Rechnen in der Elektrotechnik“, Technische Hochschule Darmstadt, 19. Juni.

——, *Computation of eigen modes for lossy microwave transmission lines*, 14. Österreichischer Mathematikerkongreß, Salzburg, 26. September.

——, *Eigen mode solver for monolithic microwave integrated circuits*, ENUMATH’97, Heidelberg, 2. Oktober.

R. HENRION, *The approximate subdifferential and Lipschitzian stability of constraint mappings*, International Conference on Optimization and Control, Lambrecht, 25. Februar.

——, *Zur Stabilität speziell strukturierbarer Wahrscheinlichkeitsrestriktionen*, Forschungsseminar „Numerik stochastischer Modelle“, Humboldt–Universität zu Berlin, 14. Mai.

——, *Optimierung integrierter Kolonnensysteme unter stochastischen Echtzeitbedingungen*, DFG–Antragskolloquium zum Schwerpunkt „Echtzeitoptimierung“, Berlin, 23. Mai.

——, *Analysis of N-dimensional data arrays: Theory, algorithms, applications*, Conferentia Chemometrica 97, Budapest, Ungarn, 21. August.

——, *Nonsmooth constraint mappings with cone–increasing behavior*, 16th International Symposium on Mathematical Programming, Lausanne, Schweiz, 26. August.

——, *Quantitave stability of convex chance constrained programs,* Workshop „Optimization under Uncertainty“, Berlin, 3. September.

——, *Analysis of multidimensional data arrays from environmental and food chemistry*, 2nd Berlin Colloquy on Statistical and Mathematical Modelling, Berlin, 7. Oktober.

——, *Lipschitz–Stabilität von Lösungsmengen in der parametrischen Optimierung nach Bonnans/Shapiro*, Humboldt–Universität zu Berlin, 22. Oktober.

R. HINDER, *Zur Asymptotik der Zirkulation um einen dreidimensionalen dünnen Tragflügel*, WIAS-Workshop „Bruchmechanik“, Berlin, 6. November.

D. HÖMBERG, *Modellierung und Simulation der Oberflächenhärtung von Stahl*, Duisburger Kongreß „Mathematik in Industrie und Wirtschaft“, 13. März.

——, *Modeling and simulation of surface heat treatments of steel*, GAMM-Jahrestagung, Regensburg, 25. März.

——, *Phase transitions and the heat treatment of steel*, Tschechische Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, Prag, Tschechische Republik, 26. September.

W. HÖPPNER *Die Eulerschen Gleichungen – Anwendungen auf eindimensionale Verdichtermodelle I*, Technische Universität Berlin, Institut für Luft- und Raumfahrt, 22. April.

——, *Die Eulerschen Gleichungen – Anwendungen auf eindimensionale Verdichtermodelle II*, Technische Universität Berlin, Institut für Luft- und Raumfahrt, 6. Juni.

——, *Modellierung und Simulation von Verdichtern*, Universität Potsdam, Fachbereich Physik, 24. November.

R. HÜNLICH, *Elektro-Reaktionsdiffusionssysteme in Heterostrukturen mit nichtlokaler nichtlinearer Poissongleichung*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 18. Juni.

D. IOFFE, *2D Ising model: Dobrushin-Koteckỳ-Schlosman theory up to T_c*, Workshop „Inhomogeneous random systems, non-Gibbsian states and Wulff shapes“, École Polytechnique Paris, Frankreich, 28. Januar.

——, *An introduction to the DKS theory*, Université Paris-VII, Frankreich, 12., 19., 26. März, 2. April.

——, *Equilibrium crystal shapes and related limit theorems*, WIAS-Workshop “Phase Transitions: Microscopic and Mesoscopic Theory“, Berlin, 3. Juni.

——, *Large deviations and droplet concentration in non-Gaussian effective interface models*, EPFL, Lausanne, Schweiz, 27. August.

——, *Phase separation and related limit theorems*, Workshop „Stochastic modelling of large random systems“, Cambridge, Großbritannien, 8. September.

——, *Ornstein-Zernike behaviour and analyticity of shapes for self-avoiding walks*, Technion Haifa, Israel, 4. November.

H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, *Matching the phenomenological and quantum mechanical description of semiconductor devices*, WIAS-Workshop „Phase Transitions: Microscopic and Mesoscopic Theory“, Berlin, 2. Juni.

H.-CHR. KAISER, *Über die Kopplung des van Roosbroeck- und des Kohn-Sham-Systems*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 17. Dezember.

O. KLEIN, *A phase-field system with space dependent relaxation coefficient*, FBP-Tagung „Theory and Applications“, Heraklion, Kreta, Griechenland, 10. Juni.

P. E. KLOEDEN, *Stochastic dynamical systems under discretization,* Internationale Konferenz „Random Dynamical Systems“ zu Ehren des 60. Geburtstages von L. Arnold, Universität Bremen, 25. April.

——, *Semi–hyperbolicity and bi–shadowing,* Technische Universität Dresden, 16. Juni.

——, *Numerical methods for stochastic differential equations,* Computational Finance Workshop, Technische Universität Delft, Niederlande, 25. Juni.

——, *Stochastic differential equations and MAPLE,* IMACS 15th World Congress, Berlin, 26. August.

U. KRAUSE, *Idealkristalle als Abelsche Varietäten*, Integrated Systems Engineering AG Technopark, Zürich, Schweiz, 7. Januar.

P. KREJČÍ, *Strong solutions to equations of 1-D visco-thermo-plasticity*, IUTAM-Symposium „Variations of domains and free-boundary problems“, Paris, Frankreich, 23. April.

——, *Hysteresis modelling in thermoplasticity*, WIAS-Workshop „Phase Transitions: Microscopic and Mesoscopic Theory“, Berlin, 3. Juni.

——, *Hysteresis in thermoplasticity*, FBP-Tagung „Theory and Applications“, Heraklion, Kreta, Griechenland, 10. Juni.

——, *PDEs with hysteresis in thermoplasticity*, EQUADIFF 9, Brno, Tschechische Republik, 28. August.

——, *Modèles d'hystérésis en plasticité à température non constante*, Université de Nancy I, Laboratoire des Mathématiques, Institut Élie Cartan, Nancy, Frankreich, 15. Oktober.

——, *Modèles d'hystérésis en plasticité à température non constante*, INRIA, Paris / Rocquencourt, Frankreich, 6. November.

——, *Materialgedächtnis und Ermüdung in Plastizität*, Westböhmische Universität, Pilsen, Tschechische Republik, 18. Dezember.

T. KÜHN, *Approximation von anisotropen Krümmungsflüssen*, Thermodynamisches Seminar, WIAS, Berlin, 28. Mai.

CH. KÜLSKE, *A random energy model for size dependence of disordered systems*, Workshop „Stochastic modelling of large random systems“, Cambridge, Großbritannien, 12. September.

M. KUNIK, *Skalare Erhaltungsgleichung mit Stößen*, Thermodynamisches Seminar, WIAS, Berlin, 7. Mai.

——, *The skalar conservation law in one and two space dimensions*, IXth International Conference „Waves and Stability in Continuous Media“ (INCOWASCOM 97), Bari, Italien, 6. Oktober.

A. KUNOTH, *On the treatment of bounded domains and boundary conditions in multiscale methods for elliptic PDE's*, Foundations of Computational Mathematics, Minisymposium „Approximation and Partial Differential Equations“, Rio de Janeiro, Brasilien, 7. Januar.

——, *On the treatment of bounded domains and boundary conditions in multiscale methods for elliptic PDE's*, 13th GAMM-Seminar Kiel „Numerical Treatment of Multi-Scale Problems“, Kiel, 25. Januar.

——, *Biorthogonale Wavelets und Multi-Wavelets auf dem Intervall*, 8. Mecklenburgische Frühjahrsschule „Wavelet- und Approximationsmethoden“, Graal–Müritz, 19. März.

——, *Wavelet-Galerkin-Verfahren für elliptische partielle Differentialgleichungen: Behandlung der Randbedingungen*, Kolloquium „Angewandte Mathematik“, ETH Zürich, Schweiz, 16. April.

——, *Wavelets in der Numerischen Analysis*, Mathematisches Kolloquium, Fachbereich Mathematik, Universität Bremen, 6. Mai.

H. LANGMACH, *Identifikation von Bodendurchlässigkeiten aus Messungen für Grundwasserstände*, Berliner Kolloquium „Modellierung und experimentelle Untersuchungen zu Strömungs- und Stofftransport in Hydro- und Geosphäre“, IWAWI, Technische Universität Berlin, 27. Juni.

R. LAUTERBACH, *Heteroclinic sets, stability and applications*, Tagung „Bifurcation and Symmetry“ , University of Southampton, Großbritannien, 9. Januar.

——, *Heteroclinic sets and pole reversals*, Oberseminar „Nichtlineare Dynamik“, WIAS, Berlin, 11. Februar.

——, *Generalized heteroclinic cycles*, Tagung über Gewöhnliche Differentialgleichungen, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 20. März.

——, *Generalized heteroclinic cycles in spherically invariant systems and their perturbations*, Tagung über Langzeitverhalten, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 31. Juli

——, *Dynamics and geometry of group orbits*, Tagung „Topological Variational and Singularity Methods in Nonlinear Analysis“, Gdansk , Polen, 16. September.

——, *Intermittierende Dynamik, Stabilität und Geometrie*, Technische Universität München, 4. November.

——, *Intermittierende Dynamik, Stabilität und Geometrie*, Universität Hamburg, 18. November.

——, *Intermittierende Dynamik und Stabilität*, Universität Bayreuth, 19. Dezember.

A. MADER, *On Monte Carlo methods and the simulation of the Boltzmann equation,* DMV–Seminar „Scaling Limits and Models in Physical Processes“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 17. Oktober.

P. MATHÉ, *Relaxation of Metropolis Sampler for separable energy functions,* Foundations of Computational Mathematics, Rio de Janeiro, Brasilien, 9. Januar.

G. N. MILSTEIN, *Orbital stability index for nonlinear stochastic systems,* The 8th International Colloquium on Differential Equations, Plovdiv, Bulgarien, 20. August.

H.-J. MUCHA, *Clusteranalyse, Klassifikation und Grafik mit adaptiven Distanzen in Anwendungsbeispielen,* 13. Symposium des Arbeitskreises Mathematik in Forschung und Praxis, Bad Honnef, 21. Januar.

——, *Adaptive credit scoring - A distance approach,* SoftStat'97 - The 9th Conference on the Scientific Use of Statistical Software, Heidelberg, 5. März.

——, *Adaptives distanzbasiertes Kredit Scoring,* 21th Annual Conference of the GfKl, Potsdam, 13. März.

M. NUSSBAUM, *Asymptotic equivalence of counting process experiments and Gaussian white noise,* Workshop „The Art of Nonparametric Statistics: Methodologies and Applications“, Louvain-la-Neuve, Belgien, 20. Februar.

——, *Asymptotic equivalence of a nonparametric spectral density model to Gaussian white noise,* Workshop „Statistical Inference for Stochastic Processes“, Rennes, Frankreich, 24. April.

——, *Gaussian white noise approximation for some nonparametric models of counting processes,* IMS Annual Meeting, Park City, USA, 29. Juli.

——, *Asymptoptic equivalence of statistical experiments,* Michigan State University, East Lansing, USA, 6. August.

——, *Asymptoptic equivalence of nonparametric experiments given by stochastic processes,* ISI Satellite Meeting „Mathematical Statistics and its Applications to Biosciences“, Rostock, 3. September.

