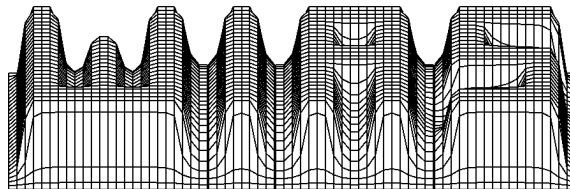


**Weierstraß-Institut
für Angewandte Analysis und Stochastik
(WIAS)**

im Forschungsverbund Berlin e. V.

Jahresforschungsbericht 2000



Berlin 2001
ISSN 1437-7489

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

Fax: + 49 30 2044975
E-Mail: preprint@wias-berlin.de
World Wide Web: <http://www.wias-berlin.de/>

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Vorwort | 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 | 9 |
| 3.2.1 | Forschungsgruppe Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen | 9 |
| 3.2.2 | Forschungsgruppe Dynamische Systeme | 10 |
| 3.2.3 | Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen | 10 |
| 3.2.4 | Forschungsgruppe Nichtlineare Optimierung und Inverse Probleme | 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 | 11 |
| 3.2.8 | Wissenschaftlich-technische Dienste | 11 |
| 4 | Forschungsergebnisse und Anwendungsprojekte | 13 |
| 4.1 | Forschungsgruppe Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen | 13 |
| 4.1.1 | Zusammenfassung | 13 |
| 4.1.2 | Projekte | 14 |
| | Modellierung und Simulation von langwelligen SMQW-Halbleiterlasern | 14 |
| | Existenz von Lösungen für Paardiffusionsmodelle | 17 |
| | Lösbarkeit quasilinearer Evolutionsgleichungen mit unglatten Daten in L^p | 19 |
| | Optimierung der Oberflächenhärtung mit Laser- und Elektronenstrahl | 22 |
| | Modellierung und Simulation von hochsperrenden Bauelementen für Schaltkreise der angesteuerten Leistungselektronik | 24 |
| | Mathematische Modellierung von Hysteresephänomenen | 27 |
| | Existenz und Optimierung nichtglatter mechanischer Strukturen | 30 |
| 4.2 | Forschungsgruppe Dynamische Systeme | 33 |
| 4.2.1 | Zusammenfassung | 33 |
| 4.2.2 | Projekte | 34 |
| | Dynamik von Halbleiterlasern | 34 |
| | Normalformen für homokline Bifurkationen | 40 |
| | Mehrskalensysteme | 43 |
| 4.3 | Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen | 46 |
| 4.3.1 | Zusammenfassung | 46 |
| 4.3.2 | Projekte | 47 |
| | Adaptive Verfahren für Transportprozesse in porösen Medien | 47 |
| | Zweidimensionale numerische Simulation von direkt mit Methanol betriebenen Brennstoffzellen (DMFC) | 49 |

| | | |
|-------|---|-----|
| | Simulation von Mikrowellenschaltungen | 51 |
| | Simulation dynamischer Prozesse in der Verfahrenstechnik | 55 |
| | Gittergenerierung | 59 |
| | Präsentation und Visualisierung von numerischen Simulationen | 61 |
| 4.4 | Forschungsgruppe Nichtlineare Optimierung und Inverse Probleme | 62 |
| 4.4.1 | Zusammenfassung | 62 |
| 4.4.2 | Projekte | 63 |
| | Diffraktive Strukturen der Optik | 63 |
| | Optimierungsprobleme mit zufälligen und nichtglatten Daten | 67 |
| | Parameterschätzung bei Pasten | 70 |
| | Bahnplanung | 72 |
| | Optimierung und Filterdesign | 74 |
| | Parameterschätzung bei Mehrphasenströmungen | 75 |
| | Adaptive Multiskalenmethoden | 77 |
| | Integralgleichungsmethoden | 79 |
| 4.5 | Forschungsgruppe Stochastische Systeme mit Wechselwirkung | 80 |
| 4.5.1 | Zusammenfassung | 80 |
| 4.5.2 | Projekte | 81 |
| | Tiefemperaturphasen in Modellen mit langreichweitiger Wechselwirkung | 81 |
| | Spin-Gläser und Neuronale Netze | 83 |
| | Stochastische Dynamik | 85 |
| | Gegenseitig katalysierende Verzweigungsstrukturen | 87 |
| | Elektronentransport in ungeordneten Materialien | 89 |
| | Stochastische Partikelsysteme als numerische Verfahren für Probleme der Aerosoldynamik | 90 |
| | Effektive Steuerung von stochastischen Partikelverfahren für Strömungen in verdünnten Gasen | 92 |
| 4.6 | Forschungsgruppe Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik | 94 |
| 4.6.1 | Zusammenfassung | 94 |
| 4.6.2 | Projekte | 95 |
| | Inferenz für komplexe statistische Modelle | 95 |
| | Angewandte Finanzmathematik | 104 |
| | Numerik komplexer stochastischer Modelle | 108 |
| 4.7 | Forschungsgruppe Kontinuumsmechanik | 116 |
| 4.7.1 | Zusammenfassung | 116 |
| 4.7.2 | Projekte | 118 |
| | Anfangs- und Randwertprobleme | 118 |
| | Spannungsanalyse einer Waferplatte | 120 |
| | Simulation eines zweiphasigen Kühlsystems | 123 |
| | Phasenübergänge | 125 |
| | Nichtisotherme Massenaustauschprozesse in porösen Körpern | 127 |
| | Strömungsinstabilitäten und Musterentstehung (Piping) in granularen Stoffen | 129 |
| | Wellenausbreitung in porösen und granularen Stoffen | 131 |
| 4.8 | Gruppenübergreifende Projekte | 133 |
| 4.8.1 | Projekte | 133 |
| | Optimale Steuerung der Sublimationszüchtung von SiC-Kristallen | 133 |

| | |
|---|------------|
| Langzeitverhalten von Reaktions-Diffusionsgleichungen | 136 |
| Mehrskalenmodellierung thermomechanischer Körper | 137 |
| Simulation von Quantum-Well-Strukturen | 139 |
| Modellierung, Analyse und Simulation des Widerstands-Impulsschweißens | 142 |
| 3D-Simulation von DEPMOS-Röntgendektoren | 144 |
| 5 Wissenschaftlich-technische Dienste | 147 |
| 5.1 Bibliothek | 147 |
| 5.2 Fachinformation | 149 |
| 5.3 Rechentechnik | 150 |
| 6 Publikationen, wissenschaftliches Leben | 152 |
| 6.1 Veröffentlichungen | 152 |
| 6.2 Preprints, Reports | 161 |
| 6.2.1 WIAS-Preprint-Serie | 161 |
| 6.2.2 WIAS-Report-Serie | 165 |
| 6.2.3 Preprints/Reports an anderen Einrichtungen | 166 |
| 6.3 Mitherausgabe von Zeitschriften | 168 |
| 6.4 Vorträge und Gastaufenthalte von Mitarbeitern | 169 |
| 6.5 Arbeitsaufenthalte von Mitarbeitern | 186 |
| 6.6 Vorlesungen und Seminare | 188 |
| 6.7 Dissertationen, Habilitationen und Rufe | 191 |
| 6.8 Eigene Tagungen und Veranstaltungen des WIAS | 192 |
| 6.9 Gastaufenthalte am WIAS | 194 |
| 6.10 Gastvorträge | 201 |
| 6.11 Mitveranstaltung auswärtiger Tagungen | 209 |
| 6.12 Produkte | 210 |
| 6.13 Drittmittelprojekte | 213 |
| Index | 216 |

1 Vorwort

Das Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS) legt hiermit Kollegen und Förderern des Instituts seinen Jahresforschungsbericht 2000 vor. Der Bericht gibt in seinem ersten Teil Auskunft über die gemachten Fortschritte und die erzielten Resultate, gegliedert nach Forschungsgebieten, Projekten und Einzelthemen. Im zweiten Teil wird ein Überblick über das wissenschaftliche Leben am WIAS gegeben.

In wissenschaftlicher Hinsicht war das Jahr 2000 wiederum erfolgreich. Die Arbeiten am neuen, im Berichtsjahr ausgearbeiteten *Forschungsprogramm 2001–2003* wurden inzwischen aufgenommen. Es gelang dem Institut, in Zeiten knapper werdenden Geldes und wachsender Konkurrenz seine Stellung als führende Institution im Bereich der mathematischen Behandlung konkreter Problemstellungen aus komplexen Anwendungsfeldern nicht nur zu halten, sondern weiter auszubauen. Dabei konnten wesentliche Beiträge sowohl zur Lösung konkreter Anwendungsprobleme als auch zu innermathematischen Problemstellungen geleistet werden, und die interne Verflechtung innerhalb des Instituts sowie die Anzahl der interdisziplinär bearbeiteten Aufgabenstellungen aus Industrie, Wirtschaft und Wissenschaft nahmen weiter zu.

Die positive Entwicklung spiegelt sich einerseits wider in der im Vergleich zum Vorjahr wiederum gesteigerten Drittmittelinwerbung, wobei es dem Institut erfreulicherweise gelang, verstärkt Drittmittel aus der Wirtschaft einzuwerben; andererseits war die Anzahl der in referierten Fachzeitschriften erschienenen Publikationen und der eingeladenen Vorträge auf internationalen Tagungen erfreulich. Auch der im Jahre 1998 aufgrund einer Empfehlung des Wissenschaftsrats begonnene Aufbau einer neuen Arbeitsgruppe *Finanzmathematik* verlief im Berichtsjahr weiterhin ausgesprochen erfolgreich.

Besonders augenfällig wird der hohe Stellenwert, den die am WIAS geleistete Arbeit in der Scientific Community hat, im Bereich der Berufungen: Im Berichtsjahr 2000 wurde wiederum ein Mitarbeiter des Instituts auf eine C4-Professur berufen; seit der Gründung des Instituts im Jahre 1992 sind damit nunmehr schon 17 Mitarbeiter des Instituts auf Professuren berufen worden (davon acht auf C4-Professuren und fünf auf Professuren im Ausland), eine Bilanz, die sich bei einer Zahl von derzeit 54 etatisierten Wissenschaftlern wirklich sehen lassen kann.

Die an sich schon intensive Kooperation mit den mathematischen Institutionen im Raum Berlin wurde weiter vertieft. Besonderes Augenmerk galt dabei der Zusammenarbeit mit den Berliner Hochschulen. Besonders erfreulich war die Tatsache, dass mit dem erfolgreichen Abschluss der gemeinsamen Berufung von Prof. Bänsch auf die Stelle des Leiters der Forschungsgruppe *Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen* und auf eine C4-S-Professur an der Freien Universität Berlin im vergangenen Jahr ein zentrales strukturelles Problem des WIAS endlich behoben werden konnte. Eine weitere gemeinsame Berufung des Leiters der Forschungsgruppe *Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik* auf eine C4-S-Professur an der Humboldt-Universität zu Berlin steht in Aussicht.

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

Unverändert bleibt es das übergeordnete Ziel des Instituts, Grundlagenforschung und anwendungsorientierte Forschung miteinander zu verbinden und durch neue wissenschaftliche

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

In organisatorischer Hinsicht war die Arbeit des Instituts durch die Einführung der *Kosten- und Leistungsrechnung* zum 01.01.2001 gekennzeichnet. Gleichzeitig bereitete das Institut die erstmalige Aufstellung von *Programmbudgets* (für die Jahre 2001/2002) vor. Die Arbeiten an der Kosten- und Leistungsrechnung und am Programmbudget erforderten erhebliche Anstrengungen. Als Resultat dieser Bemühungen werden damit am WIAS ab dem Jahre 2001 die wichtigsten Elemente eines internen Controlling-Systems implementiert sein.

Die Herausforderungen im Jahre 2001 werden für das WIAS erheblich sein. Das Institut sollte aufgrund seiner wissenschaftlichen Leistungsfähigkeit in der Lage sein, die zukünftigen Probleme bewältigen zu können; das WIAS hat allen Grund, optimistisch in die Zukunft zu blicken.

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

Berlin, im Februar 2001

J. Sprekels
Direktor

2 Wissenschaftlicher Beirat des WIAS

Prof. Dr. P. Deuffhard

Konrad-Zuse-Zentrum
für Informationstechnik
Berlin (ZIB)
Takustraße 7
14195 Berlin

Prof. Dr. G. Dziuk

Alb.-Ludwigs-Univ. Freiburg
Institut für Angewandte
Mathematik
Hermann-Herder-Str. 10
79104 Freiburg

Prof. Dr. H. Föllmer

Humboldt-Univ. zu Berlin
Math.-Naturwiss. Fakultät II
Institut für Mathematik
Rudower Chaussee 25
12489 Berlin

Prof. Dr. D. Kröner

Alb.-Ludwigs-Univ. Freiburg
Institut für Angewandte
Mathematik
Hermann-Herder-Str. 10
79104 Freiburg

Prof. Dr. U. Langer

Johannes Kepler Univ. Linz
Institut für Analysis
und Numerik
Altenberger Str. 69
A-4040 Linz
Österreich

Prof. Dr. M. Niezgódka

Interdisciplinary Centre for
Math. and Comput. Modelling
Warsaw University
Pawińskiego 5 A
PL-02-106 Warsaw
Poland

J. Noack

Mitglied des Vorstandes
Berlin-Hannoversche
Hypothekenbank AG
Budapester Str. 1
10787 Berlin

PD Dr. L. Overbeck

Deutsche Bank AG
Risk Management
Taunusanlage 12
60325 Frankfurt am Main

Prof. Dr. C. J. van Duijn

Dept. for Mathematics and
Computer Science
TU-Eindhoven
P.O. Box 513
NL-5600 MB Eindhoven
The Netherlands

3 Aufgabenstellung und Struktur des WIAS

3.1 Aufgabenstellung des WIAS

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

Die Forschungen am WIAS konzentrierten sich im Berichtsjahr auf die folgenden *Schwerpunktt Themen*, in denen das WIAS besondere Kompetenz bezüglich Modellierung, Analysis und Simulation besitzt:

- Mikro-, Nano- und Optoelektronik,
- Optimierung und Steuerung in der Verfahrenstechnik,
- Phasenübergänge,
- Stochastik in Natur- und Wirtschaftswissenschaften,
- Strömungs- und Transportprobleme in Kontinuen,
- Numerische Methoden der Analysis und Stochastik.

Dabei wurden u. a. mathematische Problemstellungen aus den folgenden Bereichen bearbeitet¹:

1. Mikro-, Nano- und Optoelektronik

- Mikroelektronische Bauelemente (Technologie- und Bauelementesimulation von Halbleiterbauelementen; in FG 1 und FG 3)
- Simulation von mikroelektronischen Schaltkreisen und von Mikrowellenschaltungen (in FG 3)
- Modellierung von Halbleiterlasern (in FG 1, FG 2 und FG 3)
- Diffraktive Optik (Simulation und Optimierung optischer Gitter; in FG 4)

2. Optimierung und Steuerung in der Verfahrenstechnik

- Simulation und Steuerung chemischer Anlagen (in FG 2, FG 3 und FG 4)
- Robotik (Optimierung und inverse Modellierung von Mehrkörpersystemen; in FG 4)

¹In Klammern sind die Forschungsgruppen (FG) angegeben, in denen das Thema jeweils behandelt wurde.

- Probleme des Optimal Shape Design (in FG 1)

3. Phasenübergänge

- Wärmebehandlung und Schweißverfahren bei Stählen (Modellierung und Simulation; in FG 1)
- Phasenfeldmodelle (Simulation von Formgedächtnislegierungen, flüssig-fest-Übergängen und Phasenseparation; in FG 1, FG 3 und FG 7)
- Stochastische Modellierung von Phasenübergängen und Spingläsern (in FG 5)
- Verfahren der Züchtung von SiC- und GaAs-Einkristallen (in FG 1 und FG 7)

4. Stochastik in Natur- und Wirtschaftswissenschaften

- Stochastische Teilchensysteme und kinetische Gleichungen (Modellierung und Simulation von Koagulationsprozessen und Gasströmungen; in FG 5, FG 6 und FG 7)
- Modellierung von Aktien-, Zins- und Wechselkursen (in FG 6)
- Bewertung von Derivaten, Portfolio-Management und Risikobewertung (in FG 6)
- Nichtparametrische statistische Methoden (Bildverarbeitung, Finanzmärkte, Ökonometrie; in FG 6)
- Datenanalyse (Cluster- und Diskriminanzanalyse, Credit-Scoring; in FG 6)

5. Strömungs- und Transportprobleme in Kontinuen

- Navier-Stokes-Gleichungen (in FG 3)
- Strömungen und Massenaustausch in porösen Medien (Wasser- und Stofftransport in Böden und in porösen Gesteinen, Zweiphasenströmungen und Modellierung von Brennstoffzellen; in FG 3 und FG 7)
- Thermomechanik poröser Körper und granularer Stoffe (Schall- und Stoßwellen, Streuung und Beugung; in FG 7)

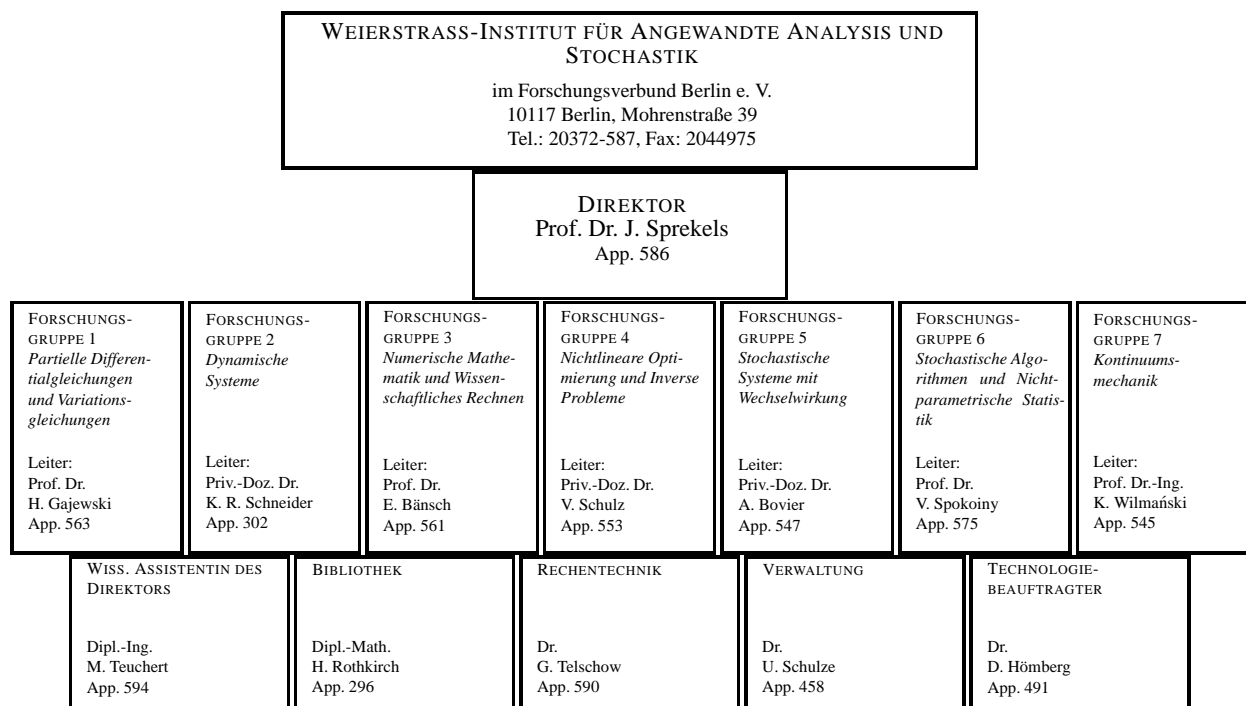
6. Numerische Methoden der Analysis und Stochastik

- Numerische Lösung partieller Differentialgleichungen (Finite-Volumen- und Finite-Element-Methoden, Vorkonditionierer, Gittergeneration, Fehlerschätzer und Adaptivität; in allen Forschungsgruppen, insbesondere in FG 3)
- Numerik von Algebra-Differentialgleichungen (in FG 3)
- Numerik von Integralgleichungen (Randelementmethoden, Waveletalgorithmen; in FG 4)
- Verfahren der nichtlinearen Optimierung (in FG 4)

- Stochastische Numerik (in FG 6)
- Monte-Carlo-Verfahren (kinetische Gleichungen, Koagulationsdynamik, Teilchensysteme; in FG 5, FG 6 und FG 7)
- Weiterentwicklung von Softwarepaketen des WIAS (WIAS-TeSCA, ClusCorr98[®], DI-POG, COG, LDSL-Tool, pdelib; in FG 1, FG 2, FG 3, FG 4 und FG 6)

3.2 Organisatorische Struktur des WIAS

Zur Erfüllung seiner wissenschaftlichen Aufgabenstellung war das WIAS im Berichtsjahr 2000 nach fachspezifischen Gesichtspunkten in sieben Forschungsgruppen gegliedert; hinzu kamen die wissenschaftlich-technischen Dienste. Im Folgenden sind die Aufgaben dieser Abteilungen angegeben. Dabei ist zu bemerken, dass zur Lösung konkreter Anwendungsprobleme in der Regel *längerfristig kooperierende interdisziplinäre Projektgruppen* zusammen mit Anwendern gebildet werden, in die Institutsmitarbeiter aus verschiedenen Fachrichtungen ihre jeweilige mathematische Expertise einbringen. Diese Arbeitsweise nutzt die spezifischen Möglichkeiten eines außeruniversitären Instituts und trägt mit zur *horizontalen Vernetzung* innerhalb des Instituts bei. Die Verbesserung der horizontalen Vernetzung innerhalb des Instituts im Sinne eines möglichst effektiven Einsatzes der personellen Ressourcen ist eine ständige Aufgabe des Instituts.



3.2.1 Forschungsgruppe Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen

Die Arbeiten der Forschungsgruppe befassen sich mit der qualitativen Analyse von Systemen nichtlinearer partieller Differentialgleichungen und, darauf aufbauend, mit der Entwicklung von Verfahren zu ihrer numerischen Lösung. Die betrachteten Gleichungen modellieren komplexe

Phänomene und Prozesse insbesondere aus Physik, Chemie, Materialwissenschaften und Technik und bilden die Grundlage zu deren numerischer Simulation.

Die Forschungsschwerpunkte der Forschungsgruppe lagen im Jahr 2000 auf den Gebieten

- Stoff-, Ladungs- und Energietransport in heterogenen Halbleiterstrukturen,
- Modellierung optoelektronischer Bauelemente unter Einbeziehung von Quantisierungseffekten,
- Phasenfeldmodelle, Züchtungssimulation und Hysterese-Phänomene bei Phasenübergängen.

3.2.2 Forschungsgruppe Dynamische Systeme

Die Arbeiten dieser Forschungsgruppe befassten sich mit der Modellierung, der qualitativen Analyse, der numerischen Untersuchung und der Steuerung dynamischer Systeme, die Prozesse in der Optoelektronik, in der Reaktionskinetik und in der Biochemie beschreiben. Das zentrale Forschungsthema der Gruppe war die

- Nichtlineare Dynamik von Mehrsektions-Halbleiterlasern.

3.2.3 Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen

Die mathematische Modellierung naturwissenschaftlicher und technologischer Vorgänge erfordert die effiziente numerische Lösung von Systemen nichtlinearer gewöhnlicher und partieller Differentialgleichungen sowie von großen Systemen von Algebra-Differentialgleichungen. Die Hauptaufgabe der Forschungsgruppe bestand in der Entwicklung, theoretischen Begründung und Implementierung numerischer Methoden zur Lösung solcher Systeme. Die Untersuchungen konzentrierten sich auf die Themenkreise

- Numerische Verfahren und Softwarekomponenten für die Lösung von Systemen partieller Differentialgleichungen (insbesondere in der Mikro-, Nano- und Optoelektronik, bei Phasenübergängen und bei Strömungs- und Transportvorgängen),
- Simulation von Höchstfrequenzschaltungen,
- Dynamische Simulation chemischer Prozesse.

3.2.4 Forschungsgruppe Nichtlineare Optimierung und Inverse Probleme

Die Arbeiten dieser Forschungsgruppe befassten sich mit der theoretischen Analyse, Entwicklung und Implementierung numerischer Methoden für große Probleme der Optimierung und Inversen Modellierung. Die Themenschwerpunkte lagen in den Bereichen

- Modellierung und optimales Design diffraktiver Strukturen der Mikrooptik,
- Optimale Steuerung in der chemischen Verfahrenstechnik,
- Inverse Probleme der Elektromagnetik und Optik.

3.2.5 Forschungsgruppe Stochastische Systeme mit Wechselwirkung

Die mathematische Analyse sehr großer Systeme und Strukturen mit wechselwirkenden Komponenten ist in zahlreichen Bereichen der Naturwissenschaften und in vielen technischen Anwendungen von Bedeutung. Die Forschungsgruppe befasste sich in diesem Zusammenhang im Berichtsjahr mit Fragestellungen aus den Gebieten

- Gleichgewicht und Dynamik von ungeordneten Systemen,
- Katalytische Verzweigungsstrukturen und wechselwirkende Diffusionen,
- Stochastische Teilchensysteme und kinetische Gleichungen.

3.2.6 Forschungsgruppe Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik

Die Forschungsgruppe befasste sich mit Arbeiten zur Angewandten Stochastik und Finanzmathematik. Die Schwerpunkte lagen dabei auf den Bereichen

- Risikomessung, Bewertung und Simulation von Zinsderivaten sowie Portfolio-Optimierung,
- Stochastische Algorithmen und Turbulenztheorie,
- Nichtparametrische statistische Methoden der Bildverarbeitung und der Ökonometrie, Cluster- und Diskriminanzanalyse.

3.2.7 Forschungsgruppe Kontinuumsmechanik

Die Arbeiten dieser Forschungsgruppe befassten sich im Berichtszeitraum mit speziellen kontinuumsmechanischen und thermodynamischen Fragestellungen, die bei konkreten Anwendungsproblemen aus Naturwissenschaften und Technik auftreten. Die Arbeitsschwerpunkte lagen dabei in den Bereichen

- Wellenausbreitung und Massenaustausch in porösen Medien,
- Mikro-Makro-Übergänge.

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*. 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.

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

4 Forschungsergebnisse und Anwendungsprojekte

4.1 Forschungsgruppe Partielle Differentialgleichungen und Variationsgleichungen

4.1.1 Zusammenfassung

Die Forschungsgruppe hat ihre im Institutsforschungsprogramm konzipierten Arbeiten zur mathematischen Modellierung naturwissenschaftlicher und technologischer Prozesse und zur Analyse der Modellgleichungen fortgesetzt. Das Spektrum der analytischen Arbeiten reicht von grundlegenden Untersuchungen zur Existenz und dem qualitativen Verhalten von Lösungen der Gleichungen über die Begründung, Implementierung und praktische Erprobung von Näherungsverfahren bis zur Installierung von Lösungsalgorithmen bei Kooperationspartnern. Schwerpunkte lagen dabei auf den Gebieten:

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

Im Berichtsjahr wurden zwei in der Gruppe entstandene Dissertationen zu analytischen Themenstellungen verteidigt:

- J. A. Griepentrog, Zur Regularität linearer elliptischer und parabolischer Randwertprobleme mit nichtglatten Daten, Humboldt-Universität zu Berlin,
- M. Siegfanz, Die eindimensionale Wellengleichung mit Hysterese, Humboldt-Universität zu Berlin.

Höhepunkt der angewandten Arbeit der Gruppe war der erfolgreiche Abschluss ihrer vom Bundesministerium für Bildung und Forschung im Rahmen des Programms „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“ geförderten Projekte:

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

Die in dreijähriger Projektarbeit unter Beteiligung der Forschungsgruppen 3 und 7 erzielten Ergebnisse, namentlich die entwickelte Software, kommen nicht nur den involvierten Industriepartnern, sondern, wie nachstehend detaillierter beschriebene Projekte zeigen, auch interdisziplinären Partnern an Universitäten und außeruniversitären Forschungsinstituten und neuen Industriepartnern zugute.

4.1.2 Projekte

Modellierung und Simulation von langwelligen SMQW-Halbleiterlasern

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

Kooperation: Bosch Telekom GmbH (Backnang), U. Troppenz, M. Möhrle (Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin (HHI))

Förderung: BMBF: „Modellierung und Simulation verspannter Quantenschichten in Halbleiterlasern“ (03-KA7FV1-4), DFG: „Komplexe nichtlineare Prozesse“

Gegenstand des Projekts ist die Modellierung und Simulation leistungsstarker, thermisch stabil arbeitender InP-basierter Halbleiterlaser für die optische Kommunikationstechnik, die im langwelligen ($1,55 \mu\text{m}$) Spektralbereich einmodig emittieren können.

Um diese Anforderungen zu erfüllen, ist ein aufwendiges Design der Laser nötig. Dieses umfasst Nanostrukturen, insbesondere mechanisch verspannte (Multi-) Quantum-Well-Strukturen als optisch aktive Zone solcher Laser, die ein gezieltes Bandstrukturdesign ermöglichen. Entsprechende Bandstrukturdetails wurden auf Basis der KPLIB berechnet, über die hier gesondert berichtet wird (siehe S. 139).

Das für den langwelligen Spektralbereich in Frage kommende InP-basierte Material verursacht insbesondere thermische Probleme, die die Brauchbarkeit der Laser einschränken. Die Erhöhung der thermischen Stabilität war daher ein Optimierungsziel, vgl. Abb. 4.

Ziel des Projekts war die Erweiterung des am WIAS für die Simulation von Halbleiterbauelementen entwickelten Programmsystems WIAS-TeSCA zur Simulation des Zusammenspiels von Ladungsträgertransport, optischer Wellenleitung sowie Wärmeproduktion und -transport im Bauelement, vgl. Abb. 1. Die Bandstrukturinformationen gehen parametrisch über Zustandsdichten ($n(F_n, T)$, $p(F_p, T)$) in Abb. 1) und die optische Responsefunktion (*gain* in Abb. 1) ein ([1, 2]). Das Zusammenspiel der entsprechenden Komponenten in WIAS-TeSCA ist in Abb. 1 dargestellt.

Ein schwieriges Problem stellt die Beschreibung des Vertikaltransports in Quantum-Well-Bauelementen dar. Unter bestimmten Bedingungen (Flachband-Fall) bietet sich dafür der vergleichsweise einfache Capture-Escape-Mechanismus an ([3]). Der Flachband-Fall ist in der Regel bei hohen Anregungsdichten im Halbleiter — insbesondere bei den Schwellendichten der in Rede stehenden Halbleiterlaser — durch die resultierende Abschirmung gegen externe Felder

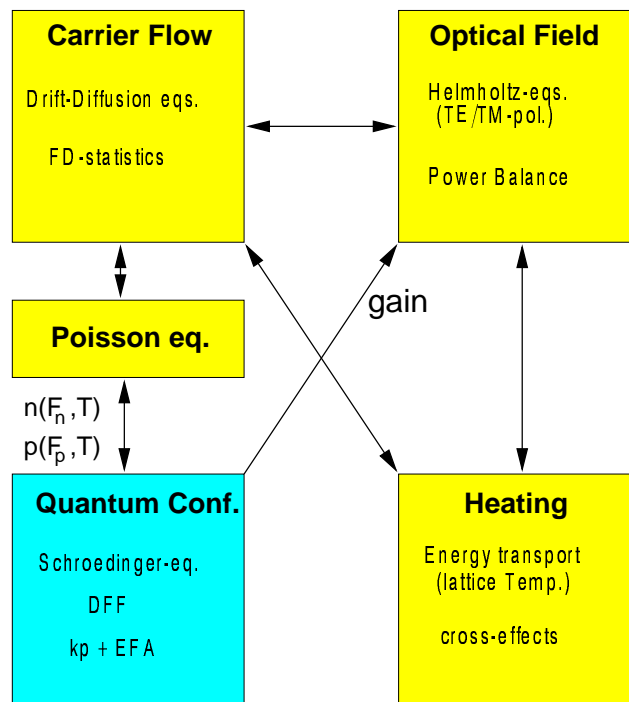


Abb. 1: Modellierungsschema. Die gelben Komponenten sind in WIAS-TeSCA selbstkonsistent umgesetzt, die Daten aus dem Quantenmodul gehen parametrisch ein.

gegeben. Quantenkinetische Grundlagen für das Capture-Escape-Modell wurden innerhalb des Projektes untersucht ([4]).

Neben den bisher untersuchten Stegwellenleiter- (Ridge Waveguide-) SMQW-Laserstrukturen (Abb. 3 und 4 rechts) wurde WIAS-TeSCA auch erfolgreich auf neue BH-SMQW-Laser (siehe Abb. 2) angewendet. Letztere erweisen sich als thermisch stabiler (siehe Abb. 4), da die Wärme auch seitlich abfließen kann. Allerdings müssen Geometrie und Dotierung optimiert sein, um Leckströme zu minimieren (siehe Abb. 3).

Die erzielten Simulationsergebnisse stimmen mit experimentellen Daten zufriedenstellend überein, was die Anwendbarkeit dieser Simulationen beim Design moderner optoelektronischer Bauelemente nachweist.

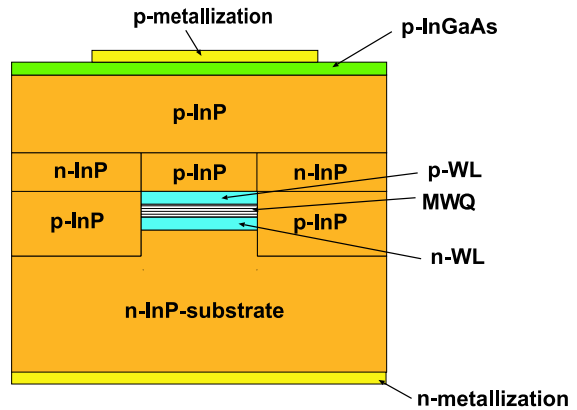


Abb. 2: Transversaler Querschnitt (schematisch) durch einen SMQW-Laser mit vergrabener (Buried Hetero-) Struktur, HHL.

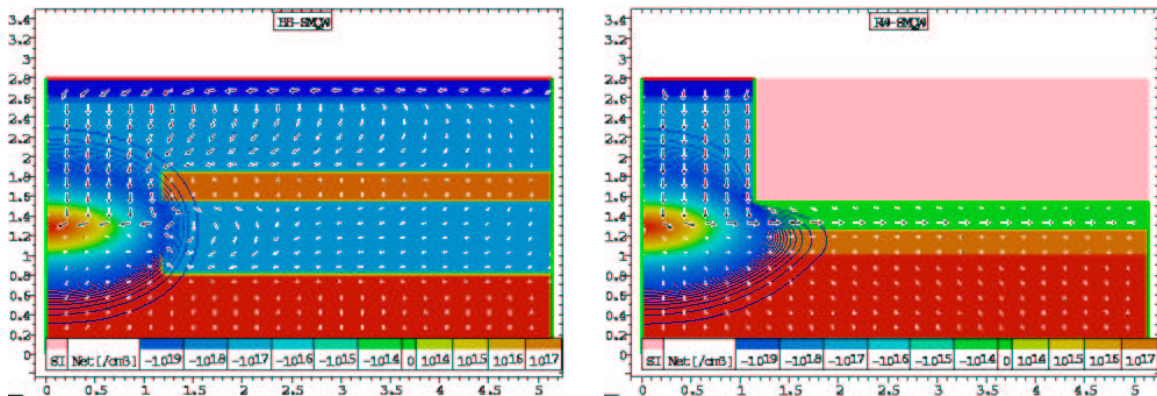


Abb. 3: Dotierungsprofil, Intensitätsverteilung der optischen Grundmode und Löcherinjektionsstrom im Querschnitt einer vergrabenen (BH) SMQW-Laserstruktur (links) und einer SMQW-Laserstruktur mit Stegwellenleiter (rechts). Aus Symmetriegründen ist nur eine Hälfte des Querschnitts dargestellt.

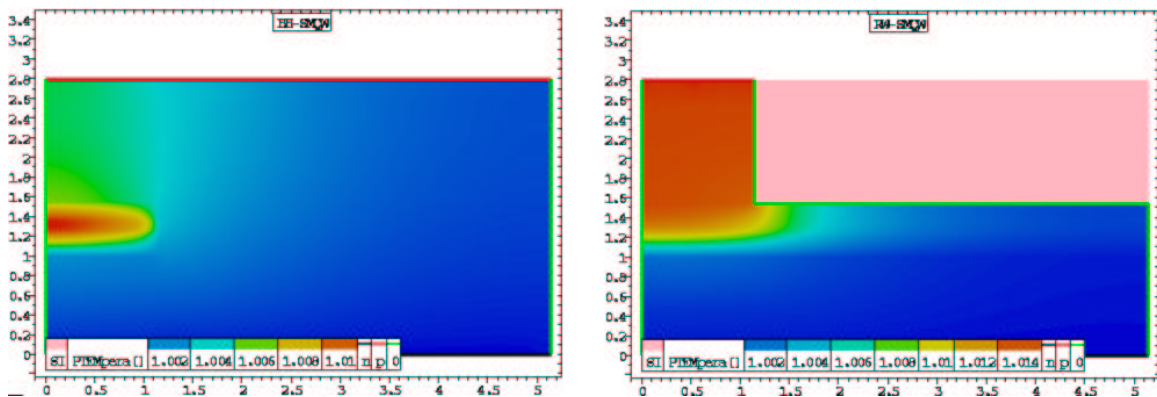


Abb. 4: Temperaturverteilung im (halben) Querschnitt von SMQW-Laserstrukturen, entsprechend Abb. 3. Die Wärmeableitung aus dem aktiven Bereich ist bei der BH-Struktur (links) günstiger, während sich die Wärme im Steg der RW-Struktur (rechts) aufstaut.

Literatur

1. U. BANDELOW, H. GAJEWSKI, H.-CHR. KAISER, *Modeling combined effects of carrier injection, photon dynamics and heating in strained multi-quantum well lasers*, in: Physics and Simulation of Optoelectronic Devices VIII (R. H. Binder, P. Blood, M. Osinski, Hrsg.), Proceedings of SPIE, **3944**, SPIE, Bellingham, WA, 2000, pp. 301–310.
2. U. BANDELOW, H.-CHR. KAISER, TH. KOPRUCKI, J. REHBERG, *Modeling and simulation of strained quantum wells in semiconductor lasers*, WIAS-Preprint No. 582, 2000, erscheint in: BMBF-Förderprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“, Springer.
3. G. A. BARRAFF, *Semiclassical description of electron transport in semiconductor quantum-well devices*, Phys. Rev. B, **55** (1997), pp. 10745–10753.
4. U. BANDELOW, *Capture-escape treatment of quantum transport*, in Vorbereitung.

Existenz von Lösungen für Paardiffusionsmodelle

Bearbeiter: A. Glitzky, R. Hünlich

Kooperation: W. Merz (Technische Universität München)

Förderung: DFG: „Zur Analysis von thermodynamischen Modellen des Stoff-, Ladungs- und Energietransports in heterogenen Halbleitern“

In diesem Jahr wurden Paardiffusionsmodelle aus der Halbleitertechnologie im Hinblick auf Existenzaussagen untersucht. Dabei konnte von den Resultaten zu Energieabschätzungen und globalen Eigenschaften der Lösungen aus [1], [2] ausgegangen werden.