D. PETERHOF, *Exponential dichotomies for solitary waves of semilinear elliptic equations on infinite cylinders*, DFG-Kolloquium im Schwerpunkt „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“, Schwäbisches Bildungszentrum Bad Irsee, 8. Juli.

J. POLZEHL, *Localized projection pursuit discriminant analysis,* Joint Statistical Meetings, Anaheim, USA, 12. August.

——, *Model selection, confidence, prediction and calibration intervals in heteroscedastic nonlinear regression,* Iowa State University, Ames, USA, 18. August.

——, *Model selection and accuracy assessment in heteroscedastic nonlinear regression,* Rostock, ISI Satellite Meeting, „Statistics and its Applications in Biosciences“, 3. September.

S. PRÖSSDORF, *Boundary element methods using splines and multiwavelets*, Annual Meeting of the Japan Mathematical Society, Session Applied Mathematics, Matsumoto, Japan, 3. April.

——, *Some applications of singular integral equations to boundary value problems*, Kyoto University, Department of Mathematics, Japan, 9. April.

——, *Wavelets in boundary element methods*, Kyoto University, Department of Mathematics, Japan, 10. April.

——, *Wavelet approximation methods for solving pseudodifferential equations*, Osaka University, Department of Mathematics, Japan, 11. April.

——, *Wavelets for the fast solution of pseudodifferential equations and boundary value problems*, University of Tokyo, Graduate School of Mathematical Sciences, Japan, 18. April.

——, *Introduction to pseudodifferential equations and their applications to boundary value problems*, University of Tokyo, Graduate School of Mathematical Sciences, Japan, 23. April.

——, *Splines, wavelets and multiwavelets in boundary element methods*, Waseda University, Advanced Research Institute for Science and Engineering, Japan, 25. April.

——, *Multiwavelets in boundary element collocation methods*, ISAAC Congress ’97, Delaware, USA, 4. Juni.

——, *Fehlerschranken in Diskretisierungsmethoden für gewisse inverse Probleme mit gestörten Daten*, Technische Universität Chemnitz, 17. Juni.

——, *Wavelet methods for the solution of pseudodifferential and integral equations*, Institute of Systems Science, Academia Sinica, Peking, China, 5. August.

——, *Boundary element collocation methods using defected splines and multiwavelets*, Institute of Systems Science, Academia Sinica, Peking, China, 7. August.

——, *Stability and convergence analysis of boundary element methods with multiwavelets*, Guangzhou International Symposium on Computational Mathematics, Zhongshan University, Guangzhou, China, 13. August.

——, *Convergence analysis of multiwavelet approximation methods for pseudodifferential equations*, International Workshop on Approximation Theory and Numerical Analysis, Vico Equense, Italien, 10. September.

——, *On the analytical solution of the generalized airfoil equation*, Graduate School for Italian Mathematicians, Vico Equense, Italien, 12. September.

——, *Boundary element methods using multiwavelets*, Linköping University, Linköping, Schweden, 9. Oktober.

——, *The stability of a collocation method for the generalized airfoil equation with flap*, Politecnico di Torino, Italien, 5. November.

——, *On the solution of a contact problem*, Politecnico di Torino, Italien, 12. November.

——, *On the fundamental solutions for the Helmholtz and reaction–diffusion equations*, Politecnico di Torino, Italien, 19. November.

——, *Approximation methods for integral equations using splines and wavelets*, International Conference „Tricomi's ideas and contemporary applied mathematics“, Rom, Italien, 28. November.

——, *Randelementmethoden mit Multiwavelets*, Chemnitzer Mathematisches Kolloquium, Technische Universität Chemnitz, 11. Dezember.

A. RATHSFELD, *Über die Stabilität der stückweise linearen Waveletkollokation und die Lösung der Doppelschichtpotentialgleichung über polygonalen Kurven*, Frühjahrsschule Approximationstheorie, Graal–Müritz, 20. März.

——, *Über die Stabilität der stückweise linearen Waveletkollokation und die Lösung der Doppelschichtpotentialgleichung über polygonalen Kurven*, Seminar für angewandte Mathematik, ETH Zürich, Schweiz, 3. Juli.

——, *A wavelet collocation algorithm for the solution of a two–dimensional singular integral equation*, ISAAC Congress '97, Delaware, USA, 4. Juni.

——, *On the stability of piecewise linear wavelet collocation and the solution of the double layer potential equation over polygonal curves*, Conference on BIM: Theory and Application '97, Salford, Manchester, Großbritannien, 17. September.

——, *Waveletalgorithmen für Randelementmethoden*, Mathematisches Kolloquium des Fachbereichs Mathematik, Universität Mainz, 27. November.

J. REHBERG, *Das Zusammentreffen von klassischer und quantenmechanischer Beschreibung von Halbleitern am Interface*, Teil I, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 30. April.

——, *Das Zusammentreffen von klassischer und quantenmechanischer Beschreibung von Halbleitern am Interface*, Teil II, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 14. Mai.

B. SANDSTEDE, *Dynamik von Pulspaketen und eine Anwendung in der nichtlinearen Optik*, Kolloquium, Freie Universität Berlin, 23. Januar.

——, *Pulses in optical fibers with phase-sensitive amplifiers*, Ohio State University, Columbus, USA, 12. Februar.

——, *Finite-dimensional reduction of the dynamics of pulse packets*, Tagung „Topological and geometrical methods in ODE's“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 17. März.

——, *Interaktion von Pulsen in dissipativen nichtlinearen Differentialgleichungen*, Universität Freiburg, 17. April.

——, *Interaktion von Pulsen in dissipativen nichtlinearen Differentialgleichungen*, Universität Hannover, 6. Mai.

——, *Advection induced by the breaking of vorticity conservation via viscous dissipation*, Minisymposium „Dynamical system methods for oceanic and atmospheric flows“, Fourth SIAM conference „Applications of dynamical systems“, Snowbird, USA, 19. Mai.

——, *An accurate description of slow-motion dynamics in singularly perturbed reaction-diffusion systems*, Fourth SIAM conference „Applications of dynamical systems“, Snowbird, USA, 21. Mai.

——, *Weak interaction of pulses*, Workshop „Pulse and beam propagation in nonlinear optical systems“, Little Compton, USA, 27. Mai.

——, *Analytical and numerical methods for pulse-like dynamics*, Workshop „Hybrid methods for bifurcation and dynamics in partial differential equations“, Marburg, 10. Juni.

——, *Pulse interaction in optical fibers with phase-sensitive amplification*, Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig, 1. Juli.

——, *Pulses and their dynamics*, DFG-Kolloquium im Schwerpunkt „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“, Schwäbisches Bildungszentrum Bad Irsee, 7. Juli.

——, *Analysis and numerical computation of pulse packets*, Tagung „Large time behavior in dynamical systems: Analysis and numerics“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 29. Juli.

R. SCHLUNDT, *Simulation von Höchstfrequenzschaltungen, Teil II*, Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik, Feldtheoretisches Seminar, Berlin, 6. Juni.

I. SCHMELZER, *Geometriebeschreibung und Gittergenerierung mit IBG*, Technische Universität Hamburg-Harburg, 11. September.

G. SCHMIDT, *Approximate wavelets and the approximation of pseudodifferential operators*, ISAAC Congress '97, Delaware, USA, 4. Juni.

——, *Zur Berechnung von Gittereffektivitäten*, Institut für Lichttechnik und Technische Optik, Technische Universität Ilmenau, 25. September.

O. SCHMIDTMANN, *Nichtlineare Galerkin-Verfahren für die 3D magnetohydrodynamischen Gleichungen*, Forschungsseminar Angewandte Analysis, Humboldt-Universität zu Berlin, 28. Mai.

K. R. SCHNEIDER, *Exchange of stabilities in singularly perturbed systems*, Universität St. Petersburg, Rußland, 17. Januar.

——, *Feedback stabilization of nonlinear discrete-time systems*, Universität St. Petersburg, Rußland, 21. Januar.

——, *Eine neue Klasse von Relaxationsschwingungen*, Workshop des GAMM-Fachausschusses „Dynamik und Regelungstheorie“, WIAS, Berlin, 14. Februar.

——, *A new class of relaxation oscillations*, Technische Universität Budapest, Ungarn, 20. Februar.

——, *Delayed exchange of stability*, Minisymposium „Nonlinear Operator Equations and Applications“, GAMM-Jahrestagung, Regensburg, 25. März.

——, *Stabilisierung diskreter Kontrollsysteme*, Gedenkkolloquium für Herrn Dr. Müller, WIAS, 1. April

——, *Degenerate singularly perturbed systems: From fast reactions to forced canards*, WIAS-Workshop „Singularly Perturbed Systems and Applications“, Berlin, 11. September.

——, *Stabilization of discrete control systems*, Workshop „Stabilization and Robustness of Nonlinear Systems“, Universität Bremen, 17. September.

——, *Mathematische Methoden der Modellreduktion*, Graduiertenkolleg „Dynamik und Evolution zellulärer und makromolekularer Prozesse“, Berlin, 17. Oktober.

——, *Stabilisierung singulär gestörter Systeme*, Staatliche Universität Moskau, Rußland, 25. November.

J. SCHULT, *Galerkin–Petrov–Verfahren mit Multiwavelets*, Frühjahrsschule Approximationstheorie, Graal–Müritz, 20. März.

——, *Multiwavelet approximation methods for pseudodifferential equations on closed curves*, 15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics, Berlin, 25. August.

V. SPOKOINY, *Estimation of a function with jumps,* Universität Paris 6, Frankreich, 8. Januar.

——, *Estimation of a function with jumps and image denoising via pointwise-adaptive window choice,* Tagung „ Mathematische Stochastik“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 10. März.

——, *Testing a linear hypothesis using Haar transform,* XXIX Journées de Statistique, Carcassonne, Frankreich, 26. Mai.

——, *Nichtparametrische statistische Methoden und ihre Anwendungen,* Universität München, 22. Juli.

——, *On a qualitative data-analysis,* Seminar Berlin–Paris, Schmerwitz, 25. September.

J. SPREKELS, *Mathematik als Quelle technologischer Entwicklung*, Urania, Berlin, 27. Januar.

——, *Hysteresis operators in one-dimensional magnetoelasticity*, Università di Torino, Dipartimento di Matematica, Turin, Italien, 18. Februar.

——, *Hysteresis operators in one-dimensional magnetoelasticity*, Tagung „Variational Problems with Free Interfaces“, Pisa, Italien, 21. Februar.

——, *Hysteresis in thermoplasticity*, IUTAM-Symposium „Variations of domains and free-boundary problems“, Paris, Frankreich, 23. April.

——, *Hysteresis in thermoplasticity*, Third European Conference on Elliptic and Parabolic Problems, Pont-à-Mousson, Frankreich, 18. Juni.

——, *Recent results on hysteresis in thermoplasticity*, Fudan University, Shanghai, China, 2. September.

——, *Hysteresis operators in one-dimensional magnetoelasticity*, Fudan University, Shanghai, China, 11. September.

——, *On the application of hysteresis operators in magnetoelasticity*, Academia Sinica, Beijing, China, 15. September.

——, *Mathematik: Fundamentale Ressource der Technologieentwicklung*, Institut für Festkörper- und Werkstofforschung, Dresden, 4. Dezember.

H. STEPHAN, *Die Beschreibung von Diffusionsprozessen mit Gleichungen im Phasenraum*, „Thermodynamisches Seminar“, Technische Universität Berlin, WIAS, Berlin, 21. Mai.