Wir betrachten m Spezies X_i , von denen nur die ersten l als mobil, d. h. Drift-Diffusionsprozessen unterliegend, angenommen werden, und bezeichnen mit ψ das chemische Potential der Elektronen, $p_i(\cdot, \psi)$ sind geeignet gewählte vom Ort und von ψ abhängende Referenzdichten, die gemäß

$$p_i(x, \psi) = p_{0i}(x)e^{P_i(\psi)}, \quad P_i(\psi) = \int_0^\psi Q_i(s) ds$$

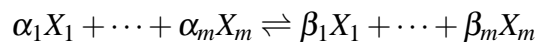
mit den Ladungszahlen $Q_i(\psi)$ zusammenhängen. Da die Teilchenzahldichten u_i der mobilen Spezies in Heterostrukturen nicht zu $H^1(\Omega)$ gehören (sie liegen lediglich im dualen Raum), werden die Gleichungen in den chemischen Aktivitäten $b_i = u_i/p_{0i}$ formuliert, die weiterhin H^1 -Größen sind. Die Modellgleichungen bestehen aus m Kontinuitätsgleichungen, die mit einer nichtlinearen Poissongleichung gekoppelt sind:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial u_i}{\partial t} + \nabla \cdot j_i + \sum_{(\alpha, \beta)} (\alpha_i - \beta_i) R_{\alpha\beta}^\Omega &= 0 \quad \text{auf } (0, \infty) \times \Omega, \\ v \cdot j_i - \sum_{(\alpha, \beta)} (\alpha_i - \beta_i) R_{\alpha\beta}^\Gamma &= 0 \quad \text{auf } (0, \infty) \times \partial\Omega, \quad i = 1, \dots, l; \\ \frac{\partial u_i}{\partial t} + \sum_{(\alpha, \beta)} (\alpha_i - \beta_i) R_{\alpha\beta}^\Omega &= 0 \quad \text{auf } (0, \infty) \times \Omega, \quad i = l+1, \dots, m; \\ -\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \psi) + e(\cdot, \psi) - \sum_{i=1}^m Q_i(\psi) u_i &= f \quad \text{auf } (0, \infty) \times \Omega, \\ v \cdot (\varepsilon \nabla \psi) &= 0 \quad \text{auf } (0, \infty) \times \partial\Omega; \\ u_i(0) &= U_i \quad \text{in } \Omega, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned} \right\} \quad (\text{P})$$

Dabei ist ε die Dielektrizität, $-e(\cdot, \psi)$ die Ladungsdichte der Elektronen und Löcher, und f ist eine fixierte Ladungsdichte. Für die mobilen Spezies (Punktdefekte und Dotand-Defekt-Paare) sind die Massenströme durch

$$j_i = -D_i(\cdot, b, \psi) p_{0i} [\nabla b_i + Q_i(\psi) b_i \nabla \psi], \quad i = 1, \dots, l,$$

gegeben. Die Kontinuitätsgleichungen enthalten Volumenquellterme, die durch reversible Reaktionen der Form



entstehen, wobei $\alpha, \beta \in \mathbb{Z}_+^m$ die Vektoren der stöchiometrischen Koeffizienten bezeichnen. Gemeint sind damit die verschiedenen Paarbildungs- bzw. Generations-Rekombinationsreaktionen. Die zugehörigen Reaktionsraten $R_{\alpha\beta}^\Omega$ lauten gemäß dem Massenwirkungsgesetz

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

Für alle immobilen Spezies X_i , $i = l + 1, \dots, m$, (Dotanden) soll eine Reaktion der Form

$$R_{\alpha\beta}^\Omega = k_{\alpha\beta}^\Omega \left[\prod_{j=1}^l a_j^{\alpha_j} - a_i^2 \right]$$

stattfinden (Generation-Rekombination verschiedener Dotand-Defekt-Paare). Zusätzlich können zwischen den mobilen Spezies noch Randreaktionen mit Reaktionsraten $R_{\alpha\beta}^\Gamma$ auftreten. Neben der bereits erwähnten ψ -Abhängigkeit lassen wir Abhängigkeiten der kinetischen Koeffizienten D_i , $k_{\alpha\beta}^\Omega$ und $k_{\alpha\beta}^\Gamma$ vom Ort und vom Zustand selbst (beschrieben durch den Vektor b der chemischen Aktivitäten) zu.

Für den Spezialfall einer homogenen, glatt berandeten Struktur und kinetischer Koeffizienten, die nur von ψ abhängen, sind Aussagen zur Lösbarkeit der Aufgabe (P) in [5] (für den Fall, dass alle Spezies als mobil angesehen werden) und in [4] (mit immobilen Spezies) zu finden.

Die allgemeinere Aufgabe mit Heterostrukturen und mit immobilen Spezies untersuchen wir in [3]. Dazu erfolgt eine zweistufige Regularisierung der Aufgabe (P) durch Probleme (P_N) und (P_M) . Für das nur in den Reaktionstermen der Kontinuitätsgleichungen regularisierte Problem (P_N) werden über energetische Abschätzungen und Moser-Iteration vom Regularisierungslevel N unabhängige a priori-Abschätzungen hergeleitet. Das Problem (P_N) wird in den Stromtermen weiter regularisiert zu einem Problem (P_M) , dessen Lösbarkeit mit einer zweistufigen Fixpunktiteration (Banach'scher Fixpunktsatz für Gleichungen der immobilen Spezies, Schauder'scher Fixpunktsatz für Gleichungen der mobilen Spezies) bewiesen wird. Anschließend erfolgen Abschätzungen für die Lösungen von (P_M) , die nicht vom Regularisierungslevel M abhängen. Mit diesem Wissen wird die Existenz von Lösungen der Probleme (P_N) und (P) nachgewiesen.

Literatur

1. R. HÜNLICH, A. GLITZKY, *On energy estimates for electro-diffusion equations arising in semiconductor technology*, in: Partial differential equations. Theory and numerical solution (W. Jäger, J. Nečas, O. John, K. Najzar, J. Stará, Hrsg.), Chapman & Hall/CRC Res. Notes Math., **406**, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL [u. a.], 2000, pp. 158–174.
2. A. GLITZKY, R. HÜNLICH, *Global properties of pair diffusion models*, WIAS-Preprint No. 587, 2000, erscheint in: Adv. Math. Sci. Appl.
3. —, *On an existence result for pair diffusion models*, in Vorbereitung.
4. W. MERZ, A. GLITZKY, *Single dopant diffusion in semiconductor technology*, Preprint SFB-438-0011, TU München, Univ. Augsburg, 2000, eingereicht.
5. W. MERZ, A. GLITZKY, R. HÜNLICH, K. PULVERER, *Strong solutions for pair diffusion models in homogeneous semiconductors*, Preprint SFB-438-9921, TU München, Univ. Augsburg, 1999, erscheint in: Nonlinear Anal.

Lösbarkeit quasilinearer Evolutionsgleichungen mit unglatten Daten in L^p **Bearbeiter:** J. A. Griepentrog, H.-Chr. Kaiser, H. Neidhardt, J. Rehberg**Förderung:** DFG: „Kopplung von van Roosbroeck- und Schrödinger-Poisson-Systemen mit Ladungsträgeraustausch“

Ziel der hier zu beschreibenden Forschungen ist die Untersuchung quasilinearer Evolutionsgleichungen der Form

$$u' + Au = Fu, \quad u(0) = u_0, \quad (1)$$

wobei $Au = -T(u) \operatorname{div}(\mu S(u) \operatorname{grad} u)$ ist und S, T ihrerseits nichtlineare Operatoren mit bestimmten Abbildungs-Eigenschaften sind, z. B. Nemytzkij-Operatoren, aber auch andere. F ist ein nichtlinearer Operator, der den Operatoren

$$A_v : u \mapsto -\operatorname{div}(\mu S(v) \operatorname{grad} u) \quad (2)$$

in gewissem Sinne untergeordnet ist, genauer, einen Interpolationsraum zwischen $\operatorname{dom}(A_v)$ und L^p in einen anderen Interpolationsraum zwischen den genannten beiden Räumen abbildet. Ferner werden die Operatoren A_v durch gemischte Randbedingungen komplettiert, was von vornherein die Glattheit von Elementen des Definitionsbereichs ausschließt. Unter diesem Konzept kann man viele Reaktions-Diffusions-Systeme, aber auch das van-Roosbroeck-System — geschrieben in den Quasi-Fermi-Niveaus und unter Eliminierung des elektrostatischen Potentials durch Lösung der nichtlinearen Poisson-Gleichung — subsummieren. Die uns hauptsächlich interessierende Frage ist die nach der zeitlich lokalen Existenz der Lösung in einem L^p -Raum (globale Existenz ist i. Allg. nicht zu erwarten). Der Wunsch, lokale Lösungen in L^p (und nicht in einem negativ indizierten Sobolevraum) zu erhalten, motiviert sich daraus, für die Lösung u die Normalenkomponente der zugehörigen Flussdichte j als mathematisch wohldefiniertes Objekt (über den Gauß'schen Satz) in die Hand bekommen zu wollen. Letzteres ist schon deswegen erstrebenswert, weil viele der zu betrachtenden Gleichungen in Wahrheit Bilanzgleichungen sind, in deren originärer Formulierung ebendiese Flüsse über den Rand vorkommen. Ein weiterer Grund, sich genau für die Normalenkomponente des Flusses zu interessieren, ist der folgende: Modelliert man das Gesamtsystem in zwei Subsystemen durch unterschiedliche Modelle, so ist die Normalenkomponente des Flusses ein Kandidat für eine physikalische Größe, welche zwischen beiden Modellierungen eine adäquate Kopplung herstellt, in dem Sinne, dass sich beide Größen an der gedachten Modellierungsgrenze stetig treffen sollten. Gedacht wird hier in erster Linie an eine Modellierung eines Halbleiters mit Nanosubstrukturen, die, einschließlich einer gewissen Umgebung, durch ein quantenmechanisches Modell beschrieben werden sollen, während der übrige Teil vermöge des van-Roosbroeck-Systems charakterisiert werden soll, vgl. [10].

Der analytischen Struktur der Operatoren A, A_v und F entsprechend, bietet es sich an, die Gleichung (1) in einem Kontext anzuschauen, den Amann in [3] bereitgestellt hat, oder aber, ausgehend von Resultaten von Aquistapace/Terreni ([1], [2]), ein ähnliches, aber etwas allgemeineres Iterationsschema zu entwickeln, welches über einen Fixpunktsatz lokale Existenz und Einzigkeit sicherstellen könnte. Es erweist sich, dass dies ein umfangreiches Programm ist, welches u. a. Antworten auf folgende Probleme erfordert:

1. Da man prinzipiell nicht über eine analytische Charakterisierung von $\operatorname{dom}(A_v)$ (und demnach auch über keine Interpolationsräume zwischen $\operatorname{dom}(A_v)$ und L^p) verfügt, beweise man geeignete

Einbettungen dieser Interpolationsräume, welche dann die geforderten Abbildungseigenschaften des Operators F in dem gegebenen Kontext sicherstellen.

2. Beweis der Erzeuger-Eigenschaft für analytische Halbgruppen durch A_ν inklusive in ν lokal uniformer Resolventenabschätzungen.
3. Stetigkeit der Abbildung $\nu \mapsto A_\nu$ in geeigneten Operator-Topologien.

Geleistet ist bisher Folgendes:

Betreffend 1. stellt es sich heraus, dass es sehr hilfreich ist, eine Interpolationstheorie für die Räume von Bessel-Potentialen $H_\Gamma^{s,p}(\Omega)$ ($s \in [0, 1], p \in]1, \infty[$) sowie deren Dualen zur Verfügung zu haben; der Index Γ kennzeichnet den $H^{s,p}$ -Abschluss derjenigen C^∞ -Funktionen auf Ω , welche auf $\Gamma \subset \partial\Omega$ verschwinden. Es stellt sich durch Konstruktion geeigneter Retraktions/Koretraktionsabbildungen heraus (vgl. [4]), dass im Fall von Lipschitz-Gebieten Ω und regulären Randstücken Γ dieselben Interpolationsresultate gelten wie im Fall der Einheitskugel und $\Gamma = \partial\Omega$ (siehe [4] und [11]).

Zum Problem 2 wurde eine umfangreiche Arbeit ([5]) verfasst, die, ausgehend von Resultaten von Griepentrog/Recke ([6], [7]), die gewünschten Resolventenabschätzungen für sehr allgemeine elliptische Operatoren zweiter Ordnung mit gemischten Randbedingungen und unglatten Koeffizienten — in Abhängigkeit von den Daten des Problems — beweist. Darüber hinaus wurden verschiedene spektraltheoretische Resultate für solche Operatoren bewiesen sowie die Tatsache, dass semilineare Probleme mit einem Hauptteil wie oben beschrieben Lösungen besitzen, welche in Raum und Zeit Hölder-stetig sind.

Problem 3 wird in [8] für den räumlich zweidimensionalen Fall behandelt. Im 3D-Fall wird man nicht umhinkönnen, die geometrische Vielfalt von Ω und Γ stärker einzuschränken und auch an die Koeffizientenfunktion μ stärkere Anforderungen als nur L^∞ und von Null abgehoben zu stellen, um zufriedenstellende Aussagen beweisen zu können. Dies wird weiteren Forschungen vorbehalten bleiben.

Hinsichtlich des — für viele Halbleiterstrukturen sehr relevanten — 2D-Falles rechnen die Autoren damit, Existenz, Einzigkeit und a priori-Abschätzungen für (1) in [9] beweisen zu können.

Literatur

1. P. ACQUISTAPACE, B. TERRENI, *Maximal space regularity for abstract linear non-autonomous parabolic equations*, J. Funct. Anal., **60** (1985), pp. 168–210.
2. —, *On the abstract nonautonomous parabolic Cauchy problem in the case of constant domains*, Ann. Mat. Pura Appl. (4), **140** (1985), pp. 1–55.
3. H. AMANN, *Dynamic theory of quasilinear parabolic equations — I. Abstract evolution equations*, Nonlinear Anal., **12** (1988), pp. 895–919.
4. J. A. GRIEPENTROG, K. GRÖGER, H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, *Interpolation for function spaces related to mixed boundary value problems*, erscheint in: Math. Nachr.
5. J. A. GRIEPENTROG, H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, *Resolvent and heat kernel properties for second order elliptic differential operators with general boundary conditions in L^p* , Adv. Math. Sci. Appl., **11** (2001), No. 1, pp. 87–112.
6. J. A. GRIEPENTROG, *Linear elliptic boundary value problems with non-smooth data: Campanato spaces of functionals*, eingereicht.

7. J. A. GRIEPENTROG, L. RECKE, *Linear elliptic boundary value problems with non-smooth data: Normal solvability on Sobolev-Campanato spaces*, erscheint in: Math. Nachr.
8. H.-CHR. KAISER, H. NEIDHARDT, J. REHBERG, *Quasilinear parabolic systems admit classical solutions in L^p : The 2d case*, in Vorbereitung.
9. —, *Van Roosbroeck's equations admit classical solutions in L^p : The 2d case*, in Vorbereitung.
10. H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, *About some mathematical questions concerning the embedding of Schrödinger-Poisson systems into the drift-diffusion model of semiconductor devices*, in: EQUADIFF 99 — Proceedings of the International Conference on Differential Equations, Berlin 1999 (B. Fiedler, K. Gröger, J. Sprekels, Hrsg.), **2**, World Scientific, Singapore [u. a.], 2000, pp. 1328–1333.
11. H. TRIEBEL, *Interpolation Theory, Function Spaces, Differential Operators*, North Holland, Amsterdam, 1978.

Optimierung der Oberflächenhärtung mit Laser- und Elektronenstrahl

Bearbeiter: D. Hömberg, W. Weiss

Kooperation: LASERVORM Volumen- und Oberflächenbearbeitung (Mittweida), pro-beam HÖRMANN GmbH (Neukirchen), H.-J. Spies (TU Bergakademie Freiberg), S. Volkwein (Karl-Franzens-Universität Graz, Österreich)

Förderung: Stiftung Industrieforschung

Ziel des Projektes ist die Entwicklung und Implementierung eines numerischen Verfahrens zur Berechnung von Temperaturfeldern beim Strahlhärten (Elektronenstrahl, Laser) in Bauteilen beliebiger Geometrie. Die auf dieser Grundlage angestrebten Vorhersagen der Eigenschaftsverteilung erfordern die Einbeziehung des werkstoffspezifischen Umwandlungsverhaltens bei der Schnellerwärmung und Schnellabschreckung.

Arbeitsschwerpunkte im ersten Projektjahr lagen in den folgenden Bereichen:

- Modellierung

Hier ging es insbesondere um die Beschreibung des Einkopplungsverhaltens des Laserstrahls sowie um die Anpassung des vorhandenen Metallurgiemoduls. Das zugrunde liegende mathematische Modell zur Beschreibung des Umwandlungsverhaltens von Stahl wird in [1] beschrieben.

- Experimentelle Untersuchungen zum Härtungsverhalten verschiedener Stähle

In Kooperation mit den Pilotunternehmen wurden an ausgewählten Standardgeometrien Härtungsexperimente durchgeführt. Von den Härtespuren wurden Längs- und Querschliffe erzeugt und ausgemessen zur Eichung des Metallurgiemoduls.

- Softwareentwicklung

Schwerpunkte in diesem Bereich waren die Anpassung des Metallurgiemoduls an die experimentell gewonnenen Daten, die Implementierung einer neuen nichtlinearen Randbedingung zur Beschreibung des Einkopplungsverhaltens des Lasers sowie erste Arbeiten an einer Java-Nutzeroberfläche.

- Optimierung

In Kooperation mit Dr. S. Volkwein, TU Graz, wurden POD-Verfahren zur Berechnung suboptimaler Parameter für zweidimensionale Problemstellungen untersucht ([2]).

Erste Simulationsrechnungen wurden für einen 2-kW-Diodenlaser durchgeführt (vgl. Abb. 1). Abbildung 2 zeigt zwei Simulationen des Profils einer Laserhärtung für eine Geometrie ohne und mit Bohrung. Deutlich zu erkennen ist die Zunahme der Einhärtetiefe über der Bohrung und am Probenende. Abbildung 3 zeigt den Längsschliff einer realen Härtespur (A. Buchwalder, Bergakademie Freiberg).

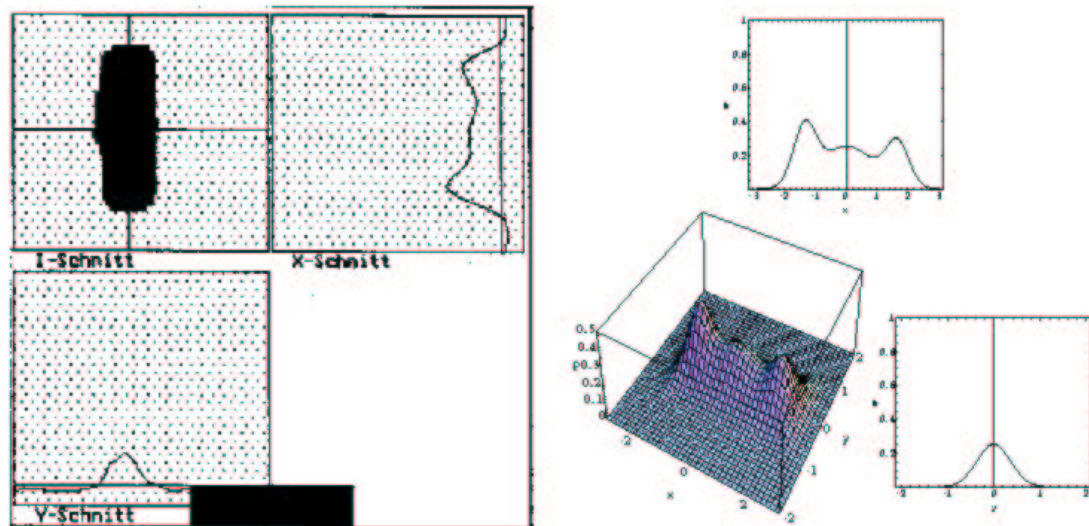


Abb. 1: Gemessener und simulierter Strahlungsfluss.

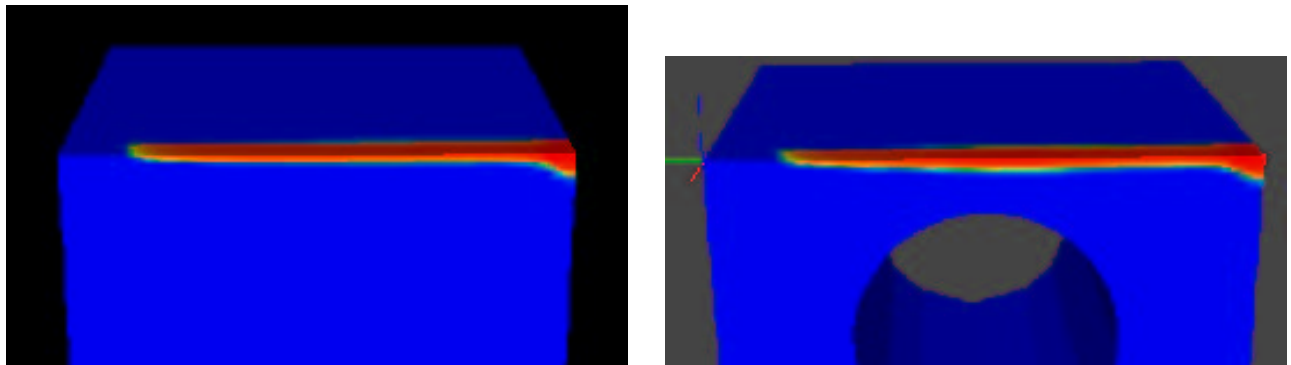


Abb. 2: Einfluss der Geometrie auf das Härteprofil.



Abb. 3: Längsschliff (Versuch mit Bohrung parallel zur Oberfläche (2 mm tief), C100).

Literatur

1. D. HÖMBERG, T. STRECKENBACH, W. WEISS, *Phase transitions in steel — Mathematical models and applications*, in Vorbereitung.
2. D. HÖMBERG, S. VOLKWEIN, *Suboptimal control of laser surface hardening using proper orthogonal decomposition*, WIAS-Preprint No. 639, 2001.

Modellierung und Simulation von hochsperrenden Bauelementen für Schaltkreise der angesteuerten Leistungselektronik

Bearbeiter: R. Hünlich, W. Röpke, H. Gajewski, G. Albinus, H. Stephan

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

Förderung: BMBF: „Modellierung und Simulation von hochsperrenden Bauelementen für Schaltkreise der angesteuerten Leistungselektronik“ (03-HU7FV1-0), DFG: „Halbleiterbauelemente hoher Leistung“

In diesem inzwischen abgeschlossenen Projekt wurde der Bauelementesimulator *WIAS-TeSCA* ([2]) durch die Einbeziehung einer Wärmeleitungsgleichung erweitert, um Anwendungsfälle aus der Mikro-, Nano- oder Optoelektronik behandeln zu können, bei denen thermische und thermoelektrische Effekte eine Rolle spielen. Speziell ging es hier um Anwendungen auf Halbleiterbauelemente der Leistungselektronik. Industrieller Partner war die Firma *alpha microelectronics gmbh* Frankfurt (Oder). Die in den Smart-Power-Schaltkreisen der Partnerfirma auftretenden Leistungstransistoren (z. B. HV-DMOS-Transistoren in TDI-Substraten mit einer Spannungsfestigkeit von mehreren 100 V, siehe [4]) sind gut geeignete Testobjekte für diesen Anwendungsfall. Abbildung 1 zeigt den Querschnitt eines solchen Transistors.

Im Einzelnen wurden Arbeiten zu folgenden Punkten durchgeführt:

- Untersuchungen zur physikalischen und mathematischen Modellierung,
- Implementierung der Wärmeleitungsgleichung in das Programmsystem,
- Test an einfachen Strukturen,
- Erarbeitung von Aussagen zur Gültigkeit und Verbesserung der Modelle,
- Berechnung von Kennlinien für verschiedene Bauelemente der Partnerfirma, Vergleich mit experimentellen Daten,
- Aussagen zum Durchbruchverhalten der Bauelemente,
- Aussagen zur Auswirkung thermischer und thermoelektrischer Effekte.

Die Bearbeitung dieser Aufgaben erstreckte sich mit unterschiedlicher Wichtung über die dreijährige Laufzeit des Projekts, wobei aktuelle Fragestellungen der Partnerfirma vorrangig behandelt worden sind. Die Weiterentwicklung von *WIAS-TeSCA* basiert auf einem thermodynamischen Energiemodell (siehe [1]), das Boltzmann- oder Fermi-Dirac-Statistik, nichtparabolische Bandstrukturen, die Elektronen-Löcher-Streuung, die Kinetik tiefer Störstellen, Ladungsträgertemperaturen sowie die selbstkonsistente Einbindung der nichtlokalen elektrostatischen Wechselwirkung umfasst. Eine zusammenfassende Darstellung der Ergebnisse des Projekts findet sich in [3]. Dort sowie im internen Forschungsbericht ([5]) wird auch gezeigt, wie Simulationen mit *WIAS-TeSCA* die Entwicklungsarbeiten der Firma erfolgreich unterstützt haben.

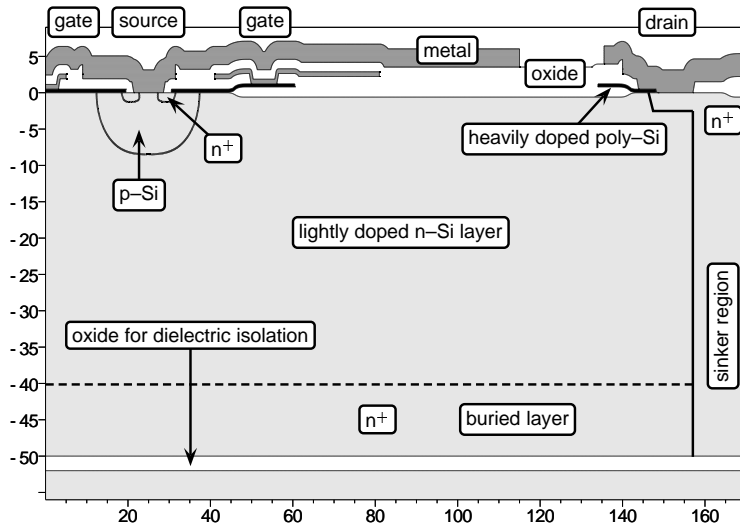


Abb. 1: Querschnitt eines axialsymmetrischen HV-DMOS-Transistors mit zwei Kanalringen in einem TDI-Substrat (die Längeneinheit ist μm , die Rotationsachse liegt auf der linken Seite).

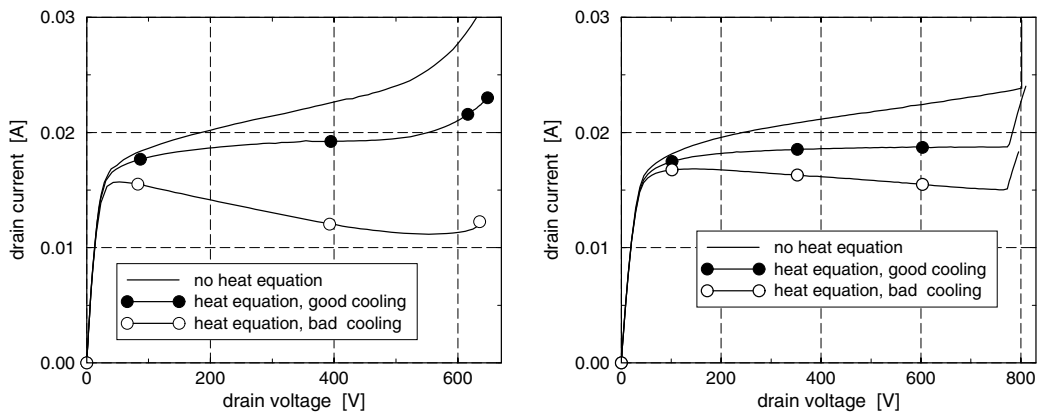


Abb. 2: Kennlinien für einen Transistor wie in Abb. 1 in zwei verschiedenen Substraten (links mit, rechts ohne begrabene Schicht) bei einer Gate-Spannung von 10 V.

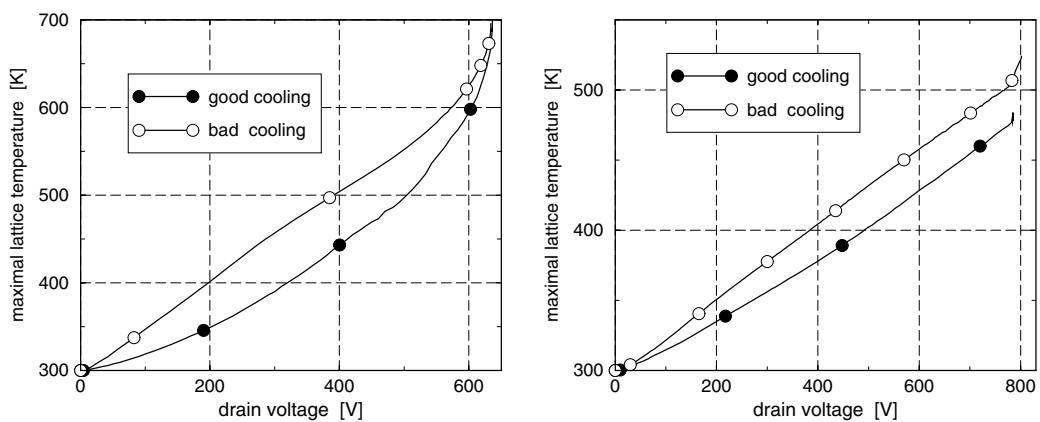


Abb. 3: Maximale Gittertemperatur für einen Transistor wie in Abb. 1 in zwei verschiedenen Substraten (links mit, rechts ohne begrabene Schicht) bei einer Gate-Spannung von 10 V.

Im Berichtszeitraum wurden abschließende Untersuchungen zur Auswirkung der thermischen und thermoelektrischen Effekte vorgenommen. Die Abbildungen 2, 3 bringen Simulationsergebnisse, die insbesondere zeigen, welchen Einfluss die Wahl der thermischen Randbedingungen hat. In dem als *gute Kühlung* bezeichneten Fall wurde an allen elektrischen Kontakten und an der elektrisch isolierten Rückseite der Siliziumscheibe (genauer gesagt, in einer Tiefe von $100\ \mu\text{m}$) eine Temperatur von 300 K vorgegeben, an den sonstigen Rändern sollten homogene Neumannbedingungen gelten. Bei *schlechter Kühlung* haben wir angenommen, dass der Wärmewiderstand an den elektrischen Kontakten sehr groß ist. In diesem Fall tritt das Phänomen einer negativen differentiellen Leitfähigkeit auf.

Literatur

1. G. ALBINUS, H. GAJEWSKI, R. HÜNLICH, *Thermodynamic design of energy models of semiconductor devices*, WIAS-Preprint No. 573, 2000, eingereicht.
2. H. GAJEWSKI, *Analysis und Numerik von Ladungstransport in Halbleitern*, GAMM-Mitteilungen, **16** (1993), pp. 35–57.
3. R. HÜNLICH, G. ALBINUS, H. GAJEWSKI, A. GLITZKY, W. RÖPKE, J. KNOPKE, *Modelling and simulation of power devices for high-voltage integrated circuits*, WIAS-Preprint No. 578, 2000, eingereicht.
4. J. KNOPKE, *DIMOST. Features & devices*, Firmenschrift, alpha microelectronics gmbh Frankfurt (Oder), 2000.
5. W. RÖPKE, R. HÜNLICH, H. GAJEWSKI, *Simulation von Leistungstransistoren mit WIAS-TeSCA*, interner Forschungsbericht, WIAS, Berlin, 2000.

Mathematische Modellierung von Hysteresephänomenen

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

Kooperation: J. Franců (Technische Universität Brno, Tschechische Republik), K. Kuhnen (Universität des Saarlandes, Saarbrücken), Ph. Laurençot (CNRS & Universität Nancy/Universität Toulouse, Frankreich), A. Vladimirov (Institut für Informationsübertragung Moskau, Russland)

Die Theorie der Hystereseoperatoren stellt einen erfolgreichen Zugang dar zu der Modellierung der Hysteresephänomene in der Elastoplastizität, Piezoelektrizität, Phasenumwandlungen oder im Ferromagnetismus. Dieses Forschungsgebiet entwickelt sich aktiv sowohl in der theoretischen Richtung wie in Anwendungen. Typischerweise beziehen sich Hystereseoperatoren, die in der Praxis am häufigsten verwendet werden, direkt oder indirekt auf die Variationsungleichung

$$\begin{cases} x(t) \in Z, x(0) = x^0 \in Z, \\ u(t) = x(t) + \xi(t), \\ \langle \dot{\xi}(t), x(t) - y \rangle \geq 0 \quad \forall y \in Z \end{cases} \quad (1)$$

im entsprechenden Sinn mit einer gegebenen Funktion $u : [0, T] \rightarrow X$, wobei X ein Hilbertraum mit Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$ und Z eine konvexe abgeschlossene Menge sind und $\dot{\xi}$ die Ableitung der gesuchten Funktion ξ nach t bezeichnet. Wenn u absolutstetig ist, hat die Variationsungleichung (1) eine eindeutige absolutstetige Lösung und ist fast überall erfüllt. Der Lösungsoperator $(u, x^0) \mapsto \xi$ heißt dann *Play mit Charakteristik Z* . Ist das Innere von Z nicht leer, kann der Play-Operator auf den ganzen Raum der stetigen Funktionen erweitert werden.

a) Im Rahmen des Projektes wurden weitere Eigenschaften des Play-Operators untersucht. Die Arbeit [4] zeigt, dass die $W^{2,\infty}$ -Regularität des Randes ∂Z nicht nur hinreichend für die Lipschitz-Stetigkeit des Play-Operators in $W^{1,1}$ ist, sondern auch notwendig. In [10] wird der Play-Operator stetig auf den Raum der Regelfunktionen (d. h. Funktionen, die in jedem Punkt beide einseitige Grenzwerte besitzen) erweitert. Dabei muss die Variationsungleichung (1) mit Hilfe des Young-Integrals in der Form umgeschrieben werden

$$\int_0^t \langle x(\tau+) - y(\tau), d\xi(\tau) \rangle \geq 0 \quad (2)$$

für jedes $t \in [0, T]$ und jede Regelfunktion $y : [0, T] \rightarrow Z$. Im skalaren Fall ist es in [9] gelungen, den Play-Operator sogar stetig auf den Raum L^∞ zu erweitern. Dabei wird die Variationsungleichung (1) durch das Prinzip der minimalen Variation ersetzt.

Die Variationsungleichung (1) kann, auch wenn Z ein Polyeder ist, als ein Spezialfall des Skorokhod-Problems aus der Theorie der Warteschlangen interpretiert werden. Hinreichende Bedingungen für die Lipschitz-Stetigkeit des Skorokhod-Operators im Raum der stetigen und absolutstetigen Funktionen wurden in [6] als geometrische Bedingungen zwischen den Normalenvektoren und Reflexionsvektoren formuliert. Diese Bedingungen sind automatisch erfüllt, wenn die Normalen- und Reflexionsvektoren identisch sind, und in diesem Fall ist das Skorokhod-Problem äquivalent der Variationsungleichung (1).

b) Als Anwendung der Hystereseoperatoren zur Beschreibung zeitabhängiger Prozesse im Ferromagnetismus wurde das asymptotische Verhalten der Lösung einer Differentialgleichung zweiter

Ordnung mit einem Preisach-Operator in den Arbeiten [2, 3] als Modell für einen Schwingungskreis mit ferromagnetischer Induktanz untersucht. Das Ergebnis besteht in einer expliziten Gleichgewichtsbedingung zwischen der Energiezufuhr und der Hysterese-Energiedissipation, die eine unbeschränkte Resonanz verhindert.

Zusammen mit Ingenieuren der Universität des Saarlandes in Saarbrücken wurde das Problem der Echtzeitsteuerung eines magnetostriktiven oder piezoelektrischen Aktors als das mathematische Problem der Invertierbarkeit der Kombination eines Prandtl-Ishlinskii-Operators mit einem Kriechoperator umformuliert. Der Beweis der Lipschitz-Stetigkeit des Inversen Operators wurde in [7] zur Formulierung eines konvergenten numerischen Verfahrens ausgenutzt.

Ein thermodynamisch konsistentes Modell für die temperaturabhängige magnetische Nachwirkung wurde in [8] als eine Erweiterung des Preisach-Modells der ferromagnetischen Hysterese vorgeschlagen. Die Korrektheit des Modells wurde im ganzen Temperaturbereich bewiesen.

c) Der dritte untersuchte Themenkreis hängt mit der Modellierung der Elastoplastizität und Thermoelastoplastizität zusammen. Die Arbeit [1] fasst bisherige Ergebnisse der Autoren über die Modellierung der Thermoelastoplastizität mit Hilfe von temperaturabhängigen Prandtl-Ishlinskii-Hystereseoperatoren zusammen. Impuls- und Energiebilanz haben im eindimensionalen Fall die Form

$$\begin{aligned}\rho u_{tt} &= \sigma_x + f(\theta, x, t), \\ (c_V \theta + \mathcal{V}[u_x, \theta])_t - \kappa \theta_{xx} &= \sigma u_{xt} + g(\theta, x, t), \\ \sigma &= \mathcal{P}[u_x, \theta] + \mu u_{xt} - \beta \theta,\end{aligned}\tag{3}$$

wobei u die Verschiebung, σ die Spannung, θ die absolute Temperatur, f die äußere Kraft, g die Wärmequelle, \mathcal{P} der temperaturabhängige Prandtl-Ishlinskii-konstitutive Operator zur Modellierung eines thermoelastoplastischen Materialgesetzes, \mathcal{V} das Prandtl-Ishlinskii-Hysteresepotential ist und c_V , κ , μ , β positive Konstanten sind. Existenz, Eindeutigkeit und asymptotisches Verhalten der Lösung gehören zu den wichtigsten Ergebnissen in diesem Fall.

Weitere Ergebnisse wurden im temperaturunabhängigen Fall ohne Viskosität erzielt. Für die entsprechende Gleichung

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

mit verschiedenen Randbedingungen wurde in [11] ein konvergentes numerisches Schema zur Approximation der starken Lösung der Anfangsrandwertaufgabe zusammen mit effizienten Fehlerabschätzungen entwickelt.

Die Arbeit [5] ist dem Homogenisierungsproblem für eine Gleichung vom Typ (4) gewidmet, die als ein Modell für einen oszillierenden nichthomogenen elastisch-plastischen Stab interpretiert werden kann. Das Materialgesetz hat die Form eines raumabhängigen Prandtl-Ishlinskii-Operators $\mathcal{P}[x, u_x]$, und die Massendichte ρ hängt auch von x ab.

Literatur

1. P. KREJČÍ, J. SPREKELS, *A thermodynamically consistent hysteresis model of thermovisco-elastoplasticity*, in: Anniversary Volume for Krzysztof Wilmański, WIAS-Report No. 18, 2000, pp. 138–145.
2. P. KREJČÍ, *Forced oscillations in Preisach systems*, Phys. B, **275** (2000), pp. 81–86.
3. —, *Resonance in Preisach systems*, Appl. Math., **45** (2000), No. 6, pp. 439–468.

4. —, *A remark on the local Lipschitz continuity of vector hysteresis operators*, Appl. Math., im Druck.
5. J. FRANČŮ, P. KREJČÍ, *Homogenization of scalar wave equation with hysteresis operator*, in: EQUADIFF 99 — Proceedings of the International Conference on Differential Equations, Berlin 1999 (B. Fiedler, K. Gröger, J. Sprekels, Hrsg.), **2**, World Scientific, Singapore [u. a.], 2000, pp. 363–368.
6. P. KREJČÍ, A. A. VLADIMIROV, *Lipschitz continuity of polyhedral Skorokhod maps*, WIAS-Preprint No. 566, 2000, eingereicht.
7. P. KREJČÍ, K. KUHNEN, *Inverse control of systems with hysteresis and creep*, eingereicht.
8. P. KREJČÍ, *A model for a Preisach-type aftereffect*, eingereicht.
9. P. KREJČÍ, P. LAURENÇOT, *Hysteresis filtering in the space of bounded measurable functions*, WIAS-Preprint No. 608, 2000, eingereicht.
10. —, *Generalized variational inequalities*, in Vorbereitung.
11. M. SIEGFANZ, *Die eindimensionale Wellengleichung mit Hysterese*, Dissertation, Humboldt-Universität zu Berlin, 2000.

Existenz und Optimierung nichtglatter mechanischer Strukturen

Bearbeiter: J. Sprekels, D. Tiba

Kooperation: A. Ignat (Universität Iași, Rumänien)

Ziel der Forschungen ist es, die elastische Deformation gekrümmter mechanischer Strukturen unter möglichst geringen Glattheitsanforderungen zu bestimmen. Dazu wurden im Berichtszeitraum Bögen, gekrümmte Stäbe und spezielle Schalenmodelle untersucht. Weitere Resultate zu Platten und Variationsungleichungen finden sich in [9] und [10].

a) Bögen.

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

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

Die Unbekannten v_1, v_2 stellen dabei die tangentielle bzw. normale Verschiebung des Bogens dar.

Damit (1) sinnvoll ist, wurde bisher in der Literatur (vgl. z. B. [1], [2]) $c \in W^{1, \infty}(0, 1)$, d. h. $\varphi \in (W^{3, \infty}(0, 1))^2$, vorausgesetzt, wodurch praktisch relevante Fälle wie z. B. gothische Bögen ausgeschlossen sind. Zur Überwindung dieser Einschränkung wurde eine neue variationelle Formulierung hergeleitet, die auf Methoden der optimalen Steuerung beruht und auch für den Fall $\varphi \in (W^{1, \infty}(0, 1))^2$ gültig ist.

Seien dazu $g_1 := \varepsilon l$ und g_2 die eindeutige Lösung von $-g_2'' = h$ in $(0, 1)$, $g_2(0) = g_2(1) = 0$, wobei sich l und h aus der Anfangswertaufgabe

$$-l' - ch = f_1, \quad cl - h' = f_2 \text{ in } (0, 1), \quad l(0) = h(0) = 0$$

bestimmen. Wir betrachten dann das unrestringierte Steuerungsproblem:

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

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

unter der Zustandsgleichung

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

und der Endbedingung

$$v_1(1) = v_2(1) = 0.$$

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

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

Ferner ergibt sich Folgendes: Schreibt man die notwendigen Optimalitätsbedingungen für **(P)** (oder für das duale Problem) in Form des Pontryagin'schen Maximum-Prinzips, so erhält man eine spezielle *Dekomposition* von (1) in ein System von Differentialgleichungen erster Ordnung mit Zweipunkt-Randbedingungen. In dieser Hinsicht stellt der neue Ansatz eine Fortsetzung der von Sprekels und Tiba (vgl. [5, 6, 7]) entwickelten Ideen für Platten und Stäbe dar.