M. UHLE, *Berechnung 3-dimensionaler Wirbelstromfelder im Zeitbereich*, SKF Schweinfurt, 6. August.

——, *Zur induktiven Wärmebehandlung: 3D-Modellierung der Wirbelstromgebiete*, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, 28. November.

——, *Zur induktiven Wärmebehandlung von Stahl: Modellierung transienter Wirbelströme*, Technische Universität München, 16. Dezember.

W. WAGNER, *Stochastic particle methods for nonlinear equations*, GAMM-Jahrestagung, Regensburg, 27. März.

——, *Stochastic particle schemes for kinetic equations*, ENUMATH 97, Heidelberg, 2. Oktober.

K. WILMAŃSKI, *Schallwellenausbreitung in porösen Körpern - neue Möglichkeiten für die Ultraschalltomographie*, Symposium „Medizin und Mathematik“, Bad Honnef, 23. Januar.

——, *On the paper of Ingo Müller and myself which has not been written*, Festkolloquium an der Technischen Universität zu Ehren des 60. Geburtstages von Prof. Dr. Ingo Müller, Berlin, 25. Januar.

——, *Schallwellen in mehrkomponentigen Körpern*, „Thermodynamisches Seminar“, Technische Universität Berlin, WIAS, Berlin, 14. Mai.

——, *Stress-induced martensitic transformation - extension of the set of microstructural variables and the macroscopic hysteresis*, WIAS-Workshop „Phase Transitions: Microscopic and Mesoscopic Theory“, Berlin, 4. Juni.

——, *Waves in diffusive and reactive multicomponent media*, Fourth Meeting „Current Ideas in Mechanics“, Kraków, Polen, 27. August.

——, *Hyperbolische Feldgleichungen für poröse Medien*, SFB-Workshop „PDG und ihre Anwendungen in der Theorie granularar und metallischer Strukturen“, Wahlen/Odenwald, 11. September.

——, *Sound waves in poroelastic materials with relaxing porosity*, IXth International Conference „Waves and Stability in Continuous Media“ (INCOWASCOM 97), Bari, Italien, 7. Oktober.

——, *Kritische Zeit und Entstehung von Stoßwellen in porösen Körpern*, „Thermodynamisches Seminar“, Technische Universität Berlin, WIAS, Berlin, 5. November.

K. ZACHARIAS, *Wo liegt die goldene Mitte?*, Berliner Tag der Mathematik, Technische Universität Berlin, 24. Mai.

Poster

G. ALBINUS, A. GLITZKY, J. A. GRIEPENTROG, R. HÜNLICH, W. RÖPKE, *Modellierung und Simulation von hochsperrenden Bauelementen für Schaltkreise der Leistungselektronik*, BMBF-Mathematikprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 29.–31. Oktober.

U. BANDELOW, H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, *Modellierung und Simulation verspannter Quantenschichten in Halbleiterlasern*, BMBF-Mathematikprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 29.–31. Oktober.

I. BREMER, *Projektionsmethoden zur Simulation von Copolymerprozessen*, BMBF-Abschlußkolloqium „Anwendungsorientierte Verbundvorhaben auf dem Gebiet der Mathematik“, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 29.–31. Oktober.

N. BUBNER, *Modelling and control of martensitic phase transitions in shape memory alloys*, FBP-Tagung „Theory and Applications“, Heraklion, Kreta, Griechenland, 8.–14. Juni.

N. BUBNER, O. KLEIN, J. SPREKELS, K. WILMAŃSKI, P. PHILIP, *Optimale Steuerung der Sublimationszüchtung von SiC-Kristallen*, BMBF-Mathematikprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft", Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 29.–31. Oktober.

J. FUHRMANN, H. LANGMACH, M. PETZOLDT, I. SCHMELZER, *Adaptive Lösungsstrategien für unterirdische Strömungs- und Transportprozesse*, BMBF-Mathematikprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft", Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 29. – 31. Oktober.

H. GAJEWSKI, H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, H. STEPHAN, *Modellierung und Simulation von Quantum-Well-Halbleiterlasern unter Einbindung des Schrödinger-Poisson-Systems*, BMBF-Abschlußkolloquium „Anwendungsorientierte Verbundvorhaben auf dem Gebiet der Mathematik", Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 29.–31. Oktober.

H. GAJEWSKI, R. NÜRNBERG, J. FUHRMANN, H. LANGMACH, I. SCHMELZER, *3D-Simulation von Halbleiterdetektoren*, BMBF-Mathematikprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft", Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 29.–31. Oktober.

H. GAJEWSKI, R. NÜRNBERG, L. RECKE. H. STEPHAN, *Analystische und numerische Untersuchungen zur Strukturbildung in Halbleitern*, Eröffnungsverteidigung des SFB-1644 Komplexe Nichtlineare Prozesse, Humboldt-Universität zu Berlin, 10.–11. Dezember.

A. GLITZKY, R. HÜNLICH, W. RÖPKE, *Reaktions-Diffusionsgleichungen in Heterostrukturen mit Anwendungen in der Halbleitertechnologie*, BMBF-Abschlußkolloquium „Anwendungsorientierte Verbundvorhaben auf dem Gebiet der Mathematik", Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 29.–31. Oktober.

F. GRUND, J. BORCHARDT, D. HORN, T. MICHAEL, H. SANDMANN, *Strukturierte DAE-Systeme in der chemischen Verfahrenstechnik*, BMBF-Abschlußkolloquium „Anwendungsorientierte Verbundvorhaben auf dem Gebiet der Mathematik", Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 29. – 31. Oktober.

F. GRUND, J. BORCHARDT, K. EHRHARDT, D. HORN, *Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen*, BMBF-Mathematikprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft", Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 29. – 31. Oktober.

D. HÖMBERG, W. DREYER, F. DUDERSTADT, *Modellierung, Analyse und Simulation des Widerstands-Impulsschweißens*, BMBF-Mathematikprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft", Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 29.–31. Oktober.

6.4.1 Arbeitsaufenthalte von Mitarbeitern

A. BOVIER, Karls-Universität, Prag, Tschechische Republik, 16. – 25. April.

——, Universita di Roma II, Italien, 4. – 27. Mai.

——, CPT, Marseille, Frankreich, 15. Juli – 2. August.

I. BREMER, BASF AG, Ludwigshafen, 20. – 23. Mai.

N. BUBNER, Université de Nancy I, Laboratoire des Mathématiques, Institut Élie Cartan, Nancy, Frankreich, 6. – 17. Januar.

——, Université Paris-Sud et CNRS, Orsay, Frankreich, 20. – 24. Januar und 12. – 25. Oktober.

——, Virginia Tech, Department of Mathematics, Blacksburg, Virginia, USA, 22. November – 2. Dezember.

——, California State University, Mathematical Physics Institute, Northridge, California, USA, 3. – 5. Dezember.

K. FLEISCHMANN, RIMS, Vancouver, Canada, 9. – 29. August.

——, MSRI, Berkeley, USA, 6. – 21. September.

D. IOFFE, Universität Paris VII, Frankreich, 9. März – 5. April.

——, EPFL Lausanne, Schweiz, 25. – 31. August.

——, Technion Haifa, Israel, 11. November 1997 – 11. Februar 1998.

O. KLEIN, Università di Pavia, Dipartimento di Matematica, Pavia, Italien, 24. November – 6. Dezember.

P. KLOEDEN, Universität Bremen, Mathematisches Institut, 27. April – 2. Mai.

——, Technische Universität Delft, Mathematisches Institut, Niederlande, 24. – 29. Juni.

P. KREJČI, Université de Nancy I, Laboratoire des Mathématiques, Institut Élie Cartan, Nancy; INRIA, Paris/Rocquencourt, Frankreich, 14. Oktober – 15. November.

T. KÜHN, University of Brighton, Department of Mathematics, 27. Januar – 2. Februar.

A. KUNOTH, Technische Hochschule Aachen, 8. – 19. Mai.

R. LAUTERBACH, Universität Southampton, Großbritannien, 9. – 14. Januar.

——, Institute Non Linéaire de Nice, Nizza, Frankreich, 2. – 13. Juni.

A. MADER, Technische Hochschule Ilmenau, Fachbereich Mathematik, 18. – 22. August.

M. NUSSBAUM, Stanford University und Michigan State University, East Lansing, Departments of Statistics, USA, 2. – 9. August.

J. POLZEHL, University of Minnesota, Department of Applied Statistics, St. Paul, USA, 21. Juli – 7. August.

——, Iowa State University, Statistical Laboratory, Ames, USA, 17. – 21. August.

S. PRÖSSDORF, University of Tokyo, Japan, 31. März – 23. April.

——, Institute of Systems Science, Academia Sinica, Beijing, China, 4. – 10. August.

——, Technische Universität Turin, Italien, 29. Oktober – 27. November.

——, Department of Mathematics, Linköping University, Linköping, Schweden, 3. – 16. Oktober,

A. RATHSFELD, ETH Zürich, Schweiz, 29. Juni – 5. Juli.

——, University of Iowa, Iowa City, USA, 23. – 30. Mai.

K. SABELFELD, Universität Karlsruhe, Fakultät für Mathematik, 13. – 17. Oktober.

B. SANDSTEDE, Brown University, Division of Applied Mathematics, Providence, USA, 11. – 29. Mai.

G. SCHMIDT, Department of Mathematics, Linköping University, Linköping, Schweden, 17. – 29. November.

K. R. SCHNEIDER, Universität St. Petersburg, Mathematisch-Mechanische Fakultät, Rußland, 15. – 20. Januar.

——, Technische Universität Budapest, Mathematische Fakultät, Ungarn, 18. – 22. Februar.

——, Staatliche Universität Moskau, Fakultät für Physik, Rußland, 18. – 26. November.

J. SCHULT, Department of Mathematics, Linköping University, Linköping, Schweden, 17. – 29. November.

V. SPOKOINY, Universität Paris VI, Laboratoire de Statistique, Frankreich, 7. – 15. Januar.

J. SPREKELS, Fudan University, Department of Mathematics, Shanghai; Academia Sinica, Department of Mathematics, Beijing, China, 1. – 20. September.

W. WAGNER, Università di Roma I, „La Sapienza“, Italien, 20. – 26. Mai.

——, Universität Saarbrücken, 17. – 22. Juni.

6.5 Vorlesungen und Seminare

A. BOVIER, Vorlesung *Ausgewählte Kapitel der mathematischen Statistischen Mechanik*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1996/97.

——, Vorlesung *Statistische Mechanik Neuronaler Netze*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1997/98.

W. DREYER, Vorlesung *Relativistische Thermodynamik*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1997.

——, Vorlesung *Industrierelevante mathematische Probleme*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1997/98.

W. DREYER, K. WILMAŃSKI, Vorlesung *Kontinuumsthermodynamik*, WIAS, 2 SWS, Wintersemester 1997/98.

H. GAJEWSKI, Vorlesung *Nichtlineare partielle Differentialgleichungen*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1996/97.

M. HANKE, Vorlesung *Einführung in die Numerik partieller Differentialgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1997/98.

R. LAUTERBACH, Vorlesung *Partielle Differentialgleichungen*, Freie Universität Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1996/97.

——, Vorlesung *Spezielle Kapitel aus der Theorie dynamischer Systeme*, Freie Universität Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1997/98.

P. MATHÉ, Vorlesung *Stochastische numerische Verfahren*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1996/97.

M. NUSSBAUM, Seminar *Mathematische Statistik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1996/97.

——, Seminar *Kurvenschätzung und Resampling*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1996/97.

M. NUSSBAUM, V. SPOKOINY, Vorlesung *Grundprinzipien der Asymptotischen Statistik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1997 und Wintersemester 1997/98.