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

Die theoretischen Resultate und die Ergebnisse umfangreicher numerischer Tests sind in [3] und [8] dokumentiert.

b) Gekrümmte Stäbe.

Als weitere Aufgabenstellung wurde im Berichtszeitraum die elastische Deformation dreidimensionaler gekrümmter Stäbe, die eine nichtkonstante Dicke und möglicherweise mehrfach zusammenhängende Querschnitte besitzen, untersucht. Dabei wurde die geometrische Annahme gemacht, dass transversale Schnitte nach Deformation eben bleiben (Scherung und Torsion der Schnitte sind möglich).

Ziel der Untersuchung war wiederum, mit möglichst geringen Glattheitsvoraussetzungen auszukommen. Es gelang dabei, eine weitgehende Theorie für den Fall herzuleiten, dass die Kurve der Schwerpunkte des Stabes eine Parametrisierung $\varphi \in (W^{2,\infty})^3$ besitzt. Man erhält dabei eine variationelle Formulierung mit einer Bilinearform, die einer Randwertaufgabe für ein lineares System von neun gewöhnlichen Differentialgleichungen entspricht.

Die Glattheitsbedingung $\varphi \in (W^{2,\infty})^3$ ist schwächer als die in der Literatur üblichen und erlaubt es insbesondere, wichtige neue Optimierungsaufgaben für gekrümmte Stäbe mit Zustandsrestriktionen zu erfassen, die mit der bisherigen Theorie nicht behandelt werden konnten. Entscheidend für diese Fortschritte war dabei die Idee, anstelle des klassischen Frenet'schen andere lokale Koordinatensysteme zur geometrischen Beschreibung der Stäbe zu verwenden. Diese neuen lokalen Koordinatensysteme erwiesen sich auch bei der numerischen Lösung des Problems als sehr vorteilhaft.

Die theoretischen Resultate und die Ergebnisse umfangreicher numerischer Tests sind in der Arbeit [4] dokumentiert.

c) Schalen.

Ziel der Untersuchungen ist es, die für gekrümmte Bögen und Stäbe erzielten Resultate auf allgemeine Schalenmodelle auszudehnen. Als erste Problemklasse wurde dabei im Berichtszeitraum eine verallgemeinerte Version des *Naghdi-Modells* hergeleitet und für die entsprechenden Modellgleichungen (ein variationelles System, das einer linearen Randwertaufgabe für ein System von sechs linearen partiellen Differentialgleichungen entspricht) Existenz und Eindeutigkeit bewiesen.

Die aus der Literatur bekannten Glattheitsvoraussetzungen, nämlich dass die Mittelfläche der

Schale oder die Kurve der Schwerpunkte zu C^3 gehören müssen, konnten wiederum erheblich abgeschwächt werden: Es gelang der Nachweis, dass stückweise C^2 -Glattheit genügt.

Die entsprechenden theoretischen Resultate sind in der Arbeit [11] zusammengefasst.

Literatur

1. D. CHENAIS, J.-C. PAUMIER, *On the locking phenomenon for a class of elliptic problems*, Numer. Math., **67** (1994), pp. 427–440.
2. PH. CIARLET, *The Finite Element Method for Elliptic Problems*, North-Holland, Amsterdam, 1978.
3. A. IGNAT, J. SPREKELS, D. TIBA, *Analysis and optimization of nonsmooth arches*, erscheint in: SIAM J. Control Optim.
4. —, *A model of a general elastic curved rod*, WIAS-Preprint No. 613, 2000, eingereicht.
5. J. SPREKELS, D. TIBA, *A duality-type method for the design of beams*, Adv. Math. Sci. Appl., **9** (1999), pp. 89–102.
6. —, *On the approximation and optimization of fourth order elliptic problems*, in: Optimal control of partial differential equations (K.-H. Hoffmann et al., Hrsg.), Internat. Ser. Numer. Math., **133**, Birkhäuser, Basel, 1999, pp. 277–286.
7. —, *A duality approach in the optimization of beams and plates*, SIAM J. Control Optim., **37** (1998/99), pp. 486–501.
8. —, *Sur les arches lipschitziennes*, C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math., **331** (2000), pp. 179–184.
9. —, *Control variational methods for differential equations*, WIAS-Preprint No. 610, 2000, eingereicht.
10. —, *Optimization of clamped plates with discontinuous thickness*, in Vorbereitung.
11. —, *An analytic approach to generalized Naghdi shell models*, in Vorbereitung.

4.2 Forschungsgruppe Dynamische Systeme

4.2.1 Zusammenfassung

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

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

Im Berichtszeitraum konnten wesentliche Beiträge auf den genannten Gebieten erzielt werden (siehe Publikationsliste). Wegen der geringen Größe der Forschungsgruppe gelang dies nur durch Drittmittelmitarbeiter und durch eine enge interdisziplinäre nationale und internationale Kooperation. Dabei spielt das Seminar „Halbleiterlaser“, das in Zusammenarbeit mit der Humboldt-Universität und dem Heinrich-Hertz-Institut veranstaltet wird, eine besondere Rolle. Die durchgeführten Arbeiten wurden z. T. durch DFG, DAAD und ein EU-Projekt gefördert.

4.2.2 Projekte

Dynamik von Halbleiterlasern

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

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

Moderne optoelektronische Bauelemente, wie z. B. Mehrsektionslaser, Laser mit Rückkopplung oder periodischer Modulation, zeigen oft ein kompliziertes raum-zeitliches dynamisches Verhalten. Die Untersuchung von solchen nichtlinearen Effekten macht die Verwendung und Weiterentwicklung von Methoden der nichtlinearen Dynamik sowie die Entwicklung von speziellen numerischen Verfahren notwendig. Das bearbeitete Spektrum von Aufgabenstellungen reicht von der problemangepassten Modellierung über grundlegende analytische Eigenschaften der entsprechenden Modelle bis zur Entwicklung und Optimierung konkreter Bauelemente zur optischen Datenverarbeitung (hochfrequente Pulsationen und Schalteffekte, Signalregeneration) in Zusammenarbeit mit den Kooperationspartnern. Diese Technologie der rein optischen Datenverarbeitung soll in zukünftigen Datennetzen wesentlich höhere Übertragungsraten ermöglichen. Mit dem Programmpaket LDSL-Tool steht mittlerweile eine Software zur Verfügung, mit der für eine große Klasse von kantenemittierenden Laser-Bauelementen Simulationen von Anfangswertaufgaben und die Berechnung von spektralen Eigenschaften des optischen Operators durchgeführt werden können ([3]). Dafür stehen inzwischen auch Algorithmen zur Berücksichtigung zusätzlicher physikalischer Effekte (z. B. nichtlineare Gain-Dispersion) und spezieller experimenteller Situationen (z. B. externe Anregung durch ein Datensignal) zur Verfügung. Die Dynamik eines Halbleiterlasers wird in vielen Fällen durch ein System von Gleichungen der Form

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} E &= H(n)E, \\ \frac{\partial}{\partial t} n &= f(n) - \langle E^*, g(n)E \rangle \end{aligned} \quad (1)$$

beschrieben, wobei E für das komplexe elektrische Feld und n für die Ladungsträger stehen. Je nach der konkreten Situation kann dabei E ein endlichdimensionaler Vektor oder auch eine mehrkomponentige, räumlich aufgelöste Funktion sein. Im letzteren Fall ist der lineare Operator $H(n)$ dann typischerweise ein hyperbolischer Differentialoperator, der die Wellenausbreitung, Lichtverstärkung und eine Brechung am Bragg-Gitter beschreibt. Die Ladungsträgerdichten n können dabei sowohl räumlich aufgelöst als auch gemittelt über die einzelnen Sektionen des Lasers betrachtet werden. Dem komplizierten Verhalten dieser Modelle liegen einerseits die nichtlineare Kopplung zwischen Ladungsträgerdichten und elektrischem Feld sowie andererseits die unterschiedlichen Zeitskalen in der Evolution von Elektronen und Photonen zugrunde.

Nichtlineare Gain-Dispersion (Bearbeiter: J. Sieber, M. Wolfrum, M. Radziunas).

Um eine exaktere Übereinstimmung von Modellrechnungen und experimentellen Ergebnissen zu erzielen, wurde mit der nichtlinearen Polarisation des Materials ein weiterer physikalischer

Effekt in das bekannte Travelling-Wave-Modell miteinbezogen, der zu einer nichtlinearen Gain-Dispersion führt. Dabei wird das Feld E neben den zwei Amplituden $\Psi^+(z,t)$ und $\Psi^-(z,t)$ für die vorwärts und rückwärts laufenden optischen Wellen noch durch zwei Amplituden $P^+(z,t)$ und $P^-(z,t)$ für die Polarisation beschrieben. Dies führt auf ein weiteres Paar von Gleichungen oder, äquivalent dazu, zu einem zeitlich nichtlokalen Term in der Gleichung für die optischen Amplituden.

Für das erweiterte Modell wurden Existenz und Eindeutigkeit der Lösung sowie die spektralen Eigenschaften des Feldoperators untersucht ([2], [6]).

Obwohl die Polarisation im vorliegenden Fall nur eine kleine Störung des Ausgangssystems bewirkt, konnte gezeigt werden, dass dadurch Änderungen in der Modenselektivität hervorgerufen werden, die unter bestimmten Bedingungen zu erheblichen Änderungen im Langzeitverhalten führen können ([2]). Simulationsrechnungen mit dem erweiterten Modell zeigen für praxisrelevante Situationen erhebliche Unterschiede der berechneten Pulsationsgebiete (s. Abb. 1).

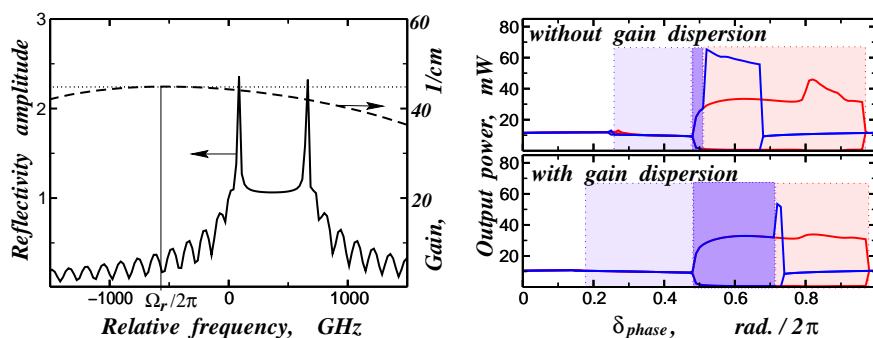


Abb. 1: Links: Reflektivität der aktiven DFB-Sektion und Materialdispersion (gestrichelt: nichtlineare Dispersionskurve, gepunktet: konstante Dispersion, d. h. ohne Berücksichtigung von Polarisation). Rechts: maximale und minimale Ausgangsleistung in Abhängigkeit des Phasenparameters δ (blau: wachsendes δ , rot: fallendes δ) und Pulsationsgebiete ohne Hysterese (violette Region).

Modenapproximationen als genäherte invariante Mannigfaltigkeiten (Bearbeiter: J. Sieber).

Bei der Untersuchung der Dynamik von Halbleiterlasern mit dispersiver Rückkopplung wird mit einer Hierarchie von Modellen gearbeitet. Darunter verstehen wir einerseits Systeme von partiellen und gewöhnlichen Differentialgleichungen, also unendlich-dimensionale dynamische Systeme, die zur Simulation und Optimierung von Bauelementen verwendet werden. Hierbei handelt es sich um numerische Untersuchungen über einen kleinen Zeithorizont. Zur Untersuchung spezieller nichtlinearer Effekte (z. B. Bifurkationsszenarios) werden niedrigdimensionale Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen verwendet, die einer Langzeit- sowie Bifurkationsanalyse leichter zugänglich sind.

Für diese Zwecke wurden von Physikern rein heuristisch die niedrigdimensionalen Modenapproximationen von (1) hergeleitet. Ein wichtiger Schritt zum Verständnis der verwendeten Modellhierarchie ist die mathematische Rechtfertigung dieser Modellreduktion.

Ein wesentlicher Fakt, der bei der Modellreduktion eine wichtige Rolle spielt, besteht darin, dass das optische Feld E und die Ladungsträgerdichte n auf unterschiedlichen Zeitskalen operieren, wobei n die langsame Variable ist. Unter diesem Gesichtspunkt kann System (1) als ein singular gestörtes System betrachtet werden.

In [9] wird (1) als System gewöhnlicher Differentialgleichungen betrachtet. Es wird bewiesen, dass unter bestimmten Voraussetzungen über $H(n)$ dieses System für kleine ε eine exponentiell attrahierende invariante Mannigfaltigkeit besitzt, die alle beschränkten Orbits enthält. Demnach

kann mit einer geringen Anzahl von Moden von E die Dynamik präzise beschrieben werden. In der Arbeit werden Ein-Moden- und Zwei-Moden-Modelle mit einer einzigen optischen Frequenz analysiert. Insbesondere wird gezeigt, dass das Parametergebiet mit Selbstpulsationen relativ klein ist.

In [6] ist gezeigt worden, dass die klassischen Aussagen über die Existenz, Attraktivität und asymptotische Entwickelbarkeit invarianter Zentrumsmannigfaltigkeiten für Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen auch für die partielle Differentialgleichung (1) gelten. Wesentlicher Grund dafür sind die spektralen Eigenschaften des Operators H in (1).

In diesem Sinn sind die Modenmodelle eine Approximation erster Ordnung der Zentrumsmannigfaltigkeiten. Dieses Einbettungsergebnis erlaubt es, sämtliche für die Modenapproximationen gewonnenen Erkenntnisse auf (1) zu übertragen, so lange sie robust gegenüber regulären Störungen sind (Aussagen über die Existenz von Selbstpulsationen, ihre dynamische Stabilität, stetige Abhängigkeit von Parametern, Synchronisationseigenschaften, generische Bifurkationsszenarios etc.) ([6]).

Bifurkationsanalyse der Zwei-Moden-Approximation (Bearbeiter: J. Sieber, D. Turaev).

In Simulationen von (1) tritt häufig der Fall auf, dass zwei Moden von H mit sehr verschiedener Frequenz nahezu gleich stark unterstützt werden (eine typische Eigenschaft von DFB-Lasern). Nach Übergang zur Zwei-Moden-Approximation erhält man ein fünfdimensionales System gewöhnlicher Differentialgleichungen. Der große Frequenzunterschied bewirkt jedoch, dass die Phasendifferenz zwischen den Moden so schnell rotiert, dass sie sich in erster Ordnung herausmittelt. Nach dieser Mittelung kann, ausgehend von den Ergebnissen über die Dynamik der Ein-Moden-Approximation ([1]), die Modenkonkurrenz oder -kooperation dynamisch (d. h. nicht nur in der Nähe von stationären Zuständen) in einem dreidimensionalen System analysiert werden. Im Fall der Modenkooperation ist dabei ein in diesen Modellen neuartiger Typ von stabiler raum-zeitlicher Dynamik gefunden worden: ein langsames Hin- und Herdriften zwischen zweimodiger Schwebung und einmodiger Selbstpulsation (siehe Abb. 2).

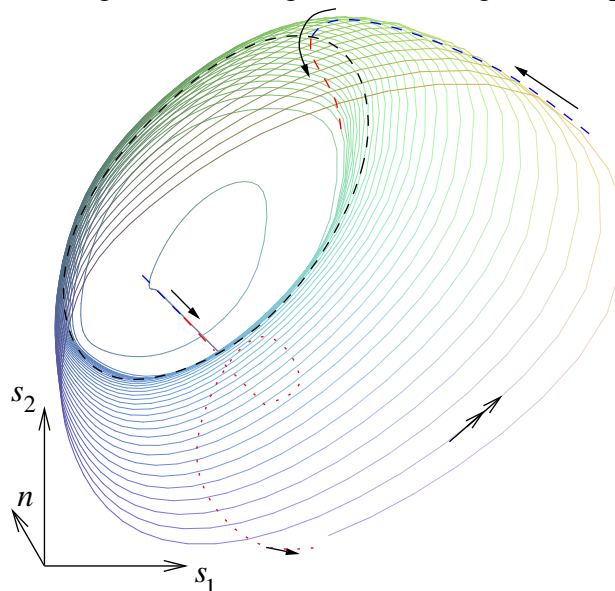


Abb. 2: „Bursting“-Lösung im gemittelten Zwei-Moden-Modell mit einer aktiven Sektion. Dieser Typ von Lösungen wird häufig in Neuronenmodellen gefunden.

Erregbarkeit von Lasern mit passivem dispersivem Reflektor (Bearbeiter: K. R. Schneider, J. Sieber).

Im Rahmen der rein optischen Signalübertragung spielt neben dem Bauelement, das auf die

Modulationsfrequenz einlockt, das so genannte Entscheiderelement eine grundlegende Rolle. Es hat die Aufgabe, für jedes eingehende Signal zu entscheiden, ob es ein Störsignal ist (Rauschen) oder ein Informationssignal darstellt.

Eine ähnliche Funktion besitzen die Neuronen. Ihre charakteristischen Eigenschaften sind:

- (i) Es existiert eine Reizschwelle. Alle unterschwelligen Reize bewirken nur eine lokale Antwort, die nicht weitergeleitet wird.
- (ii) Alle überschwelligen Reize führen zu einem schnellen charakteristischen Anwachsen und Abfallen des Aktionspotentials (Spikes). Die Form der Spikes hängt nicht von der Stärke des überschwelligen Reizes ab.
- (iii) Wirken auf ein Neuron zwei aufeinanderfolgende überschwellige Reize ein, dann treten nur dann zwei Spikes auf, wenn der zeitliche Abstand der aufeinanderfolgenden Reize eine charakteristische Zeit (Refraktärperiode) nicht unterschreitet.

Die Eigenschaften (i)–(iii) werden als Erregbarkeit bezeichnet. In jüngster Vergangenheit wurde auch an Lasermodellen Erregbarkeit beobachtet (optische Kavitäten, Laser mit sättigbaren Absorbern und Halbleiterlaser mit verzögertem optischen Feedback).

Unser Ziel besteht darin, Erregbarkeit bei Halbleiterlasern mit dispersiver Rückkopplung nachzuweisen. Im ersten Schritt auf diesem Weg verwenden wir ein Ein-Moden-Modell, das einen Laser mit einer Lasersektion und einem passiven dispersiven Reflektor beschreibt. Die Modellgleichungen lauten

$$\frac{dn}{dt} = J - n - (1 + n)K(n)p, \quad \frac{dp}{dt} = TG(n)p,$$

wobei n die Ladungsträgerdichte und p die Photonendichte in der Lasersektion beschreibt. J ist der an der Lasersektion angelegte Strom, die Funktion $K(n)$ ist die Petermann-Funktion, die wie folgt dargestellt wird

$$K(n) = K_0 + \frac{\alpha\omega^2}{4(n - n_0)^2 + \omega^2}.$$

Der Parameter n_0 beschreibt die Stelle, an der $K(n)$ eine Resonanz besitzt. Die Applikation der Störungen (Reize) erfolgt über den Strom J in Form von Rechteck-Impulsen. Die folgenden Abbildungen zeigen, dass derartige Lasermodelle Erregbarkeit aufweisen. In Zukunft sollen die zugrunde liegenden Erregungsszenarios in Verbindung mit dem Phasenportrait untersucht werden.

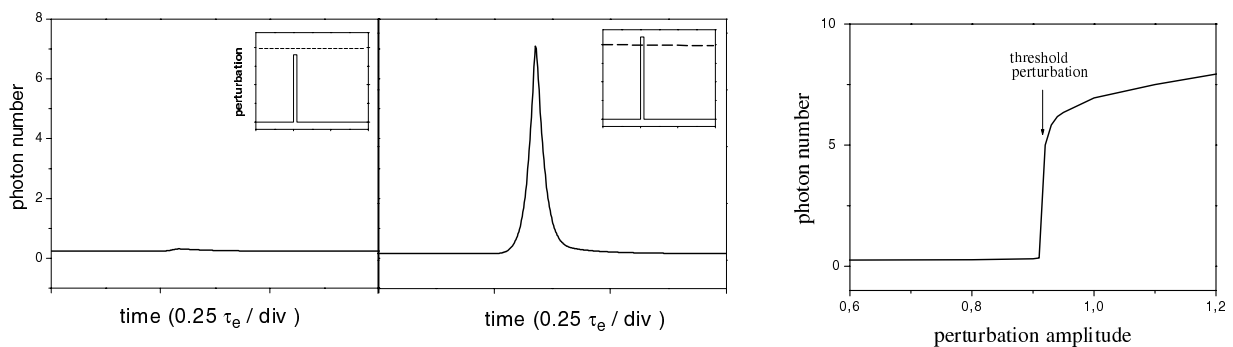


Abb. 3: Schwellenverhalten. Linke Abbildung: unterschwellige Störung führt zur Nichts-Antwort, überschwellige Störung führt zur Alles-Antwort (Spike). Rechte Abbildung: sprunghafter Anstieg der Antwort an der Reizschwelle.