——, Seminar *Mathematische Statistik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1997 und Wintersemester 1997/98.

——, Seminar *Kurvenschätzung und Resampling*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1997 und Wintersemester 1997/98.

J. POLZEHL, Vorlesung *Multivariate Analyse*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Sommersemester 1997.

R. RUMPEL, Vorlesung und Übung *Informatik für Ingenieure I*, Fachhochschule für Technik und Wirtschaft Berlin, 6 SWS, Wintersemester 1996/97.

K. R. SCHNEIDER, Seminar *Mathematische Modellierung* (gemeinsam mit H. Schurz), Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1996/97.

——, Seminar *Halbleiterlaser* (gemeinsam mit L. Recke und H.-J. Wünsche, Humboldt-Universität zu Berlin), Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1997/98.

——, Seminar *Nichtlineare Dynamik* (gemeinsam mit Prof. B. Fiedler, Freie Universität Berlin und Dr. K. Gatermann, Freie Universität Berlin/Konrad-Zuse-Zentrum Berlin), Wintersemester 1996/97 am Weierstraß-Institut, Sommersemester 1997 am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Wintersemester 1997/98 an der Freien Universität Berlin, einmal wöchentlich mit 1-2 Gastvorträgen.

J. SPREKELS, Vorlesung *Analysis I*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1996/97.

——, Vorlesung *Analysis II*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Sommersemester 1997.

——, Vorlesung *Analysis III*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1997/98.

W. WAGNER, Vorlesung *Grundlagen der Monte-Carlo-Methode*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1996/97.

——, Vorlesung *Anwendungen der Monte-Carlo-Methode*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Sommersemester 1997.

K. WILMAŃSKI, Vorlesung *Kontinuumsmechanik*, WIAS, 2 SWS, Sommersemester 1997.

6.6 Dissertationen, Habilitationen und Rufe

Dissertationen

O. KLEIN, Dissertationsschrift: *Existence and approximation results for phase-field systems of Penrose-Fife type and Stefan problems*, Humboldt-Universität zu Berlin, Betreuer: Prof. Dr. J. Sprekels, 18. August 1997.

D. PETERHOF, Dissertationsschrift: *Hydrodynamische Probleme im dünnen Kugelspalt*, Freie Universität Berlin, Betreuer: Dr. R. Lauterbach, Prof. B. Fiedler, 22. Januar 1997.

R. RUMPEL, Dissertationsschrift: *Über periodische Lösungen von singulär gestörten Differentialgleichungen mit Gleitzuständen*, Humboldt-Universität zu Berlin, Betreuer: Dr. K. R. Schneider, 3. Juli 1997.

Rufe

M. HANKE, Universitätslektor, Royal Institute of Technology, Stockholm, Schweden, zum 1. Januar 1998.

D. IOFFE, Anne Corin Academic Lectureship „Probability Theory“, Technion, Haifa, Israel, November 1997 – Januar 1998.

——, Senior Lecturer, Faculty of Industrial Engineering, Technion, Haifa, Israel, zum 1. Oktober 1998.

P. E. KLOEDEN, C4-Professur an der Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt/Main, 1. September.

B. SANDSTEDE, Tenure-Track Assistant-Professor for Applied Mathematics, Ohio State University, Columbus, Ohio, USA, 1. September.

V. SPOKOINY, C3-Gastprofessur an der Humboldt-Universität zu Berlin, 1. April.

6.7 Eigene Tagungen und Veranstaltungen des WIAS

WORKSHOP „PHASE TRANSITIONS: MICROSCOPIC AND MESOSCOPIC THEORY“
Berlin, 2. – 7. Juni
Organisation: WIAS (FGn 1/5)
Sponsoring: WIAS

Die mathematische Modellierung von Phasenübergängen aus der Sicht der mikroskopischen Modellierung in der Statistischen Mechanik und der mesoskopischen Ginzburg-Landau-Theorie war Thema dieses Workshops. Besonderes Anliegen war die Verbesserung der Kommunikation zwischen Analytikern, Wahrscheinlichkeitstheoretikern und mathematischen Physikern, die die Problematik der Phasenübergänge mit unterschiedlichen Techniken und auf völlig verschiedenen Modellierungsebenen bearbeiten. Insgesamt wurden vor 47 Teilnehmern, darunter führenden Vertretern ihres Fachs, 26 vierzigminütige Vorträge gehalten.

WORKSHOP „NUMERICAL METHODS FOR KINETIC EQUATIONS“
Berlin, 1. – 5. September
Organisation: WIAS (FGn 5/6) , Technische Universität Ilmenau
Sponsoring: DFG, WIAS

An dieser Veranstaltung nahmen 39 Wissenschaftler aus 7 europäischen Ländern, aus den USA, Japan und Australien teil. Damit wurde ein breites Spektrum der Numerik kinetischer Gleichungen – sowohl in der Theorie, als auch in der Umsetzung auf Rechnern und in Anwendungen – abgedeckt. Insbesondere waren mit G. A. Bird (Australien, Monte Carlo Simulation von Gasflüssen), C. Cercignani (Italien, Theorie und Anwendungen der Boltzmann-Gleichung) und M. Pulvirenti (Italien, Stochastische Teilchensysteme für kinetische Gastheorie und Strömungsdynamik) die weltweit führenden Experten ihres Gebiets vertreten. Das Gebiet der numerischen nicht-stochastischen Methoden für kinetische Modellgleichungen wurde durch K. Aoki (Japan) sehr kompetent dargestellt. Ziele und gegenwärtige Grenzen der Numerik im Bereich von Hochtechnologie-Anwendungen wurden überzeugend von I. Boyd (USA) vorgetragen.
Insgesamt wurden 20 Haupt- (je 40 Minuten) sowie 10 Kurzvorträge (je 20 Minuten) gehalten. Da diese auf fünf Tage verteilt waren, blieb genügend Zeit für Diskussionen und weitergehenden Gedankenaustausch. Anspruch des Workshops war es, sowohl Theoretiker als auch anwendungsorientierte Forscher und Anwender zusammenzuführen, hierdurch die verschiedenen Denkansätze einander nahezubringen und so zu einem Austausch von Ideen beizutragen. Dies ist nach Auffassung der Veranstalter gut gelungen. Indizien hierfür sind die rege Teilnahme an den Diskussionen ebenso wie die Reaktionen der Teilnehmer beim Abschluß der Veranstaltung. Besonders erfreulich ist in diesem Zusammenhang, daß auch eine Reihe von jungen Wissenschaftlern dem Workshop beiwohnten, welche sich gerade erst in das Gebiet der kinetischen Gleichungen einarbeiten.

WORKSHOP „SINGULARLY PERTURBED SYSTEMS AND APPLICATIONS“
Berlin, 10. – 14. September
Organisation: WIAS (FG 2)
Sponsoring: DFG, WIAS

An der Tagung nahmen 51 Teilnehmer aus 14 Ländern teil. Im Mittelpunkt standen Fragen der qualitativen Analyse von Differentialgleichungen mit unterschiedlichen Zeit- und Raumskalen sowie deren Anwendung auf Prozesse der Optoelektronik, Biochemie, Molekulardynamik, Erregungsphysiologie, Populationsdynamik und Mechanik. Es nahmen Vertreter der traditionellen Schulen für singulär gestörte Systeme aus Frankreich, Rußland und der Ukraine teil, gleichzeitig wurde ein großes Arsenal moderner Untersuchungsmethoden vorgestellt. Einen speziellen Schwerpunkt bildeten die Vorträge zu Fragen der Kontrolltheorie unter Verwendung singulär gestörter Systeme. Der Workshop bot eine ausgezeichnete Möglichkeit, daß Vertreter verschiedener Forschungsrichtungen ihre neuesten Resultate vorstellten und eine intensive wissenschaftliche Diskussion führten. Es wurde der Wunsch geäußert, die Zusammenarbeit im Rahmen eines europäischen Netzwerkes fortzuführen.

SOMMERSCHULE „STATISTICAL LEARNING AND DEPENDENCE“
Schmerwitz bei Berlin, 21. – 26. September
Organisation: SFB 373, Humboldt-Universität zu Berlin, WIAS (FG 6),
Sponsoring: Volkswagenstiftung

Gegenstand der Sommerschule war zum einen das Konzept der *Statistical learning theory*. Die prinzipielle Idee der *Statistical learning theory* ist die Konstruktion von *Learning machines* basierend auf der Minimierung von empirischen Risikofunktionen (d. h. Minimierung von Risikofunktionen, die mittels empirischer Daten geschätzt werden). Implementierungen umfassen *Neural networks* und *Support vector machines*. Anwendungen findet dieser Ansatz etwa in statistischen Regressionsproblemen und Problemen der *Pattern recognition*. Diese Methodik findet zunehmend Verbreitung in angewandten Wissenschaften und der Wirtschaft; Zielstellung der Sommerschule war eine mathematisch fundierte Einführung in die *Statistical learning theory*. In einem zweiten Teil wurde auf neuere mathematische Konzepte zur Untersuchung von Abhängigkeitsstrukturen von Daten eingegangen. Die Zusammenführung dieser beiden Themenkomplexe war vor allem durch Anwendungen in der Ökonometrie motiviert. Für die Sommerschule konnten zwei Referenten gewonnen werden: Prof. V. N. Vapnik, AT & T Bell Laboratories, und Dr. E. Rio, Université Paris-Sud, Centre d'Orsay. Beide Referenten hielten 4 anderthalbstündige Vorträge. Die Sommerschule wandte sich an Doktoranden und PostDocs vor allem aus den Bereichen Mathematik (insbes. Mathematische Statistik) und Volkswirtschaftslehre (insbes. Ökonometrie und Statistik); Nachwuchswissenschaftler aus diesem Kreis erhielten auch umfassend Gelegenheit, eigene Ergebnisse vorzustellen. Die Sommerschule verzeichnete 52 Teilnehmer, die zu einem großen Teil aus Deutschland und Frankreich kamen.

WORKSHOP „BRUCHMECHANIK“
Berlin, 6. – 7. November
Organisation: WIAS (FGn 4/7)
Sponsoring: WIAS

Die Veranstaltung hatte das Ziel, neuere Ergebnisse und Entwicklungsrichtungen auf dem Gebiet der Bruchmechanik zu diskutieren. Es bestand sowohl in der Forschungsgruppe 7 als auch in der Forschungsgruppe 4 Bedarf an einer solchen Veranstaltung. Insbesondere plant die FG 7 in naher Zukunft Untersuchungen auf dem Gebiet der Rißausbreitung in elektronischen Verbindungselementen. Es wurden 11 Vorträge gehalten. Führende Wissenschaftler aus der Bruchmechanik haben experimentelle und theoretische Ergebnisse für Metalle und Keramiken vorgestellt. Die behandelten Themen entsprangen folgenden Problemstellungen:

- Duktilbruch versus Sprödbruch,

- Mathematische Modelle zur Beurteilung von Schädigung und Alterung,
- Stochastische Modelle der Rißausbreitung,
- Thermomechanik von Kompositen,
- Moderne Plastizitätstheorie mit Verzerrungsgradienten,
- Repräsentative Volumen Element (RVE) Rechnungen,
- Makroskopische Relevanz von Mittelwertbildungen in der Mikromechanik,
- Elastizitätstheorie in Gebieten mit Ecken.

Ausführlich wurde auch über neue Testmethoden, nach DIN, für das Rißwachstum gesprochen. Diese werden durch neuere mathematischen Resultate der Bruchmechanik nahegelegt.