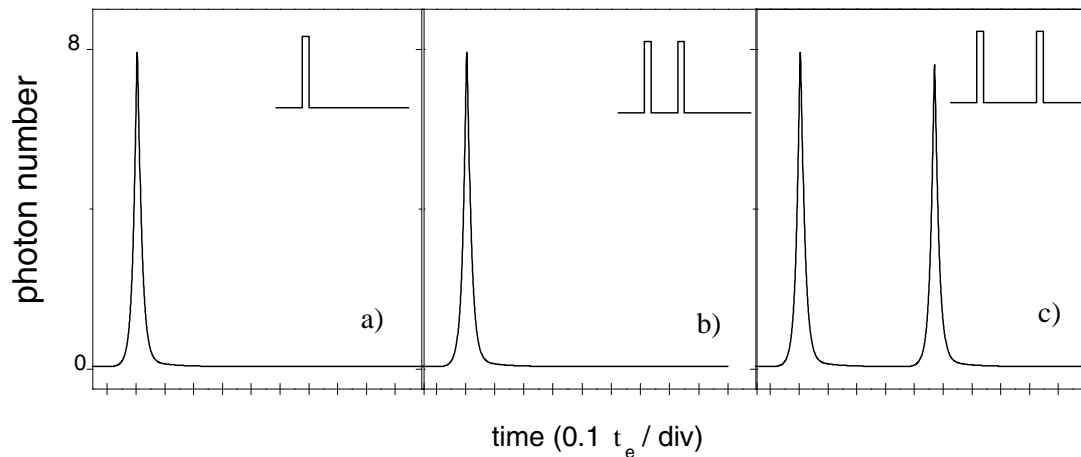


Abb. 4: Refraktärperiode: a) Spike auf überschwellige Störung, b) zweite überschwellige Störung während der Refraktärperiode (1 Spike), c) zweite überschwellige Störung nach der Refraktärperiode (2 Spikes).

Simulation von mehrmodigen hochfrequenten Selbstpulsationen: (Bearbeiter: M. Radziunas).

Hochfrequente Selbstpulsationen, die mit einem eingestrahlteten Datensignal synchronisieren, spielen eine zentrale Rolle bei der Taktrückgewinnung zur rein optischen Signalregeneration. In früheren Arbeiten ([5]) wurden in Zusammenarbeit mit dem Heinrich-Hertz-Institut 3-Sektions-Laser mit einer aktiven und zwei passiven Sektionen untersucht. Diese zeigen so genannte DQS-Pulsationen im Bereich von 5 bis 20 GHz und können mit einem externen Signal synchronisieren. Diese Pulsationen treten typischerweise nur in kleinen Gebieten im Parameterraum auf und bedürfen daher einer sorgfältigen Abstimmung.

In [4] wurden erstmals sowohl experimentelle als auch numerische Ergebnisse vorgestellt, bei denen Frequenzen von 40 – 100 GHz und deren Synchronisation gezeigt werden konnten. Dies wurde erreicht durch ein verändertes Design der Bauelemente, die hier aus zwei aktiven DFB-Sektionen und einer dazwischen liegenden passiven Phasensektion bestehen.

Es konnte gezeigt werden, dass diese Pulsationen auf einem grundlegend anderen Mechanismus beruhen und in großen Gebieten im Parameterraum auftreten. Anhand von Simulationsrechnungen konnten wesentliche Erkenntnisse zur Optimierung hinsichtlich von Modulationstiefe, Frequenz und Synchronisationsverhalten gewonnen werden.

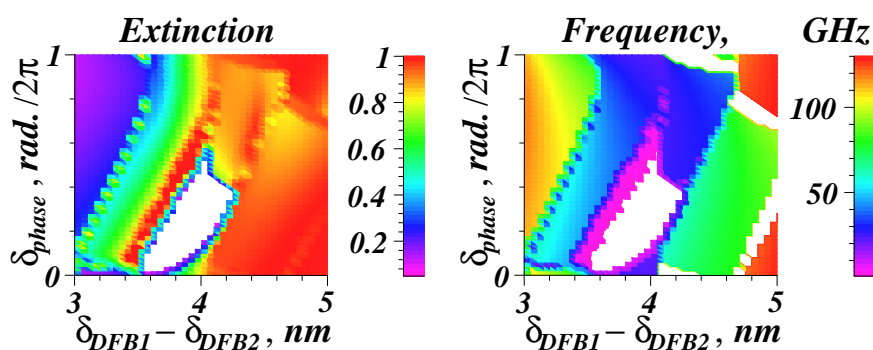


Abb. 5: Modulationstiefe $(P_{max} - P_{min}) / (P_{max} + P_{min})$ und Frequenz von zweimodigen Pulsationen für verschiedene Werte von Phasen- und Detuning-Parameter.

Literatur

1. U. BANDELOW, M. RADZIUNAS, V. TRONCIU, H.-J. WÜNSCHE, F. HENNEBERGER, *Tailoring the dynamics of diode lasers by dispersive reflectors*, in: „Physics and Simulation of Optoelectronic Devices VIII“ (R. H. Binder, P. Blood, M. Osinski, Hrsg.), Proceedings of SPIE, **3944**, SPIE, Bellingham, WA, 2000, pp. 536–545.
2. U. BANDELOW, M. RADZIUNAS, J. SIEBER, M. WOLFRUM, *Impact of gain dispersion on the spatio-temporal dynamics of multisection lasers*, WIAS-Preprint No. 597, 2000, erscheint in: IEEE J. Quantum Electronics, Februar 2001.
3. M. RADZIUNAS, H.-J. WÜNSCHE, B. SARTORIUS, O. BROX, D. HOFFMANN, K. SCHNEIDER, D. MARCENAC, *Modeling self-pulsating DFB lasers with an integrated phase tuning section*, IEEE J. Quantum Electronics, **36** (2000), pp. 1026–1034.
4. M. MÖHRLE, B. SARTORIUS, C. BORNHOLDT, S. BAUER, O. BROX, A. SIGMUND, R. STEINGRÜBER, M. RADZIUNAS, H.-J. WÜNSCHE, *Detuned grating multi-section-RW-DFB-lasers for high speed optical signal processing*, eingereicht.
5. M. RADZIUNAS, K. SCHNEIDER, J. SIEBER, D. TURAEV, M. WOLFRUM, *Nonlinear dynamics of semiconductor lasers*, Poster, 3rd International Symposium „Investigation of Nonlinear Dynamic Effects in Production Systems“, Brandenburgische Technische Universität Cottbus, 26. – 27. September 2000.
6. J. SIEBER, *Dynamics in a longitudinal semiconductor laser model*, Dissertation, eingereicht bei der Humboldt-Universität zu Berlin.
7. V. Z. TRONCIU, H.-J. WÜNSCHE, M. RADZIUNAS, K. SCHNEIDER, *Excitability of laser with integrated dispersive reflectors*, erscheint in: SPIE Proceedings Series, 2001.
8. V. Z. TRONCIU, H.-J. WÜNSCHE, J. SIEBER, K. SCHNEIDER, F. HENNEBERGER, *Dynamics of single mode semiconductor lasers with passive dispersive reflectors*, Optics Communications, **182** (2000), pp. 221–228.
9. D. TURAEV, *Fundamental obstacles to self-pulsations in low-intensity lasers*, WIAS-Preprint, in Vorbereitung.

Normalformen für homokline Bifurkationen

Bearbeiter: D. Turaev

Kooperation: P. Duarte (Technische Universität Lissabon, Portugal), S. Gonchenko, O. Stenkin (Institut für Angewandte Mathematik und Kybernetik, Nizhny Novgorod, Russland), L. Lerman (Institut für Mathematik, Freie Universität Berlin)

Förderung: DFG-Schwerpunktprogramm „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“, DAAD (NATO-Studienaufenthalte für ausländische Wissenschaftler und Deutsch-Portugiesischer Wissenschaftlertausch — INIDA-Programm 2000)

Wir betrachten parameterabhängige dynamische Systeme, die für gewisse Parametergebiete chaotisches Verhalten aufweisen, und setzen voraus, dass in diesen Parametergebieten Bifurkationen periodischer Lösungen auftreten. Das Ziel unserer Untersuchungen besteht darin, diese Bifurkationen zu beschreiben. Unter unseren Voraussetzungen kann man erwarten, dass diese Bifurkationen mit dem Auftreten homokliner Berührungen verbunden sind, d. h. die stabile und die instabile Mannigfaltigkeit einer sattelartigen periodischen Lösung schneiden sich nicht-transversal in einem Orbit. Da es bekanntlich nicht möglich ist, alle Bifurkationen periodischer Lösungen zu beschreiben, die mit dem Auftreten homokliner Berührungen zusammenhängen, beschränken wir uns auf das Studium periodischer Lösungen, die nur wenige Umläufe in der Umgebung eines homoklinen Orbits besitzen. Zur Untersuchung dieser Bifurkationen verwenden wir die erste Rückkehrabbildung (ER-Abbildung) bzw. deren Iterierte. Zu diesem Zweck soll anhand von geeigneten Koordinatentransformationen diese Abbildung eine möglichst einfache Gestalt annehmen. Da das Definitionsgebiet der zugehörigen ER-Abbildung sehr klein ist, bestehen unsere Koordinatentransformationen im Wesentlichen aus Skalierungen, die das Definitionsgebiet vergrößern. Auf diese Weise werden Normalformen abgeleitet, die nicht von der konkreten Form des dynamischen Systems, sondern von seiner effektiven Dimension ([1]) abhängen.

Im Falle von Abbildungen, die zweidimensionale Flächen kontrahieren und einen Orbit homokliner Berührungen besitzen, kann die ER-Abbildung nahe der homoklinen Kurve im Wesentlichen durch die Parabel-Abbildung

$$\bar{y} = M - y^2 \quad (1)$$

beschrieben werden, wobei M ein reeller Parameter ist ([2]). Daraus folgt, dass alle Kodimension-1-Bifurkationen periodischer Lösungen von (1) typisch sind für alle nichthyperbolischen flächenkontrahierenden Abbildungen mit chaotischem Verhalten. Dieses ziemlich allgemeine Resultat wurde in folgende Richtungen verallgemeinert:

- (i) In [3] wird bewiesen, dass eine Abbildung, die nicht flächenkontrahierend, aber 3D-volumenkontrahierend ist, auf eine der folgenden Normalformen transformiert werden kann:

$$\begin{aligned} \bar{x} &= y, & \bar{y} &= M - y^2 - Bx, \\ \bar{x} &= y, & \bar{y} &= M - x^2 - Cy, \end{aligned} \quad (2)$$

wobei M, B und C beliebige Werte annehmen können. Im Falle, dass die Abbildung nur 4D-volumenkontrahierend ist, lautet die Normalform

$$\bar{x} = y, \bar{y} = z, \bar{z} = M - Bx - Cz - y^2. \quad (3)$$

Das Studium der Bifurkationen der Fixpunkte dieser Abbildungen ist ziemlich einfach. Es kann gezeigt werden, dass in (2) geschlossene invariante Kurven (Kreise) und in (3) seltsame Attraktoren von einem Fixpunkt abzweigen können.

- (ii) In [4] wird gezeigt, dass die ER-Abbildung in der Umgebung einer Kurve homokliner Berührungen einer symplektischen Abbildung eine zweidimensionale glatte symplektische normal hyperbolische invariante Mannigfaltigkeit besitzt, auf der die Abbildung die folgende Normalform hat, die der Henon-Abbildung benachbart ist:

$$\bar{x} = y, \bar{y} = M - x - y^2. \quad (4)$$

Es ist bekannt, dass (4) eine wilde hyperbolische Menge besitzt, falls M gewissen Intervallen angehört ([5]). Unter Verwendung dieser Eigenschaft wird in [4] gezeigt, dass Systeme mit homoklinen Berührungen dicht sind in offenen Gebieten symplektischer Abbildungen, die einer beliebigen Abbildung mit einer einzigen homoklinen Berührung benachbart sind.

In [6] wird gezeigt, dass, falls eine vierdimensionale nichthyperbolische symplektische Abbildung mit einer homoklinen Berührung keine partiell hyperbolischen Strukturen besitzt, die zugehörige ER-Abbildung auf die Normalform

$$\bar{x} = y, \bar{y} = z, \bar{z} = w, \bar{w} = -x + M_1(y + w) + M_2 - x^2 \quad (5)$$

transformiert werden kann. Da (5) zwei-elliptische (also stabile) Fixpunkte besitzt, treten in den zugehörigen Abbildungen Bifurkationen auf, die zu zwei-elliptischen periodischen Orbits in der Umgebung der homoklinen Berührung führen.

- (iii) In [7] wird gezeigt, dass die ER-Abbildung in der Umgebung einer homoklinen Berührung einer zweidimensionalen Abbildung, die weder flächenkontrahierend noch flächenerhaltend ist, auf die Normalform

$$\bar{x} = y, \bar{y} = M - Bx - y^2 - \varepsilon xy \quad (6)$$

gebracht werden kann, wobei ε ein kleiner Parameter ist. Es wurden die Bifurkationen invarianter Kreise von (6) untersucht.

- (iv) Zu einer homoklinen Bifurkation gibt es mehr als eine Normalform. Tatsächlich gibt es unendlich viele, die der Anzahl der Umläufe der periodischen Lösung in der Nähe des homoklinen Orbits entsprechen. Für zweidimensionale flächenkontrahierende Abbildungen lautet die Normalform für die Bifurkation einer periodischen Lösung mit zwei Umläufen ([8])

$$\bar{y} = M_1 - By - (M_2 - y^2)^2. \quad (7)$$

Die Bifurkationsanalyse von (7) zeigt, dass alle grundlegenden Bifurkationen, die in [9] empirisch eingeführt wurden, auch hier auftreten. Damit sind diese Bifurkationen typisch für streng dissipative chaotische Systeme.

Literatur

1. D. V. TURAEV, *On dimension of non-local bifurcational problems*, Bifurcation and Chaos, **6** (1996), pp. 919–948.
2. S. V. GONCHENKO, L. P. SHILNIKOV, D. V. TURAEV, *Dynamical phenomena in systems with structurally unstable Poincaré homoclinic orbits*, Chaos, **6** (1996), pp. 23–52.
3. ———, *Coexistence of periodic orbits of different types near homoclinic tangency*, in Vorbereitung.
4. P. DUARTE, S. V. GONCHENKO, D. V. TURAEV, *Newhouse regions in multidimensional Hamiltonian systems*, in Vorbereitung.
5. P. DUARTE, *Persistent homoclinic tangencies for conservative maps near the identity*, Preprint 6/98, IST, Lisboa, March, 1998.
6. S. V. GONCHENKO, D. V. TURAEV, L. P. SHILNIKOV, *Abundance of elliptic periodic orbits near homoclinic tangencies to a saddle-focus*, erscheint in: Journal of Control and Dynamical Systems.
7. V. S. GONCHENKO, S. V. GONCHENKO, *On Andronov-Hopf bifurcations of two-dimensional diffeomorphisms with homoclinic tangencies*, WIAS-Preprint No. 556, 2000.
8. O. V. STEN'KIN, D. V. TURAEV, *Normal forms near homoclinic tangencies and Mira areas*, in Vorbereitung.
9. C. MIRA, *Chaotic dynamics. From the one-dimensional endomorphism to the two-dimensional diffeomorphism*, World Scientific, Singapore, 1987.

Mehrskalensysteme

Bearbeiter: K. R. Schneider

Teilprojekt 1: Stabilitätswechsel in Mehrskalensystemen

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

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

Im Rahmen der Forschungsk Kooperation zwischen dem Weierstraß-Institut und dem Fachbereich Mathematik der Physikalischen Fakultät der Staatlichen Universität Moskau auf dem Gebiet des Stabilitätswechsels bei Mehrskalensystemen und dessen Anwendung auf reaktionskinetische Prozesse wurde im Berichtszeitraum der Schritt in Richtung parabolischer Gleichungen vollzogen (in den vorangegangenen Jahren ging es um gewöhnliche Differentialgleichungen und um elliptische Probleme). Es wurden singulär gestörte teilweise dissipative Reaktions-Diffusionsgleichungen der Gestalt

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 \left(\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) &= g(u, v, x, t, \varepsilon), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= f(u, v, x, t, \varepsilon) \end{aligned} \quad (1)$$

betrachtet, wobei u und v skalare Funktionen sind und ε ein kleiner positiver Parameter ist. Gleichungen dieser Gestalt spielen bei der Modellierung von Prozessen eine Rolle, wenn der Effekt der Diffusion auf eine der Substanzen vernachlässigbar ist. Falls die ausgeartete Gleichung

$$g(u, v, x, t, 0) = 0 \quad (2)$$

eine bezüglich u isolierte Lösung besitzt, kann die Standardtheorie [1] angewandt werden, um asymptotische Eigenschaften der Lösung von Anfangsrandwertproblemen abzuleiten.

Die gemeinsamen Untersuchungen bezogen sich auf den Fall, dass die ausgeartete Gleichung zwei Lösungen $u = \varphi_1(v, x, t)$ und $u = \varphi_2(v, x, t)$ besitzt, die sich transversal in einer Fläche schneiden, deren Projektion in den (v, x, t) -Raum durch $v = s(x, t)$ beschrieben wird. Diese Annahme hat einen Stabilitätswechsel der Familien von Gleichgewichtspunkten der assoziierten Differentialgleichung

$$\frac{du}{d\tau} = g(u, v, x, t, 0)$$

zur Folge. Das Hauptresultat der Untersuchungen [2] besteht im Beweis eines Satzes über die Existenz einer eindeutigen Lösung des Anfangsrandwertproblems

$$\begin{aligned} u_x(0, t, \varepsilon) &= u_x(1, t, \varepsilon) = 0 \text{ für } 0 < t < T, \\ u(x, 0, \varepsilon) &= u^0(x), v(x, 0, \varepsilon) = v^0(x) \text{ für } 0 \leq x \leq 1 \end{aligned}$$

für (1) und ihres asymptotischen Verhaltens in ε für $\varepsilon \rightarrow 0$. Die Beweise basieren auf der Methode der asymptotischen Unter- und Oberlösungen. Die erhaltenen Ergebnisse (Änderung des asymptotischen Verhaltens aufgrund der Änderung des Stabilitätsverhaltens) können verwendet werden, um das Sprungverhalten der Reaktionsrate in derartigen Systemen zu erklären. Die erhaltenen Ergebnisse können auf Systeme übertragen werden ([3]).

Literatur

1. A. B. VASIL'EVA, V. F. BUTUZOV, L. V. KALACEV, *The boundary function method for singular perturbation problems*, SIAM, Philadelphia, 1995.
2. V. F. BUTUZOV, N. N. NEFEDOV, K. R. SCHNEIDER, *Singularly perturbed partly dissipative reaction-diffusion systems in case of exchange of stabilities*, WIAS-Preprint No. 572, 2000.
3. ———, *On a class of singularly perturbed partly dissipative reaction-diffusion systems*, in Vorbereitung.

Teilprojekt 2: Stabilisierung singular gestörter Kontrollsysteme

Kooperation: V. V. Strygin (Staatliche Universität Voronesh, Russland), E. Fridman (Universität Tel Aviv, Israel)

Förderung: Minerva-Stiftung

Wir betrachten dynamische Systeme mit schnellen und langsamen Zustandsgrößen

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= X(x, y, \lambda), \\ \varepsilon \frac{dy}{dt} &= Y(x, y, \lambda), \end{aligned} \tag{1}$$

wobei $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \mathbb{R}^M$, $0 < \varepsilon \ll 1$ gilt. λ ist ein k -dimensionaler Parameter. Wir nehmen an, dass (1) für $\lambda = \lambda_0$ einen instabilen Gleichgewichtspunkt (x_0, y_0) besitzt. Das Ziel besteht in der Stabilisierung des Gleichgewichtspunktes durch Applikation einer Vibrationskontrolle. In [1] wird die Vibrationskontrolle durch schnelle (fastperiodische) Variationen des Parameters λ realisiert

$$\lambda = \lambda_0 + \varphi\left(\frac{t}{\varepsilon}\right). \tag{2}$$

Es werden Bedingungen abgeleitet, unter denen die Lösung des Anfangswertproblems von (1) unter der Voraussetzung (2) als asymptotische Reihe in ε dargestellt werden kann. Unter Verwendung von Mittelungsmethoden und der Methode der Randschichtfunktionen kann das Restglied abgeschätzt werden.

In [2] wird das Stabilisierungsproblem von einem allgemeineren Standpunkt aus betrachtet (es werden nicht nur Parametervariationen als Steuerungsfunktionen verwendet), und zu seiner Lösung werden mehr geometrische Zugänge verwendet.

Zu diesem Zweck wird das Kontrollsystem

$$\begin{aligned}\frac{dx}{d\tau} &= \varepsilon X(x,y) + U(x,\tau), \\ \frac{dy}{d\tau} &= Y(x,y)\end{aligned}$$

mit $\tau := t/\varepsilon$ betrachtet. Es soll die Steuerung $U(x,\tau)$ so bestimmt werden, dass der unkontrollierte instabile Zustand (x_0, y_0) stabilisiert wird. Unter Verwendung von Resultaten über die Persistenz normal hyperbolischer invarianter Mannigfaltigkeiten und durch die Anwendung der Mittelungstheorie und weiterer geeigneter Koordinatentransformationen werden hinreichende Bedingungen für die Stabilisierbarkeit abgeleitet. Gleichzeitig werden modifizierte Konzepte der Vibrationsstabilisierung eingeführt und mit den klassischen Definitionen an Beispielen verglichen.

Literatur

1. V. V. STRYGIN, *Hybrid method and vibrational stability for nonlinear singularly perturbed systems under parametric excitations*, WIAS-Preprint No. 561, 2000.
2. K. R. SCHNEIDER, E. FRIDMAN, *Geometric approach to vibrational control of singularly perturbed systems*, WIAS-Preprint No. 624, 2000.

4.3 Forschungsgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen

4.3.1 Zusammenfassung

Die Forschungsgruppe hat ihre langfristig angelegten Forschungen im Bereich numerischer Verfahren für Systeme von partiellen Differentialgleichungen und Algebra-Differentialgleichungen weitergeführt. Als neuer thematischer Bereich ist die Behandlung der Navier-Stokes-Gleichungen hinzugekommen (durch die neuen Forschungsgruppenmitglieder Bänsch, Davis, Scurtu).

Die thematischen Schwerpunkte waren:

- Numerische Verfahren und Softwarekomponenten für die Lösung von Systemen partieller Differentialgleichungen (WIAS-Schwerpunktthemen: *Mikro-, Nano- und Optoelektronik, Phasenübergänge, Strömungs- und Transportprobleme in Kontinuen*),
- Simulation von Höchstfrequenzschaltungen (WIAS-Schwerpunktthema: *Mikro-, Nano- und Optoelektronik*),
- Dynamische Simulation chemischer Prozesse (WIAS-Schwerpunktthema: *Optimierung und Steuerung in der Verfahrenstechnik*).

Die Forschungsgruppe hat an den nachfolgend genannten forschungsgruppenübergreifenden Projekten mitgearbeitet:

- Simulation optoelektronischer Charakteristika von Quantum-Well-Strukturen (siehe S. 139) gemeinsam mit der FG 1 und
- 3D-Simulation von DEPMOS-Röntgendetektoren (siehe S. 144) gemeinsam mit der FG 1.

In der Forschungsgruppe werden die folgenden institutsübergreifenden Themen bearbeitet:

- Weiterentwicklung und Pflege der Toolbox *pdelib* sowie Konsultation für Nutzer innerhalb des WIAS und
- Visualisierung.

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

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

4.3.2 Projekte

Adaptive Verfahren für Transportprozesse in porösen Medien

Bearbeiter: J. Fuhrmann, M. Petzoldt, E. Bänsch

Kooperation: H.-J. Diersch (WASY GmbH Berlin), W. Dörfler (Universität Kaiserslautern)

Förderung: BMBF: „Entwicklung von adaptiven Lösungsstrategien und effizienten Auflösungsverfahren für die numerische Simulation unterirdischer Strömungs- und Transportprozesse in räumlich dreidimensionalen Gebieten“ (03-FU7FV1-0)

Im Berichtszeitraum wurde untersucht, wie sich die Heterogenitäten auf die Regularität und damit die Approximationseigenschaften der Finiten Elemente auswirken. Es wurde gezeigt, dass ein Schachbrettmuster von Diffusionskoeffizienten zu der schlechtesten Regularität für eine gegebene Variation der Diffusionskoeffizienten führt ([1]). Des Weiteren wurde die Regularität für den Fall zwischen der quasimonotonen Verteilung der Diffusionskoeffizienten und der schachbrettartigen Verteilung untersucht ([2]).

Rechnungen für Modellprobleme in drei Raumdimensionen zeigten, dass auch dort die Fehlerschätzer im quasimonotonen Fall zu einer optimalen Reduktion und zu einer nur moderaten Überschätzung des Fehlers führen.

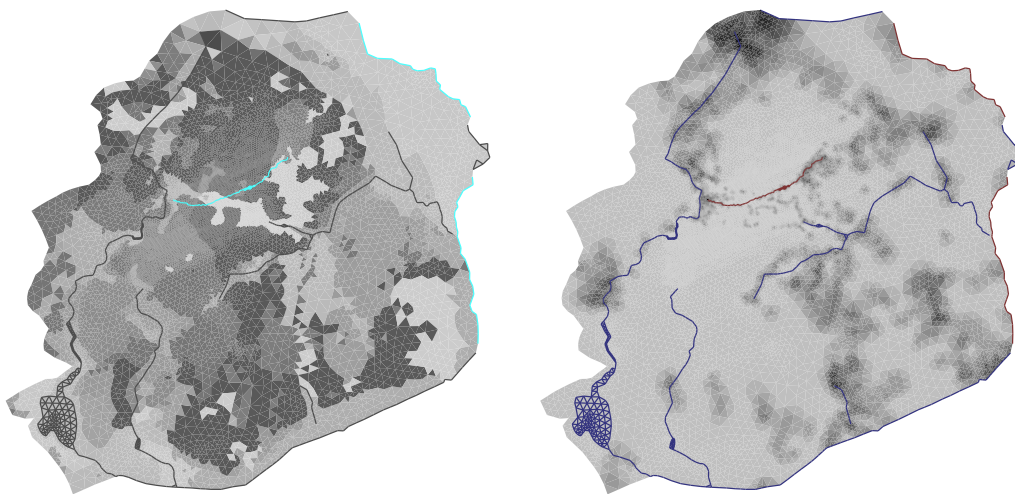


Abb. 1: links: Gebiet mit heterogenem Diffusionskoeffizienten; rechts: Verfeinerungstiefe von hell (noch nicht verfeinert) bis schwarz (5-mal verfeinert).

Nachdem numerische Beispiele mit Modellproblemen die Robustheit und Effizienz des Fehlerschätzers bestätigt hatten, wurden Testrechnungen mit realen Daten durchgeführt. Diese Datensätze wurden von der WASY GmbH zur Verfügung gestellt. Sie umfassen sowohl heterogene Gebiete mit ca. 11000 Freiheitsgraden als auch Gitter mit anisotropen Dreiecken. Der bisher in *pdelib* integrierte Fehlerschätzer wurde über die IFM-Schnittstelle von FEFLOW als Plug-in an FEFLOW angeschlossen und steht nunmehr als frei wählbares zusätzliches Modul zur Verfügung. Zur Kontrolle des Fehlerschätzers wurde auf einem feineren Referenzgitter eine Referenzlösung numerisch berechnet, die als hinreichend genaue Approximation an die tatsächliche Lösung angesehen werden kann. Die numerischen Experimente zeigten, dass die Fehlerschätzung zu einer optimalen Reduktion des Fehlers und einem moderat konstanten

Effizienzindex führt. Die Schwankungsbreite des Effizienzindex [2.5, 5.5] war vergleichbar mit der für Modellprobleme beobachteten Schwankungsbreite. Bemerkenswert ist bei großen Problemen eine überdurchschnittliche Reduktion des Fehlers zu Beginn der Verfeinerung. In dieser prä-asymptotischen Phase zahlt sich die adaptive Gitterverfeinerung besonders aus. Nachdem diese Ergebnisse dem Projektpartner vorgestellt wurden, befürwortete dieser die Verwendung des Codes im FEFLOW-Programm. In Abb. 1 ist ein heterogenes Gebiet mit ca. 11000 Knoten dargestellt. Daneben sieht man die Verfeinerungstiefe auf dem adaptierten Gitter mit ca. 18000 Knoten. Dunkle Bereiche bedeuten eine bis zu fünffache Verfeinerungstiefe.

Literatur

1. M. PETZOLDT, *Regularity results for interface problems in 2D*, WIAS-Preprint No. 565, 2000.
2. ———, *Regularity and error estimators for elliptic problems with discontinuous coefficients*, Dissertationsschrift an der Freien Universität Berlin.

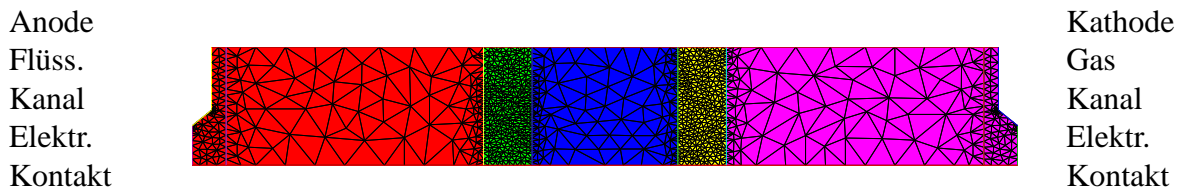
Zweidimensionale numerische Simulation von direkt mit Methanol betriebenen Brennstoffzellen (DMFC)

Bearbeiter: J. Fuhrmann, K. Gärtner

Kooperation: J. Divisek (Forschungszentrum Jülich GmbH, IWV3, Energieverfahrenstechnik)

Förderung: IWV3, Jülich

Die DMFC ist ein Kandidat für in Kraftfahrzeugen einsetzbare Energiequellen. Die Wechselwirkungen zwischen Flüssigkeiten, Gasen, Elektronen und Ionen, Katalysatorplätzen usw. werden im gegenwärtig untersuchten Modell durch ein System von zehn gekoppelten partiellen Differentialgleichungen und zwölf gewöhnlichen Differentialgleichungen beschrieben. Einen Überblick über die Variablen und geometrischen Verhältnisse gibt die folgende Tabelle und Abbildung:

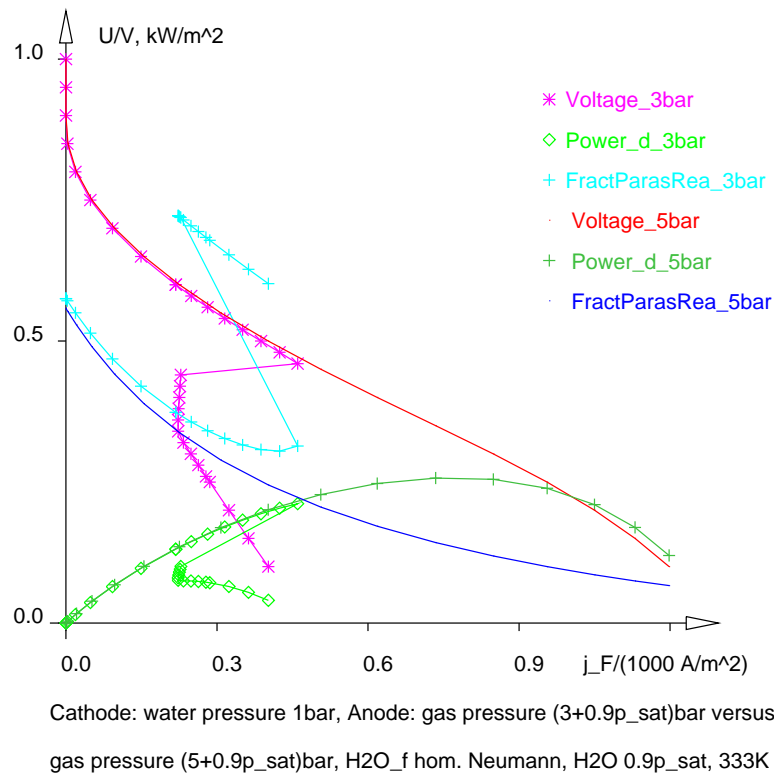
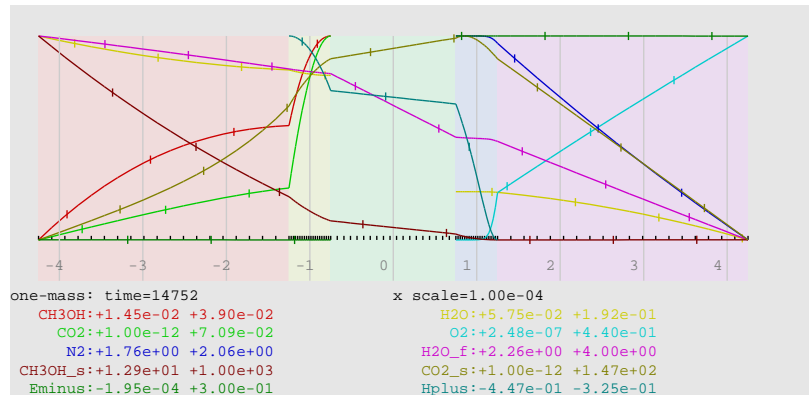


| Kohlenst. Teflon | Kohlenst. Nafion + Pt | Nafion | Kohlenst. Nafion + Pt | Kohlenst. Teflon |
|--|--|--|--|--|
| CH_3OH -D. H_2O -Dampf CO_2 -Gas | CH_3OH -D. H_2O -Dampf CO_2 -Gas | | H_2O -Dampf N_2 -Gas O_2 -Gas | H_2O -Dampf N_2 -Gas O_2 -Gas |
| H_2O -flüss. CH_3OH -gel. CO_2 -gel. | H_2O -flüss. CH_3OH -gel. CO_2 -gel. | H_2O -flüss. CH_3OH -gel. CO_2 -gel. | H_2O -flüss. CH_3OH -gel. CO_2 -gel. | H_2O -flüss. CH_3OH -gel. CO_2 -gel. |
| e^- | e^- H^+ | H^+ | e^- H^+ | e^- |
| | $\Theta_i, i = 1, \dots, 8$ Katalys. Zust. | | $\Theta_i, i = 1, \dots, 8$ $\theta_i, i = 1, \dots, 4$ | |

Die Methanol-Wasser-Mischung tritt durch den linken Kanal (der einen Teil des produzierten CO_2 in gasförmiger und flüssiger Form abführt) ein. Der rechte Kanal führt O_2 zu und z. B. Wasser ab. Beide poröse Diffusionsschichten leiten den Elektronenstrom zu einem Kontaktsegment an der Oberfläche. Das heißt, Modell und Zellentwurf müssen drei gekoppelte Transportprobleme lösen: Flüssigkeits-, Gas- und geladener Teilchentransport, die miteinander in verschiedener Weise wechselwirken.

Die wesentlichste Charakterisierung der DMFC erfolgt durch ihre elektrische Kennlinie. Außerdem interessieren viele andere Größen wie z. B. der Anteil der parasitären Methanolreaktion (in der kathodenseitigen Reaktionszone), Leistung, Wirkungsgrad, molare Ströme. Die folgenden

Abbildungen zeigen berechnete typische Verteilungen der einzelnen gesuchten Dichten (Partialdrucke, Potentiale) und eine Kennlinie mit Turningpoints, die aus der Wechselwirkung zwischen Zweiphasenströmung und Elektrochemie resultieren.



Literatur

1. H. DOHLE, J. DIVISEK, R. JUNG, *Process engineering of the direct methanol fuel cell*, J. Power Sources, **86** (2000), pp. 469–477.
2. A. A. KULIKOVSKY, J. DIVISEK, A. A. KORNYSHEV, *Two dimensional simulation of direct methanol fuel cell: A new (embedded) type of current collectors*, J. Electrochemical Soc., **147** (2000), pp. 953–959.

Simulation von Mikrowellenschaltungen

Bearbeiter: G. Hebermehl, J. Schefter, R. Schlundt, F.-K. Hübner, M. Uhle

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

Förderung: DFG: „Finite Integrationsmethode mit Tetraedergitter zur elektromagnetischen Simulation von Mikrowellenschaltungen“

Der wachsende Markt für Mikrowellenschaltungen im Bereich der Mobilkommunikation sowie der Sensor- und Richtfunktechnik erfordert eine Weiterentwicklung der Modelle und der Simulationswerkzeuge. Im Berichtszeitraum wurde auf folgenden Gebieten gearbeitet:

- Die Berücksichtigung offener Strukturen und deren Behandlung durch absorbierende Randbedingungen bei gleichzeitiger Erhöhung der Frequenzen machte die Entwicklung neuer Verfahren für Teilprobleme notwendig.
- Die Simulation stellt hohe Anforderungen an die räumliche Auflösung, weil einerseits Metallisierungsdicken unterhalb des Mikrometerbereichs und andererseits Chipdimensionen im Millimeterbereich erfasst werden müssen. Um den numerischen Aufwand in Grenzen zu halten, ist äußerste Ökonomie bei der Wahl des Diskretisierungsgitters geboten. Im Rahmen eines DFG-Projektes wurde mit der Formulierung eines Finite-Volumen-Verfahrens zur Lösung der Maxwell'schen Gleichungen im Frequenzbereich für nichtstrukturierte Gitter (Tetraeder) begonnen, um komplizierter berandete Gebiete behandeln und lokal begrenzte Gitterverfeinerungen durchführen zu können.

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

$$\begin{aligned} \oint_{\partial\Omega} \vec{H} \cdot d\vec{s} &= \int_{\Omega} j\omega[\varepsilon]\vec{E} \cdot d\vec{\Omega}, & \oint_{\cup\Omega} ([\varepsilon]\vec{E}) \cdot d\vec{\Omega} &= 0, \\ \oint_{\partial\Omega} \vec{E} \cdot d\vec{s} &= - \int_{\Omega} j\omega[\mu]\vec{H} \cdot d\vec{\Omega}, & \oint_{\cup\Omega} ([\mu]\vec{H}) \cdot d\vec{\Omega} &= 0, \\ \vec{D} &= [\varepsilon]\vec{E}, \quad \vec{B} = [\mu]\vec{H}, \quad [\varepsilon] = \text{diag}(\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z), \quad [\mu] = \text{diag}(\mu_x, \mu_y, \mu_z). \end{aligned}$$

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

Für die numerische Behandlung wird das Berechnungsgebiet durch elektrische und magnetische Wände oder durch so genannte Absorbing-Boundary-Bedingungen (ABC) begrenzt, um offene Strukturen berechnen zu können. Als ABC werden Perfectly Matched Layers (PML) verwendet. Diese Schichten bestehen aus künstlichem Material mit komplexen anisotropen Materialeigenschaften.

An den Toren ist das transverse elektrische Feld gegeben durch die Superposition der transversalen Wellenleitermoden, die mit Hilfe eines Eigenwertproblems zu berechnen sind, bevor das Randwertproblem gelöst werden kann.

Die Diskretisierung der Maxwell'schen Gleichungen mit Hilfe nichtäquidistanter, versetzter Quadergitter ([1]) ergibt hochdimensionale lineare Gleichungssysteme mit schwach besetzten indefiniten komplexen symmetrischen Koeffizientenmatrizen.

Aufgrund der longitudinalen Homogenität der Wellenleiter wird von einem exponentiellen Ansatz für die longitudinale Richtung ausgegangen. Dieser Ansatz führt auf ein Eigenwertproblem mit schwach besetzter nichtsymmetrischer komplexer Matrix zur Berechnung der Moden ([2]).

Das endliche PML-Volumen verursacht auch virtuelle Moden, die nicht das wirkliche Verhalten des Wellenleiters widerspiegeln. Diese unerwünschten so genannten PML-Moden zeichnen sich durch ihre hohe Leistungsdichte in den PM-Schichten aus und werden aufgrund dieser Eigenschaft eliminiert. Die Berechnung aller Eigenwerte zur Bestimmung einiger weniger Ausbreitungskonstanten wird vermieden, indem für modifizierte Matrizen eine Folge von Eigenwertproblemen ([3]) mit Hilfe des Arnoldi-Verfahrens gelöst wird (siehe Abb. 1 und 2). Für hohe Frequenzen konvergierte im Falle der PML das bisher verwendete Zwei-Schritt-Verfahren ([4]) nicht.