6.8 Gastaufenthalte am WIAS

J. ALEXANDER, Universität Maryland, Department of Mathematics, College Park, USA, 18. – 25. Juli.

R. S. ANDERSSEN, Commonwealth Scientific and Industrial Research Organization (CSIRO), Mathematical and Information Sciences, Canberra, Australien, 17. – 24. August.

V. ARNAUTU, University Al. J. Cuza, Department of Mathematics, Iaşi, Rumänien, 14. Juli – 13. August.

O. BIRO, Technische Universität Graz, Institut für Grundlagen und Theorie der Elektrotechnik, Österreich, 18. – 22. August.

M. BISKUP, Karls-Universität, Fakultät für Mathematik, Prag, Tschechische Republik, 8. – 25. Januar.

TH. BODINEAU, École Normale Supérieure, Paris, Frankreich, 11. – 17. August.

M. BROKATE, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Mathematisches Seminar II, 1. – 31. Mai.

M. BRUNAUD, École Normale Supérieure, Paris, Frankreich, 14. – 21. August.

V. BUTUZOV, Staatliche Universität Moskau, Fakultät für Physik, Rußland, 9. – 30. September.

L. CHAYES, University of California, Department of Mathematics, Los Angeles, USA, 8. – 14. Juni.

V. V. CHEPYZHOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau, Rußland, 16. März – 13. April.

D. CHIBISOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Steklov Institut für Mathematik, Moskau, Rußland, 1. - 30. September.

F. CLARKE, Universite de Lyon I, Institut Girard Desargues, Lyon, Frankreich, 21. September – 22. November.

C. DAFERMOS, Brown University, Faculty of Applied Mathematics, Providence, USA, 24. – 28. Juni.

D. DAWSON, Fields Institute, Toronto, Kanada, 29. November – 7. Dezember.

F. DELMAS, Université Paris-VII, Département de Mathématiques, Frankreich, 2. – 13. Juni.

R. DUDUCHAVA, Akademie der Wissenschaften Georgiens, Mathematisches Institut, Tiflis, Georgien, 17. – 22. Februar.

I. EDELMAN, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Physik der Erde, Moskau, Rußland, 1. – 30. September.

S. EHRICH, Universität Hildesheim, Institut für Mathematik, 15. – 19. Dezember.

S. ERMAKOV, Universität St. Petersburg, Fakultät für Mathematik und Mechanik, Rußland, 1. – 30. November.

J. ESCHER, Universität Basel, Mathematisches Institut, Basel, Schweiz, 18. – 30. August.

R. E. EWING, Universität Texas A & M, College Station, USA, 6. – 9. Februar.

L. FRIDMAN, State Academy of Architecture and Civil Engineering, Fachbereich Mathematik, Samara, Rußland, 28. August – 9. September.

V. GAYRARD, Centre de Physique Théorique, CNRS, Marseille, Frankreich, 3. – 31. August, 1. November – 14. Dezember.

G. GIACOMIN, Universität Zürich, Institut für Angewandte Mathematik, Schweiz, 12. – 23. Januar.

A. GUIONNET, Université Paris-Sud, Département de Mathématiques, Frankreich, 7. – 14. Dezember.

I. GOHBERG, Universität Tel Aviv, Tel Aviv, Israel, 4. Februar – 4. März.

G. GOLUBEV, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau, Rußland, 30. Juli - 31. August und 1. September – 20. Oktober.

I. GRAMA, z. Z. Justus-Liebig Universität Gießen, Mathematisches Institut, 26. - 31. Mai, 21. - 26. September.

S. HANDROCK-MEYER, Technische Universität Chemnitz, Fachbereich Mathematik, 2. – 14. März.

O. HANSEN, Johannes-Gutenberg-Universität Mainz, Fachbereich Mathematik, 1. März – 31. August.

A. HELGET, BASF AG, Ludwigshafen, 10. – 14. November.

M. HOFFMANN, Université Paris-VII, Statistique et Modèles Aléatoires, Frankreich, 17. März - 12. April, 25. August - 21. September.

D. HORSTMANN, Universität zu Köln, Mathematisches Institut, Köln, 17. – 21. November.

M. HRISTACHE, ENSAI, Bruz, Frankreich, 11. - 31. Dezember.

S. HUET, INRA, Centre de Recherche, Laboratoire de Biométrie, Jouy-en-Josas, Frankreich, 22. - 26. September.

B. IGLER, Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg, Institut für Angewandte Mathematik, Erlangen, 21. – 24. Mai.

M. JÄHNISCH, Doktorand, Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Technische Universität Berlin, 1. Januar - 31. Dezember.

P. JEGANATHAN, University of Michigan, Department of Mathematics, Ann Arbor, USA, 18. August - 8. November.

A. JUDITSKY, INRIA, Institut de Recherche en Informatique, Rhône–Alpes, Frankreich, 6. Oktober - 6. November.

V. KALANTAROV, Hacettepe University, Department of Mathematics, Beytepe, Ankara, Türkei, 20. – 27. November.

T. KAPITULA, Universität New Mexico, Department of Mathematics, Albuquerque, USA, 3. – 30. Juli.

J. KASHTANOV, Universität St. Petersburg, Fachbereich Mathematik, St. Petersburg, Rußland, 3. September - 2. Oktober.

G. KERKYACHARIAN, Université Paris-VII, Statistique et Modèles Aléatoires, Frankreich, 27. Januar - 2. Februar.

R. KHASMINSKI, Wayne State University, Department of Mathematics, Detroit, USA, 3. - 8. Mai.

A. KLENKE, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Mathematisches Institut, 19. – 25. Februar, 14. April – 5. Mai, 6. – 16. Oktober.

A. KOLODKO, Rechenzentrum, Novosibirsk, Rußland, 15. April – 15. Mai.

N. KONYUKHOVA, Russische Akademie der Wissenschaften, Rechenzentrum, Moskau, Rußland, 28. September – 11. Oktober.

S. KOSTADINOV, Universität Plovdiv, Mathematisches Institut, Bulgarien, 24. Februar – 8. März.

R. KOTECKÝ, Karls-Universität, Zentrum für Theoretische Studien, Prag, Tschechische Republik, 8. – 11. Juni.

M. KRAFT, Universität Kaiserlautern, Fachbereich Chemie, 22. November – 21. Dezember.

A. KUNOTH, Rheinisch–Westfälische Technische Hochschule Aachen, 1. – 30. Juni.

O. KURBANMURADOV, Wissenschaftliches Zentrum „Climate“, Turkmenische Akademie der Wissenschaften, Ashgabad, Turkmenistan, 4. - 12. November.

C. LAREDO, INRA, Centre de Recherche, Laboratoire de Biométrie, Jouy-en-Josas, Frankreich, 22. - 26. September.

P. LAUBIN, Universität Liège, Mathematisches Institut, Liège, Belgien, 30. November – 14. Dezember.

F. LEGALL, Université Paris-VII, Département de Mathématiques, Frankreich, 21. – 26. März.

S. LEONOV, University of Southern California, Center for Applied Mathematical Sciences, Los Angeles, USA, 14. November - 4. Dezember.

B. LEVIT, University of Utrecht, Department of Mathematics, Niederlande, 2. - 14. Juni, 1. - 14. Dezember.

R. LIPTSER, Tel Aviv University, Department of Electrical Engineering–Systems, Tel Aviv, Israel, 1. September - 31. Oktober.

M. LÖWE, Universität Bielefeld, Fakultät für Mathematik, 1. – 6. September.

O. LYKOVA, Nationale Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Institut für Mathematik, Kiew, Ukraine, 20. Oktober – 8. November.

V. G. MAZ'YA, Universität Linköping, Mathematisches Institut, Linköping, Schweden, 10. – 20. Januar, 23. – 30. Juni.

W. MERZ, Technische Universität München, Lehrstuhl für Angewandte Mathematik, 2. – 5. Dezember.

D. NATROSHVILI, Georgische Technische Universität, Mathematisches Institut, Tiflis, Georgien, 12. – 15. Februar.

N. NEFEDOV, Staatliche Universität Moskau, Fakultät für Physik, Rußland, 1. – 30. April, 2. – 9. September.

S. OLLA, Université Cergy-Pontoise, Département de Mathématiques, Paris, Frankreich, 17. Juni – 18. Juli.

S. PEREVERZEV, Ukrainische Akademie der Wissenschaften, Mathematisches Institut, Kiew, Ukraine, 1. – 31. Oktober.

F. PENZEL, Universität Darmstadt, Fachbereich 6, 1. Oktober – 31. Dezember.

S. PERGAMENSHCHIKOV, Universität Tomsk, Mathematisches Institut, Tomsk, Rußland, 26. Juni - 30. August.

D. PICARD, Université Paris-VII, Statistique et Modèles Aléatoires, Frankreich, 27. Januar - 2. Februar.

B. PLAMENEVSKI, Staatliche Universität St. Petersburg, Mathematisch–Physikalisches Institut, Physikalische Fakultät, St. Petersburg, Rußland 1. – 31. Mai.

A. POMP, Universität Stuttgart, Mathematisches Institut A, 13. – 19. Juli.

N. POPIVANOV, Universität Sofia, Fakultät für Mathematik und Informatik, Sofia, Bulgarien, 18. August – 14. September.

A. PUKHALSKII, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau, Rußland, 15. März - 16. Mai.

J. QUASTEL, Université Paris-VII, Département de Mathématiques, Frankreich, 7. – 14. Juni.

D. RACHINSKII, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau, Rußland, 1. – 31. Oktober.

E. REISSNER, Universität Augsburg, Institut für Mathematik, 23. –30. Mai.

R. S. RIVLIN, Lehigh University Pennsylvania, Division of Applied Mathematics, Pennsylvania, USA, 5. – 23. Juni.

S. RJASANOW, Universität des Saarlandes, Fachbereich Mathematik, Saarbrücken, 24. – 27. Februar, 7. – 10. Dezember.

G. R. SAVARÉ, Consiglio Nazionale della Ricerche (CNR), Istituto di Analisi Numerica, Pavia, Italien, 18. – 31. August.

I. SHALIMOVA, Russische Akademie der Wissenschaften, Rechenzentrum, Novosibirsk, Rußland, 5. - 19. Dezember.

R. O. SHAPOSHNIKOVA, Universität Linköping, Mathematisches Institut, Linköping, Schweden, 23. – 30. Juni.

S. SHOTT, Deakin University, Department of Computing and Mathematics, Geelong, Australien, 18. April - 30. August.

L. SIMON, Eötvös Loránd University, Institute of Mathematics II, Budapest, Ungarn, 9. – 13. November.

J. SOKOŁOWSKI, Université de Nancy I, Laboratoire des Mathématiques, Institut Élie Cartan, Nancy, Frankreich, 22. Juni – 5. Juli, 15. – 27. September.

K. N. SOLTANOV, Akademie der Wissenschaften Aserbaidschans, Institut für Mathematik und Mechanik, Baku, Aserbaidschan, 1. – 30. April.

D. STONIER, Deakin University, Department of Computing and Mathematics, Geelong, Australien, 6. Mai - 30. August.

G. STOYAN, Eötvös Loránd University, Institute of Mathematics II, Budapest, Ungarn, 9. – 13. November.

V. STRYGIN, Staatliche Universität Voronesh, Institut für Angewandte Mathematik, Voronesh, Rußland, 16. Juni – 17. Juli.

V. VATUTIN, Steklov Mathematical Institute, Department of Discrete Mathematics, Moskau, Rußland, 25. November 1996 – 21. Januar, 17. Oktober – 16. November.

A. VERETENNIKOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau, Rußland, 10. - 31. Dezember.

L. VOLEVICH, Russische Akademie der Wissenschaften, Keldysh-Institut für Angewandte Mathematik, Rußland, 28. März – 5. April.

M. YAMAMOTO, Universität Tokio, Mathematisches Institut, Tokio, Japan, 8. – 27. September.

A. YEW, Brown-Universität, Fachbereich Mathematik, Providence, USA, 3. Juni – 7. Juli.

M. Zahradník, Karls-Universität, Fakultät für Mathematik, Prag, Tschechische Republik, 11. November – 24. Dezember.

P. Zgliczynski, Universität Krakau, Institut für Mathematik, Polen, 24. – 28. November.

Stipendiaten

D. Tiba, Rumänische Akademie der Wissenschaften, Institut für Mathematik, Bukarest, Rumänien, 1. Oktober 1996 – 30. September 1997 (Alexander von Humboldt-Stipendium).

M. Tretyakov, Ural State University, Department of Mathematics, Ekaterinburg, Rußland, 1. Januar 1997 - 30. Juni 1998 (Alexander von Humboldt-Stipendium).

6.9 Gastvorträge

J. ALEXANDER, University of Maryland, College Park, USA, *Sliding modes in intersecting control surfaces*, 24. Juli.

H. W. ALT, Rheinische Friedrich-Wilhelm-Universität Bonn, *Evolution principle and the existence of entropy*, 9. Juli.

R. S. ANDERSSEN, CSIRO Mathematical and Information Sciences, Canberra, Australien, *For numerical differentiation, dimensionality can be a blessing*, 21. August.

J. AU, Technische Universität Berlin, *Taylor Wirbel*, 17. Dezember.

U. BAYER, GeoForschungsZentrum Potsdam, *Transport-Reaktionsprozesse in der Beckenmodellierung*, 13. Oktober.

G. BÄRWOLFF, Technische Universität Berlin, *Mathematische Modellierung und numerische Berechnung instationärer dreidimensionaler Phänomene in Kristallschmelzen*, 29. Mai.

O. BIRO, Technische Universität Graz, Österreich, *Die Eichung der Vektorpotentiale bei Anwendung der Methode der finiten Elemente auf elektromagnetische Probleme*, 21. August.

TH. BOGENSCHÜTZ, Universität Essen, *Kleine zufällige Störungen expandierender Abbildungen*, 22. Januar.

A. BOUKILI, Università di Pavia, Italien, *Mixed finite element methods for the semiconductor device equations*, 19. September.

A. BOWMAN, University of Glasgow, Großbritannien, *Understanding statistics - The role of technology*, 3. September.

M. BROKATE, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, *Nichtlineare kinematische Verfestigung*, 21. Mai.

E. BROMMUNDT, Technische Universität Braunschweig, *Polygonalisierung von Eisenbahnrädern durch Verschleiß*, 26. Mai.

H. BRUIN, Universität Stockholm, Schweden, *Factors of Fibonacci-like unimodal maps*, 21. Oktober.

V. V. BULDYGIN, National Technical University, Ukraine, *On some properties of the generalized Schottky effect processes*, 19. November.

K. CAMARDA, Albert-Einstein-Institut der MPG, Potsdam, *Strategien zur Umordnung von schwachbesetzten Matrizen aus der chemischen Prozeßsimulation für Parallel- und Vektorrechner*, 6. Februar.

V. V. CHEPYZHOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau, Rußland, *Uniform attractors for non-autonomous reaction-diffusion systems*, 2. April.

I. CHUESHOV, Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Kharkov, Ukraine, *Stochastic inertial manifolds and forms*, 19. November.

H. CRAUEL, Technische Universität Berlin, *Zufällige dynamische Systeme*, 18. November.

C. DAFERMOS, Brown University, Providence, USA, *Hyperbolic systems of conservation laws in continuum mechanics, Part I*, 26. Juni.

——, *Hyperbolic systems of conservation laws in continuum mechanics, Part II*, 27. Juni.

E. DA SILVA, Technische Universität Berlin, *Latente Wärme bei Austenit-Martensit Phasenübergängen unter Last*, 9. Juli.

J.-F. DELMAS, Université Paris-VII, Frankreich, *Super Brownian motion with catalyst*, 4. Juni.

F. DEN HOLLANDER, Universität Nijmegen, Niederlande, *How random is the composition of two random processes?* 8. Januar.

P. DRÁBEK, Westböhmische Universität, Pilsen, Tschechische Republik, *Fredholm alternative for a class of homogeneous operators*, 28. April.

R. DUDUCHAVA, Akademie der Wissenschaften Georgiens, Tiflis, Georgien, *Equations in anisotropic Sobolev spaces with weights and applications to elasticity*, 20. Februar.

I. EDELMAN, Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau, Rußland, *Evolutionary equations for the waves propagating through saturated porous media*, 19. September.

M. A. EFENDIEV, Freie Universität Berlin, *Upper and lower bounds for the Hausdorff dimension of the attractor for reaction-diffusion equations in R^n*, 9. Dezember.

S. EHRICH, Universität Hildesheim, *Einige Aspekte für Wavelets*, 15. Dezember.

M. EISWIRTH, Fritz-Haber-Institut Berlin, *Chemie der Selbstorganisation*, 24. Juni.

G. ENGL, Linde AG, Höllriegelskreuth, *Simulation und Optimierung verfahrenstechnischer Anlagen*, 5. Mai.

J. ESCHER, Universität Basel, Schweiz, *On moving boundaries in deformable porous media*, 27. August.

R. E. EWING, Texas A & M University, USA, *Mathematical modeling and simulation in environmental applications*, 7. Februar.

M. FEISTAUER, Karls-Universität Prag, Tschechische Republik, *On coupled problems for viscous compressible flow*, 14. April.

J. FRANKE, Universität Kaiserslautern, *Neuronale Netze - eine Einführung mit ökonomischen Anwendungen*, 22. Januar, 29. Januar.

M. FREIDLIN, University of Maryland, USA, *Wave fronts in incompressible fluids*, 25. Juni.

V. GAYRARD, Centre de Physique Théorique, Marseille, Frankreich, *Random Gibbs states in the Hopfield model*, 12. November.

T. GIMSE, SINTEF, Oslo, Norwegen, *On the development of software environments for porous media flow*, 7. April.

I. GOHBERG, Universität Tel Aviv, Israel, *Fast algorithms for inversion of structured matrices and applications I*, 27. Februar.

——, *Fast algorithms for inversion of structured matrices and applications II*, 3. März.

H. GREINER-MAI, GeoForschungsZentrum Potsdam, *Kopplung von Bewegungen im äußeren Erdkern mit dem Erdmantel - bisherige Resultate und ungelöste Probleme*, 12. November.

W. GRIEM, Mannesmann Datenverarbeitung, Ratingen, *Mathematik in der Praxis*, 21. April.

E. GUERRE, Université Paris-VI, Frankreich, *Optimal nonparametric estimation of First-Price-Auctions*, 8. Oktober.

A. GUIONNET, Université Paris-Sud, Frankreich, *Large deviations for the spectral measure of large random matrices and Voiculescu's non commutative entropy*, 10. Dezember.

S. HANDROCK-MEYER, Technische Universität Chemnitz, *The identification of soil transmissivity from measurements of the groundwater level*, 13. März.

M. HANSEN, Universität New Jersey, USA, *Triograms: Bivariate function estimation through the use of spline spaces defined over adaptively constructed triangulations*, 12. März.

O. HANSEN, Universität Mainz, *Über eine Quadraturformel zur Berechnung der Hilberttransformation auf graduierten Gittern*, 17. April.

T. HAUCK, Motorola GmbH, München, *Bruchmechanische Bewertung von Grenzflächenrissen in elastoplastischen Mehrkomponentenmedien*, 24. November.

A. HELGET, BASF AG, Ludwigshafen, *Numerische chemische Prozeßsimulation*, 13. November.

N. HENGARTNER, Yale University, New Haven, USA, *Estimating additive regression by the integration method in the presence of many covariates*, 17. Dezember.

M. HOFFMANN, Universität Paris-VII, Frankreich, *Nonparametric estimation for discretely observed diffusion models*, 9. April.

W. HORN, California State University, Northridge, USA, *Solutions to stationary phase-field equations*, 9. Januar.

D. HORSTMANN, Universität zu Köln, *Zur Modellierung von Chemotaxis*, 19. November.

G. HSIAO, Universität Delaware, USA, *On the homotopy method for nonlinear boundary value problems*, 22. Mai.

Y. HUO, Sichuan Union University, Sichuan, China, *A model of the active control of vibration of plates using shape memory alloy actuators*, 16. Juli.

M. HUSKOVA, Karls-Universität Prag, *Estimators of change points*, 5. Februar.

B. IGLER, Institut für Angewandte Mathematik, Erlangen, *Identifizierung nichtlinearer Sorptionsisothermen*, 22. Mai.

H. JÄGER, Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik e.V., Bereich Trier, *Anwendung von Optimierungsmethoden zur Steuerung von Industrieöfen*, 12. Februar.

P. JEGANATHAN, University of Michigan, Ann Arbor, USA, *Asymptotics in some time series with nonregular (switching) regression functions*, 22. Oktober.

A. JUDITSKY, INRIA Rhône-Alpes, Frankreich, *On minimax prediction for nonparametric autoregressive models*, 29. Oktober.

S. KABANIKHIN, Mathematisches Institut, Novosibirsk, Rußland, *Discrete inverse problems for hyperbolic equations*, 23. September.

V. KALANTAROV, Hacettepe University, Ankara, Türkei, *Attractors for semilinear wave equations*, 26. November.

R. KHASMINSKII, Wayne State University, Detroit, USA, *Statistical approach to some inverse problems for partial differential equations*, 7. Mai.

B. N. KHOROMSKIJ, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Rußland, z. Zt. Universität Stuttgart, *On robust interface reduction for strongly anisotropic elliptic equations*, 17. März.

H. KIELHÖFER, Universität Augsburg, *Musterbildung beim stationären Cahn-Hilliard-Modell*, 21. Januar.

E. KLEINE, Bundesamt für Seeschiffahrt und Hydrographie, Hamburg, *Zur Modellierung der Dynamik des Meer-Eises auf der Ostsee*, 23. Mai.

J. KLEMELÄ, Universität Helsinki, Finnland, *Nonparametric estimation of functions with spherical data*, 5. November.

A. KLENKE, Universität Erlangen, *Clustering and invariant measures for spatial branching models with infinite variance*, 16. April.

M. KŘIŽEK, Tschechische Akademie der Wissenschaften, Prag, Tschechische Republik, *Finite element approximation of a nonlinear heat conduction problem in anisotropic media*, 26. Juni.

F. KRUGGEL, Max-Planck-Institut für neuropsychologische Forschung, Leipzig, *Statistische Probleme in der Auswertung von funktionellen Magnetresonanztomogrammen*, 29. September.

M. KRUPA, Technische Universität Wien, Österreich, *Effects of forced symmetry breaking of O(2)-symmetry for the dynamics near a robust homoclinic cycle*, 23. Mai.

M. KUHN, Johannes-Kepler-Universität Linz, Österreich, *Effiziente Simulation von Magnetfeldproblemen auf der Basis von Gebietszerlegungsmethoden und FEM-BEM Kopplung*, 3. Juli.

P. LAUBIN, Universität Liège, Belgien, *Collocation methods for integral equations based on the use of singular functions*, 8. Dezember.

S. LEONOV, University of Southern California, Los Angeles, USA, *Remarks on extremal problems in nonparametric curve estimation*, 26. November.

B. LEVIT, Universität Utrecht, Niederlande, *On adaptive estimation of infinitely smooth functions*, 11. Juni.

H. LIERO, Universität Potsdam, *Parametrisch gegen Nichtparametrisch: Vergleich von Tests*, 25. Juni.

W. LINDE, Friedrich-Schiller-Universität Jena, *Kleine Abweichungen des d-dimensionalen Brownschen Blattes und Entropie*, 17. Dezember.

R. LIPTSER, Universität Tel Aviv, Israel, *Asymptotically optimal filtering*, 15. Oktober.

O. LYKOVA, Nationale Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Kiew, Ukraine, *On the reduction principle for non-autonomous systems*, 30. Oktober.

X. MARKENSCOFF, University of California, San Diego, USA, *Asymptotics for vanishingly small geometries*, 26. Juni.

P. MATANO, Universität Tokio, Japan, *Traveling waves for semilinear diffusion equations in spatially periodic media*, 8. April.

A. MATTHEUS, Deutsche Telekom AG, Technologiezentrum, Darmstadt, *Entwurf von optisch transparenten Übertragungssystemen*, 23. Juni.

V. G. MAZ'YA, Universität Linköping, Schweden, *Singularities of solutions to problems of mathematical physics in non-smooth domains*, 16. Januar.

——, *On the Wiener regularity of a boundary point for higher order elliptic operators*, 25. Juni.

TH. MERTELMEIER, Siemens AG, Medizinische Technik, Erlangen, *Mathematisch-physikalische Probleme in der Medizintechnik*, 7. Juli.

W. MERZ, Technische Universität München, *Modellierung, Analysis und numerische Simulation von Dotierungsproblemen*, 3. Dezember.

S. MIKHAILOV, Universität Stuttgart, *Singularity analysis in viscoelastic bounded materials*, 30. Mai.

S. E. MIKHAILOV, Moskauer Technologische Staatsuniversität, Rußland, *Functional approach to nonlocal fracture criteria*, 4. Juni.

R. MINLOS, IPIT Moskau, *Some models of randome in random environment*, 3. Dezember.

A. MIRANVILLE, Université de Poitiers, Frankreich, *Finite dimensional attractors for a class of generalized Cahn-Hillard equations*, 2. Dezember.

S. MITTER, M.I.T., USA, *Fixed gain stochastic recursive algorithms*, 28. Mai.

D. MÖLLE, Ingenieurbüro Dr. Kik, Berlin, *Grenzzykelberechnung bei Rad-Schiene-Systemen*, 24. Februar.

S. MOLCHANOV, University North Carolina at Virginia, USA, *Models for the random interphase growth and Kardar-Parisi-Zhang equation*, 4. Juni.

D. NATROSHVILI, Georgische Technische Universität, Tiflis, Georgien, *Mathematical problems of multifield scattering theory*, 13. Februar.

S. NAZAROV, Universität St. Petersburg, Rußland, *Self-adjoint elliptic problems with the polynomial property and the complete description of their attributes*, 20. März.

N. N. NEFEDOV, Staatliche Universität Moskau, Rußland, *Nonlinear singularly perturbed problems in the case of exchange of stability*, 29. April.

D. NUALART, Universität Barcelona, Spanien, *Stochastic Burgers equation on the real line driven by space-time white noise*, 11. Juni.

ST. OLLA, Université Cergy-Pontoise, Frankreich, *Driven tagged particle in symmetric simple exclusion*, 2. Juli.

M. PAUKSHTO, Universität St. Petersburg, Rußland, *Stability of a thin elastic layer on an elastic substratum loaded by thermal stresses*, 16. April.

V. PAVLIK, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, *Numerische Simulation der dendritischen Erstarrung*, 25. April

F. PENZEL, Technische Universität Darmstadt, *Numerische Ergebnisse zur Streuung akustischer Wellen an einer Kreisscheibe*, 4. Dezember.

S. PEREVERZEV, Nationale Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Kiew, Ukraine, *The discretization of Volterra integral equations of the third kind with weakly singular kernels*, 13. Oktober.

——, *On a characterization of self-regularization properties of the fully discrete projection method for Symm's integral equation*, 27. Oktober.

B. A. PLAMENEVSKIJ, Staatliche Universität St. Petersburg, Rußland, *Composition series in algebras of pseudodifferential operators*, 15. Mai.

——, *On hyperbolic equations in a cylinder with edges*, 28. Mai.

A. POMP, Universität Stuttgart, *Schalenmodelle und ihre numerische Lösung mittels Rand-Gebiets-Integralmethode*, 14. Juli.

N. POPIVANOV, Universität Sofia, Bulgarien, *Multidimensional M. Protters problems. Singularity of the solutions*, 28. August.

——, *Non local regularization of some ill-posed problems*, 4. September.

M. PRATELLI, Universität Pisa, Italien, *From Meyer-Zheng convergence to Skorohod convergence for semimartingales*, 29. Januar.

A. PUHALSKII, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau, Rußland, *On a large deviation analog of Le Cam's asymptotic minimax theorem*, 16. April.

D. RACHINSKII, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau, Rußland, *Asymptotic stability of large-amplitude cycles in systems with hysteresis*, 8. Oktober.

——, *Existence of solutions for semilinear elliptic differential equations*, 28. Oktober.

M. RADZIUNAS, Universität Vilnius, Litauen, *Numerical solution of nonlinear Schrödinger and other evolutionary type equations*, 13. Oktober.

R. S. RIVLIN, Lehigh University, Pennsylvania, USA, *The evolution of finite elasticity theory*, 11. Juni.

——, *The evolution of the theory of constitutive equations*, 13. Juni.

S. V. ROGOSIN, Universität Minsk, Rußland, *On singular integral equations with infinite index*, 20. Januar.

T. RYCHLIK, Polnische Akademie der Wissenschaften, Torun, Polen, *Unbiased nonparametric estimation of nonestimable functions*, 30. April.

R. RUMPEL, Berlin, *Singulär gestörte Systeme mit Gleitzuständen*, 7. Januar.

B. SARTORIUS, Heinrich-Hertz-Institut Berlin, *Gütemodulierte Halbleiterlaser - neue Bauelemente für die optische Signalverarbeitung*, 16. Juni.

G. SAVARÉ, CNR, Istituto di Analisi Numerica, Pavia, Italien, *Variable step size discretization of evolution variational equations*, 25. August.

CH. SCHUETTE, Freie Universität Berlin, *Quantenklassische Dynamik und Takens-Chaos*, 24. Juni.

D. SCHULZE, Technische Universität Ilmenau, *Numerische Berechnung quasistationärer Wirbelstromfelder verkoppelt mit instationären Temperaturfeldern*, 4. September.

A. SCHUPPERT, Hoechst AG, Frankfurt/Main, *Reaktormodellierung mit datenbasierten Modellen*, 1. Juli.

H. SCHURZ, Berlin, *Dissipative stochastische dynamische Systeme: Theorie, Numerik und Anwendungen*, 4. Februar.

B. SCHWEIZER, Institut für Wissenschaftliches Rechnen Heidelberg, *Oscillatory behaviour of viscous fluids with a free boundary*, 15. April.

S. SEELECKE, Technische Universität Berlin, *Optimale Steuerung von Flugprofilen*, 23. April.

R. O. SHAPOSHNIKOVA, Universität Linköping, Schweden, *Sobolev multipliers and their applications*, 26. Juni.

L. SIMAR, Katholische Universität Louvain-la-Neuve, Belgien, *A statistical model for DEA estimators*, 15. Januar.

L. SIMON, Eötvös Loránd University, Budapest, Ungarn, *On different types of parabolic functional differential equations. General results and examples*, 12. November.

K. SOLTANOV, Akademie der Wissenschaften Aserbaidschans, Baku, Aserbaidschan, *Existence and nonexistence of global solutions for some nonlinear elliptic-parabolic equations*, 21. April.

G. STOYAN, Eötvös Loránd University, Budapest, Ungarn, *Über die inf-sup-Stabilitätsbedingung für die Stokessche Randwertaufgabe*, 12. November.

P. STREHLOW, Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Berlin, *Anyonenphysik*, 27. Oktober.

C. STRICKER, Université Franche-Comté, Frankreich, *Fefferman and Burkholder Davis Gundy inequations*, 21. Mai.

H. STRUCHTRUP, Technische Universität Berlin, *Die Chapman-Enskog-Methode*, 26. November.

J. SYMANZIK, Iowa State University, Woodland, USA, *Dynamic statistical graphics in the C2 virtual reality environment*, 8. Januar.

P. TAKÁC, Universität Rostock, *Das starke Vergleichsprinzip für positive Lösungen von Gleichungen mit dem p-Laplace-Operator*, 11. November.

D. TIBA, Rumänische Akademie der Wissenschaften, Bukarest, Rumänien, *On the optimization of beams and plates*, 7. Mai

U. TIPPE, Berlin, *Globale Verzweigungen der gemittelten van der Polschen Gleichung*, 7. Januar.

M. TISCHLER, Steremat Elektrowärme, Berlin, *Schicht- und Kristallerwärmung, Plasmaerzeugung und Oberflächenveredlung mittels HF-Induktion*, 17. März.

D. TJOSTHEIM, Universität Bergen, Norwegen, *Panels of intercorrelated time series: Exploring linear and nonlinear models*, 12. November.

J. F. TOLAND, University of Bath, Großbritannien, *The Peierls-Nabarro and Benjamin-Ono equations*, 14. Januar.

B. TÓTH, Universität Budapest, Ungarn, *True self-repelling motion: A new type of polymer measure*, 26. November.

B. TURLACH, Australian National University, Canberra, Australien, *On local polynomial smoothers and their competitors*, 21. Mai.

Ł. TURSKI, Centre of Theoretical Physics, PAS, Warschau, Polen, *Surface diffusion: the case for* $d = 2+1$ *dynamics*, 20. November.

F. ÜBERLE, DornierMedTech, München, *Neue Entwicklungen in der medizinischen Therapie mit Stoßwellen und Mikrowellen*, 8. Dezember.

O. VANBESIEN, Institut d'électronique et de microélectronique du Nord, Lille, Frankreich, *Modelling issues for quantum devices*, 10. Februar.

R. VAN DER HOFSTAD, Universität Utrecht, Niederlande, *A new approach to lace expansion for random walks with a global interaction*, 9. Juli.

V. A. VATUTIN, Steklov Mathematical Institute, Moskau, Rußland, *Genealogical trees of branching processes in random environment*, 22. Oktober.

M. I. VISHIK, Staatliche Universität Moskau, Rußland, *Trajectory attractors for elliptic partial differential equations in cylindrical domains*, 28. Januar.

L. VOLEVICH, Russische Akademie der Wissenschaften, Keldysh-Institut für Angewandte Mathematik, Rußland, *Numerical conformal mappings and its application to the numerical analysis of potential flows in double-connected domains*, 3. April.

N. WANG, Texas A & M University, Austin, USA, *Covariate measurement errors in generalized linear mixed models*, 10. Dezember.

G. WARNECKE, Otto-von-Guericke-Universität, Magdeburg, *A posteriori Fehlerschätzung*, 6. Juni.

W. WEFELMEYER, Universität-Gesamthochschule Siegen, *Efficient estimation in Markov chain models*, 3. Dezember.

M. WIEGNER, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, *Degenerierte Diffusionsgleichungen*, 5. Februar.

R. WIRTH, Daimler-Benz AG, Ulm, *Data mining bei Daimler Benz*, 9. Juni.

D. WOLF, L. BALLANI, J. HOEPFNER, GeoForschungsZentrum Potsdam, *Viskoelastische Erdmodelle, inverse Aufgaben und Zeitreihenanalysen*, 10. November.

G. WOZNY, Technische Universität Berlin, *Nichtlinearitäten bei der Simulation thermischer Trennprozesse*, 1. Juli.

H. XU, Technische Universität Berlin, *Electron beam physical vapour deposition and thermal barrier coating*, 29. Oktober.

M. YAMAMOTO, Universität Tokio, Japan, *Uniqueness and stability in an inverse corrosion problem*, 18. September.

A. YEW, Brown University, Providence, USA, *Pulses due to second harmonic generation in quadratic optical media*, 12. Juni.

M. YOR, Universität Paris-VI, Frankreich, *Asian options revisted*, 7. Mai.

J. ZABCZYK, Universität Warschau, Polen, *Stochastic evolutions with homogenous noise*, 5. Februar.

M. ZAHRADNÍK, Karls-Universität Prag, Tschechische Republik, *Phase transitions in continuous spin models with double well potentials*, 3. Dezember.

A. ZAITSEV, Russische Akademie der Wissenschaften, St. Petersburg, Rußland, *Multidimensional version of the Hungarian construction for sums of independent random vectors*, 28. Mai.

P. ZGLICZYNSKY, Universität Krakau, Polen, *Computer assisted proof of chaos in the Henon map, the Roessler system, and the Lorenz equations*, 25. November.

H. ZORSKI, Polnische Akademie der Wissenschaften, Institut für technische Grundlagenforschung , Warschau, Polen, *Thermomechanics of peptids and DNA-chains*, 27. Januar.

Prof. Dr. F. Clarke von der Universität Lyon I, Frankreich, hielt im Zeitraum vom 22. September – 11. November eine Gastvorlesungsreihe mit 8 Vorlesungen zum Thema *Nonsmooth Analysis and Control Theory*.

6.10 Mitveranstaltung auswärtiger Tagungen

R. LAUTERBACH, (mit J. Scheurle (München), M. Dellnitz (Bayreuth)), *Tagung „Äquivariante Dynamische Systeme"*, Berlin, 19. - 13. Mai.

J. POLZEHL, Organisator einer Sektion der *1997 Joint Statistical Meetings „Recent developments in Projection Pursuit"*, Institute of Mathematical Statistics, International Biometric Society, Statistical Society of Canada, Anaheim, USA, 10. – 14. August.

S. PRÖSSDORF, Mitglied des Organisationskommittees, *"International Workshop on Approximation Theory and Numerical Analysis"*, Vico Equense, Italien, 9. – 11. September.

——, Mitveranstalter und Chairman der Sektion *"Computational aspects of wavelets analysis"*, ISAAC Congress 97, Delaware, USA, 3. – 7.Juni.

J. SPREKELS, Mitveranstalter des *ESF-Workshops „Variational Problems with Free Interfaces"*, Pisa, Italien, 20. – 22. Februar.

K. WILMAŃSKI, *„Euromech Colloquium 366"*, Essen, 23. – 25. Juni.

6.11 Produkte

ToSCA

ToSCA (Two dimensional Semi-Conductor Analysis package) ist ein Programmsystem zur numerischen Simulation von Ladungstransportvorgängen in Halbleiterstrukturen. Es basiert auf dem Drift-Diffusionsmodell und berücksichtigt eine Vielzahl zusätzlicher physikalischer Effekte, wie magnetische Felder, optische Strahlung, Temperatureinflüsse und die Kinetik tiefer Störstellen. Seine Leistungsfähigkeit beruht auf dem analytischen Studium des stark nichtlinearen Systems partieller Differentialgleichungen (van Roosbroeck), das die Elektronen- und Löcherströme beschreibt.
In ToSCA sind sowohl für den stationären als auch den zeitabhängigen Fall sehr effiziente numerische Verfahren implementiert. Die Finite-Elemente-Methode gestattet, weitgehend beliebige räumlich zweidimensionale Strukturen zu behandeln.
ToSCA wird erfolgreich in der halbleiterphysikalischen Forschung und in der Mikroelektronik bei der Entwicklung von Transistoren, Dioden, Sensoren, Detektoren und Lasern eingesetzt.
Der Bauelementesimulator arbeitet in einer UNIX-Umgebung auf Workstations und ist für verschiedenste Rechnerarchitekturen verfügbar (SUN SPARC, IBM RS 6000, HP 9000/700, DEC Alpha/OSF1, SGI, Linux 486 PC).

ClusCorr - Statistiksoftware zur Clusteranalyse und multivariaten grafischen Darstellung

Die Software ClusCorr kann zur Klassifikation, Clusteranalyse und multivariaten grafischen Darstellung umfangreicher und hochdimensionaler Datenmengen eingesetzt werden. Sie erkennt Strukturen in den Daten. Hierzu werden neue adaptive statistische Techniken sowie aus der Literatur bekannte und in der praktischen Anwendung bewährte Methoden eingesetzt. 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.

DIPOG, Direkte und inverse Probleme bei optischen Gittern

Das System dient zur Simulation und Optimierung von periodischen Beugungsgittern. Beim direkten Problem werden die Beugungseffizienten von vorgegebenen periodischen diffraktiven Strukturen berechnet. Beim inversen Problem geht es um den optimalen Entwurf von Beugungsgittern, die vorgegebene Funktionen, z. B. Effektivitätsverläufe oder Phasenverschiebungen, realisieren. Dabei wird ein Zielfunktional konstruiert, für das über einer Klasse von zulässigen Gittergeometrien ein Minimum mittels Gradientenabstiegsverfahren gesucht wird. Die Gradienten und Effektivitäten werden aus der exakten Beugungstheorie mittels Finite-Element-Methode berechnet. Mit der implementierten Software lassen sich vorerst auf Vielschichtsystemen aufgebrachte binäre periodische Strukturen modellieren und optimieren.

pdelib

pdelib ist ein System von Softwarekomponenten für die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen. Seine modulare Struktur, das bottom-up Konzept für den Entwurf und die Verwendung portabler Softwaretools erlauben die Verwendung bei rapid prototyping, bei der Entwicklung eigenständiger Programmpakete und beim Einbau in bereits vorhandene Softwareumgebungen. Eine flexible Gitterverwaltungsschnittstelle, welche die Einbindung von Paketen wie IBG und den adaptiven Code KASKADE (Konrad-Zuse-Zentrum) erlaubt, iterative und direkte Löser und eine integrierte OpenGL-Graphik bilden die Basis des Systems. Die Entwicklung zu einem marktfähigen Produkt führt über die Realisierung einer Reihe von Anwendungsprojekten auf der Basis dieses Systems.

IBG

IBG (Intersection-Based Grid Generation and Geometry Description Package) besteht aus einem universell einsetzbaren Gittergenerator und einem Paket zur Erzeugung von Geometriebeschreibungen.
Der Gittergenerator erlaubt die vollautomatische Erzeugung von Delaunay-Gittern in 1D, 2D und 3D. Er erlaubt es, die Gitterdichte lokal und richtungsabhängig zu steuern.
Das Geometriebeschreibungspaket erlaubt eine einfache Erzeugung und Veränderung auch sehr komplizierter Geometrien und die Anbindung an leicht bedienbare Benutzerschnittstellen. Der im Beta-Status befindlichen Version 2.0 liegt ein komplettes Re-Design der Datenstrukturen zugrunde, welches einige ungelöste Probleme dieser Software behebt.

gltools

gltools ist ein Graphikpaket auf der Basis von OpenGL. Es stellt die Verwaltung von OpenGL-Fenstern mit Anschluß an MPEG-Software, ein Tool zur Verwaltung von Rendering-Volumina und eine Bibliothek von Visualisierungstools für Simplexnetze zur Verfügung, welche über eine prozedurale Schnittstelle leicht in vorhandene Codes eingegliedert werden kann. Damit kann dieses Paket zum Debugging bei der Entwicklung von 3D-Finite-Elementeprogrammen eingesetzt werden, ohne den Umweg über komplexe und/oder teure 3D-Visualisierungspakete gehen zu müssen.

6.12 Drittmittelprojekte

Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (BMBF)

- **Anwendungsorientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik**

  „Reaktions-Diffusionsgleichungen in Mehrphasensystemen mit Anwendungen in der Halbleitertechnologie“

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

  „Numerische Verfahren zur Lösung großer strukturierter Systeme von Algebro-Differentialgleichungen der chemischen Verfahrenstechnik“

- **Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft**

  „Modellierung und Simulation von hochsperrenden Bauelementen für Schaltkreise der angesteuerten Leistungselektronik“

  „Modellierung und Simulation verspannter Quantenschichten in Halbleiterlasern“

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

  „Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen“

  „Analytische und numerische Behandlung direkter und inverser Probleme für diffraktive Strukturen“

  „Entwicklung der mathematischen Grundlagen für ein neues Ultraschallpulsmeßverfahren“

  „Optimale Steuerung der Sublimationszüchtung von SiC-Kristallen“

  „3D-Simulation von Halbleiterdetektoren“

  „Modellierung, Analyse und Simulation des Widerstands-Impulsschweißens“

- mit BMW Rolls-Royce Aeroengines, Dahlewitz: „Theoretische Untersuchungen zum Stabilitätsverhalten“ (HTGT–Turbotech II)

DAAD

- PROCOPE
- Wissenschaftleraustausch mit Schweden

Deutsche Forschungsgemeinschaft, Bonn

- „Multiskalen-Methoden für die numerische Behandlung von Operatorgleichungen“
- „Untersuchung von Halbleitergleichungen mit der Einteilchenenergie als einer unabhängigen Variablen“

- „Numerische Verfahren für Schrödinger-Poisson-Systeme zur Modellierung von Halbleitern“
- „Adaptive Multiskalenmethoden zur Lösung von Randintegralgleichungen“
- „Analytische Untersuchungen von Elektro-Reaktions-Diffusionsgleichungen mit nichtglatten Daten“
- Schwerpunktprogramm: „Interagierende stochastische Systeme von hoher Komplexität“
- Schwerpunktprogramm: „Strukturbildung in dissipativen kontinuierlichen Systemen“
- Schwerpunktprogramm: „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“
- Schwerpunktprogramm: „Echtzeitoptimierung großer Systeme“
- deutsch-ukrainische Zusammenarbeit: „Quasiperiodische Störungen“
- Kooperationsprojekt zum Thema „Singulär gestörte Systeme und Stabilitätswechsel“ deutscher und russischer Wissenschaftler im Rahmen des Memorandum of Understanding zwischen DFG und RFFI
- Sonderforschungsbereich 373, Humboldt–Universität zu Berlin,
„Quantifikation und Simulation ökonomischer Prozesse“
- Graduiertenkolleg Technische Universität Berlin,
„Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“
- Wissenschaftleraustausch mit Rußland

Europäische Union

- **(HCM)** „Nonlinear boundary value problems“
- **(HCM)** „Statistics of stochastic processes“
- **(HCM)** „Phase transitions and surface tension“
- **(INTAS)** „Nonlinear and singular partial differential equations and their applications“

Alexander von Humboldt-Stiftung

- zwei Stipendiaten

BASF

- „Offline Optimierung diskontinuierlicher Destillationsprozesse“

BMW Rolls-Royce Aeroengines, Dahlewitz

- „Untersuchung lokaler und globaler Strömungsstabilitätsphänomene in Turboverdichtern“

Daimler–Benz AG, Ulm

- „ClusCorr“

Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik, Berlin

- „Simulation von monolithisch integrierten Höchstfrequenzschaltungen“