Die hochdimensionalen Gleichungssysteme (mehrere Millionen Unbekannte) mit mehreren rechten Seiten werden simultan unter Verwendung von vier verschiedenen auf die Aufgabenstellung zugeschnittenen Vorkonditionierungstechniken (Addition des Gradienten der elektrischen Divergenzgleichung, Independent Set Orderings, Jacobi- und SSOR-Vorkonditionierung) mit Hilfe von Block-QMR-Methoden ([10]) gelöst.

Im Rahmen des oben genannten DFG-Projektes wurde die Diskretisierung der Maxwell'schen Gleichungen auf Tetraedergittern und den zugehörigen Voronoizellen auf der Basis eines Finite-Volumen-Verfahrens hergeleitet ([9]). Die Ergebnisse umfassen graphentheoretische Betrachtungen mit Aussagen über die Anzahl der Gleichungen und Variablen, die Wahl der Variablen, die Eliminierung der magnetischen Flussdichte aus dem Gleichungssystem, die Vorschriften zur Berechnung der Koeffizientenmatrizen ohne Kenntnis von Nachbarschaftsbeziehungen der vom Gittergenerator (siehe S. 59) erzeugten Tetraeder, den Nachweis der Symmetrie der Koeffizientenmatrix und Ansätze zur Behandlung von Sonderfällen (Lage des Umkugelmittelpunktes, Verletzung der Delaunay-Eigenschaft der Gitter). Für spezielle Schaltungsstrukturen (Mikrostreifenleitung mit Wellenwiderstandssprung, Übergang Mikrostreifenleitung – Koaxialleitung) wurden die mit dem Generator COG erzeugten Gitter ausgewertet. Mit Hilfe des Gittergenerators *lbg* werden Vergleichsrechnungen (Quader-/Tetraedergitter) durchgeführt sowie der Einfluss von Gitterverfeinerungen untersucht.

Die Ergebnisse der Forschungsarbeiten wurden in den Publikationen [3–11] 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 and Techniques, **40** (1992), No. 3, pp. 540–546.
2. A. CHRIST, H. L. HARTNAGEL, *Three-dimensional finite-difference method for the analysis of microwave-device embedding*, IEEE Trans. Microwave Theory and Techniques, **35** (1987), No. 8, pp. 688–696.

3. G. HEBERMEHL, F.-K. HÜBNER, R. SCHLUNDT, T. TISCHLER, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *Numerical simulation of lossy microwave transmission lines including PML*, WIAS-Preprint No. 612, 2000, eingereicht.
4. —, *On the computation of eigen modes for lossy microwave transmission lines including Perfectly Matched Layer boundary conditions*, erscheint in: COMPEL, **20**.
5. —, *Numerical simulation of lossy microwave transmission lines including PML*, in: Book of Abstracts, Scientific Computing in Electrical Engineering (SCEE-2000), Warnemünde, 20–23 August 2000 (U. van Rienen, D. Hecht, H. W. Glock, Hrsg.), Universität Rostock, 2000, p. 37.
6. —, *Simulation of lossy microwave circuits including PML*, in: Final Program and Abstracts, First SIAM Conference on Computational Science and Engineering, Washington, DC, USA, September 21–24, 2000, p. 57.
7. —, *On the simulation of microwave transmission lines with PML*, in: Proceedings of the Fifth International Conference on Mathematical and Numerical Aspects of Wave Propagation, July 10–14, 2000, Santiago de Compostela, Spain (A. Bermúdez, D. Gómez, Ch. Hazard, P. Joly, J. E. Roberts, Hrsg.), Proceedings in Applied Mathematics, **102**, SIAM, Philadelphia, 2000, pp. 906–910.
8. G. HEBERMEHL, R. SCHLUNDT, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *The eigen mode problem for microwave transmission lines with absorbing boundary conditions*, Z. Angew. Math. Mech., **80** (2000), Suppl. 3, pp. 837–838.
9. J. SCHEFTER, *Diskretisierung der Maxwell'schen Gleichungen auf Tetraedergittern*, WIAS-Studie, 2000.
10. R. SCHLUNDT, G. HEBERMEHL, F.-K. HÜBNER, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *Iterative solution of systems of linear equations in microwave circuits using a block quasi-minimal residual algorithm*, WIAS-Preprint No. 620, 2000, eingereicht.
11. R. SCHLUNDT, G. HEBERMEHL, F.-K. HÜBNER, T. TISCHLER, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *Iterative solution of systems of linear equations in microwave circuits using a block quasi-minimal residual algorithm*, in: Book of Abstracts, Scientific Computing in Electrical Engineering (SCEE-2000), Warnemünde, 20–23 August 2000 (U. van Rienen, D. Hecht, H. W. Glock, Hrsg.), Universität Rostock, 2000, p. 45.

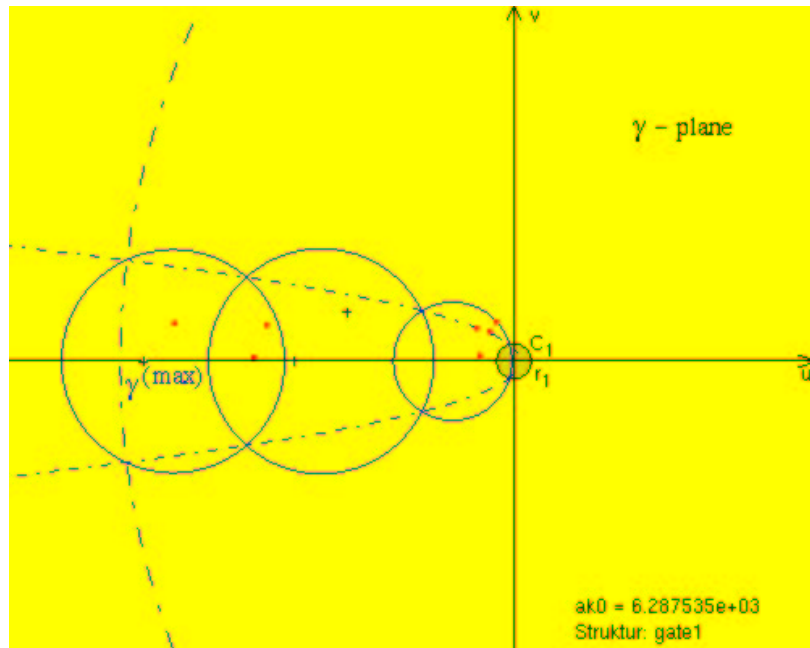


Abb. 1: Lage der Eigenwerte.

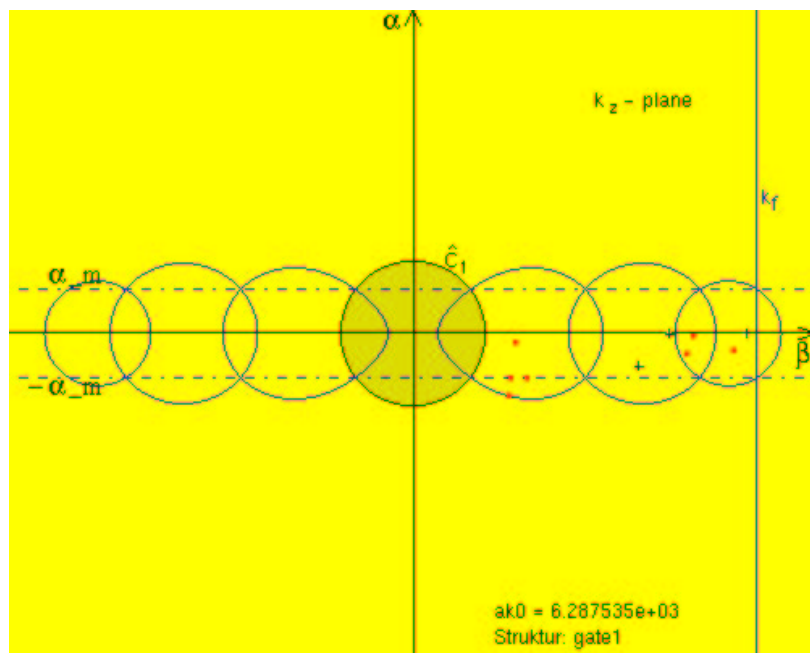


Abb. 2: Lage der Ausbreitungskonstanten.

Simulation dynamischer Prozesse in der Verfahrenstechnik

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

Kooperation: A. Kienle (Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme, Magdeburg), S. Kurz (Robert Bosch GmbH, Stuttgart), A. Schuppert (Bayer AG, Leverkusen)

Förderung: BMBF: „Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen“ (03-GR7FV1-3)

Bei der numerischen Simulation dynamischer Prozesse in komplexen verfahrenstechnischen Anwendungen kann man deren hierarchische Struktur ausnutzen. So wird etwa bei der Modellierung dynamischer Vorgänge in Produktionsanlagen der chemischen Industrie, ausgehend von einer modularen Entwicklung und Testung von Modellen für Teilanlagen, eine stufenweise Verschaltung der Teilmodelle zu einem Prozessmodell der Gesamtanlage erzeugt. Wegen der numerischen Komplexität der bei industriellen Anwendungen zu behandelnden Problemstellungen erlangt der Einsatz paralleler numerischer Verfahren eine wachsende Bedeutung. Die von uns in den letzten Jahren hierfür entwickelten Simulationsansätze und numerischen Verfahren nutzen die durch die modulare Modellierung vorgegebene hierarchische Struktur der zu behandelnden Gleichungssysteme für die Parallelisierung aus.

Im Berichtszeitraum wurden zwei Simulationsansätze untersucht, die mit diakoptischen Methoden arbeiten. Während beim homogenen Simulationsansatz von einer homogenen Modellierung des Prozesses durch ein hierarchisch strukturiertes DAE-System ausgegangen wird, können beim heterogenen Simulationsansatz verschiedene Teilprozesse sowohl verschieden modelliert als auch mit unterschiedlichen Simulationswerkzeugen behandelt werden.

Beim **homogenen Simulationsansatz**, der im Prozess-Simulator *BOP* (**B**lock **O**riented **P**rocess simulator) ([1,3]) realisiert wurde, wird vorausgesetzt, dass die bei der Modellierung entstehenden DAE-Systeme entsprechend der Teilprozesse in m Teilsysteme

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

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

strukturiert sind, wobei mit $u(t)$ der Vektor der Parameterfunktionen und mit $y(t)$ der Vektor der unabhängigen Funktionen bezeichnet sind. Basierend auf dieser Teilsystemstruktur werden die DAE-Systeme in Blöcke partitioniert. Eine solche Partitionierung kann vorgegeben oder durch Partitionierungsalgorithmen generiert werden. Durch geeignete Erweiterung der bei der Verwendung von BDF-Verfahren in jedem Diskretisierungszeitpunkt entstehenden nichtlinearen Gleichungssysteme können diese durch effektiv parallelisierbare blockstrukturierte Verfahren vom Newton-Typ (BSN) gelöst werden. Diese Verfahren basieren auf einem Block-Schur-Komplement-Ansatz und ermöglichen den Einsatz sowohl von Multilevel-Iterations- als auch von adaptiven Relaxations-Techniken. Sie wurden im Berichtszeitraum sowohl hinsichtlich der Effektivität ihrer Parallelisierung als auch hinsichtlich der eingesetzten Relaxations-Techniken verbessert ([1]).

Bei der numerischen Lösung der durch Diskretisierung der Differentialgleichungen entstehenden Systeme von nichtlinearen Gleichungen sind lineare Gleichungssysteme zu behandeln. Die Matrizen der linearen Systeme sind unsymmetrisch, schwach besetzt, schlecht konditioniert und

besitzen keinerlei mathematisch verwendbare Struktureigenschaften. Es werden deshalb spezielle direkte Verfahren verwendet, die die schwache Besetztheit der Matrizen ausnutzen. Mit dem linearen Löser *GSPAR* kann das Problem effektiv behandelt werden. Dies zeigte sich sowohl bei der Simulation von anspruchsvollen industriellen Problemen als auch bei der Lösung von Systemen mit verschiedenen Testmatrizen. Es konnten weitere Verbesserungen der numerischen Verfahren erzielt werden. Die Arbeiten an einer neuen, in Fortran 90 implementierten Version von *GSPAR* wurden fortgesetzt. Erste Testrechnungen sind positiv verlaufen.

Die Implementierung eines Compilers zur Erzeugung einer Schnittstelle zum Simulator *BOP* wurde fortgeführt. Ausgehend von der gleichungsorientierten Eingabesprache für Prozesse in der Verfahrenstechnik erzeugt der Compiler das dazugehörige DAE-System. Die Eingabesprache erlaubt eine zweistufige hierarchische Modellierung der Prozesse mit Hilfe von Macros und Units. Der Compiler löst die Hierarchie auf, und es wird eine Zuordnung der im DAE-System enthaltenen Größen zu den Variablen und Parametern vorgenommen. Aus den dabei entstehenden Listen, die das gesamte DAE-System beschreiben, wird die Schnittstelle zum Simulator *BOP* erzeugt. Die Struktur und die Ausdrücke zur Berechnung der Jacobi-Matrix werden durch symbolische Differentiation der Gleichungen des DAE-Systems erzeugt. Die Schnittstelle enthält in einem Datenteil die Beschreibung der Dimension, der Struktur, der Variablen und der Parameter des DAE-Systems. Ein Programmteil der Schnittstelle enthält Subroutinen zur Berechnung der rechten Seiten des DAE-Systems und zur Berechnung der Jacobi-Matrix. Die Einbindung von Nutzerprozeduren wurde erweitert. Es können jetzt auch vom Nutzer die zugehörigen partiellen Ableitungen bereitgestellt werden, die dann bei der Berechnung der Jacobi-Matrix an Stelle der bisherigen numerischen Differentiation benutzt werden. Der Compiler und die erzeugte Schnittstelle zum Simulator *BOP* wurden an ausgewählten Beispielen getestet.

Der Simulator *BOP* ist auf Parallelrechnern mit Shared Memory vom Typ Cray J90 und SGI Origin 2000 implementiert. Abbildung 1 zeigt die Beschleunigungsfaktoren für die komplette dynamische Simulation für drei verschiedene Destillationsprozesse unseres industriellen Kooperationspartners.

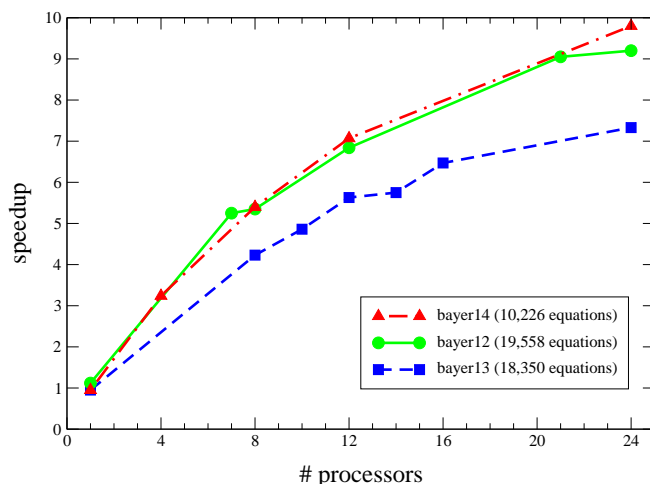


Abb. 1: Speedup der dynamischen Simulation einiger industrieller Destillationsprozesse.

Aufgrund einer konkreten Problemstellung eines Kooperationspartners aus der Industrie wurde im Simulator *BOP* ein Einbettungsverfahren zur Bestimmung der stationären Lösung von

Reaktionsgleichungen implementiert. Gesucht sind dabei Zustandsgrößen, die von Parametern abhängen und die explizite Funktionen der Zeit sind. Wegen der Reaktionsraten und anderer Parameter des Systems kommt es bei einigen anwendungsrelevanten Parameterkonstellationen dazu, dass sich die Werte der Lösungskomponenten in einem relativ engen Parameterbereich um mehr als acht Größenordnungen ändern. Die Bestimmung der stationären Lösung für solche kritischen Parametersätze ist mit einem kommerziellen Simulator sehr problematisch und gelingt nur, wenn man die Kenntnis des Lösungsgebietes bei der Festlegung einer geeigneten Startnäherung für ein iteratives Verfahren voraussetzt. Ein solches Vorgehen ist aber bei komplexen Systemen nicht mehr möglich. Aus diesem Grund wurde ein Einbettungsverfahren implementiert, bei dem bei der Bereitstellung der Startlösung keinerlei Vorkenntnisse des Lösungsgebietes erforderlich sind. Das Verfahren basiert auf der Lösung einer Folge benachbarter Probleme, die durch eine geeignete Regelung der Einbettungsparameter erzeugt werden. Mit diesem im Simulator *BOP* implementierten Verfahren wurden Testrechnungen zur Bestimmung der Lösung des stationären Gleichungssystems für verschiedene kritische Parametersätze erfolgreich durchgeführt. Das Verfahren hat sich dabei als sehr robust und zuverlässig erwiesen. Wegen seines geringen Rechenaufwandes ist es auch für komplexere Aufgabenstellungen geeignet.

Bei dem im Berichtszeitraum ebenfalls betrachteten **heterogenen Simulationsansatz** wird eine noch konsequentere Parallelisierungsstrategie als beim homogenen Ansatz verfolgt. Hierbei wird für gewisse Zeitintervalle die Simulation von Teilprozessen auf ein Rechnernetz verteilt und zum Ende jedes Zeitintervalls ein Abgleich der Koppelgrößen zwischen den Teilprozessen vorgenommen. Dieses Vorgehen kann sowohl auf Parallelrechnern mit Shared Memory als auch mit Distributed Memory angewendet werden. Bei diesem Vorgehen wird auf die von der Bayer AG Leverkusen entwickelte Simulationsumgebung *Simulation Manager* aufgebaut, mit der die verteilte Simulation von Teilprozessen gesteuert werden kann.

Da kommerzielle Simulatoren im Allgemeinen keine Eingangs-Ausgangs-Sensitivitäten liefern, wurden ableitungsfreie Waveform-Iterationsverfahren untersucht. Dabei wird vorausgesetzt, dass die zur Lösung der Teilprozesse eingesetzten Simulatoren für vorgegebene Eingangsvariablen die Ausgangsvariablen der Teilprozesse mit ausreichender Genauigkeit berechnen können. Da Verfahren vom Newton-Typ nur in Ausnahmefällen eingesetzt werden können, weil kommerzielle Simulatoren in der Regel keine Ableitungsinformationen zur Verfügung stellen und Differenzenapproximationen der Jacobi-Matrix der Koppelgleichungen zu aufwendig sind, wurde ein Konzept zur Konvergenzverbesserung in Anlehnung an die bei Quasi-Newton-Verfahren verwendeten Aufdatierungstechniken (Broyden-Update) entwickelt ([7]), das insbesondere bei stark gekoppelten Systemen zuverlässig arbeitet und bei Bedarf vorhandene Sensitivitätsinformationen berücksichtigt.

Tab. 1: Konvergenzbeschleunigung der Picard-Typ-Iteration durch Broyden-Update

| Zeitfenster | 1 | 2 | 3 | 4 | 1–4 |
|--|----|----|----|----|-----|
| Anzahl der Iterationen ohne Broyden-Update | 39 | 29 | 23 | 18 | 109 |
| Anzahl der Iterationen mit Broyden-Update | 23 | 20 | 14 | 13 | 70 |

Für die Erprobung des heterogenen Simulationsansatzes wurde ein nichtisothermes Prozessmodell zur Herstellung von 1,2-Dichlorethan benutzt, das sowohl als Gesamtmodell als auch zerlegt in drei Teilprozesse programmiert wurde. Die Tabelle 1 zeigt die durch den Broyden-Update erzielte Konvergenzbeschleunigung für den in Teilprozesse zerlegten 1,2-Dichlorethan-Prozess.

Die im Rahmen des BMBF geförderten Arbeiten zur heterogenen Simulation wurden in diesem Jahr abgeschlossen.

Literatur

1. J. BORCHARDT, *Newton-type decomposition methods in large-scale dynamic process simulation*, erscheint in: *Comput. Chem. Engng.*
2. —, *Parallel numerical methods for large-scale DAE systems*, in: *Proceedings of AspenWorld 2000, Conference on Optimizing the Manufacturing Enterprise*, Orlando, FL, February 6–11, 2000, Aspen Technology, Inc., 2000, pp. 1–20.
3. J. BORCHARDT, K. EHRHARDT, F. GRUND, D. HORN, *Parallel modular dynamic process simulation*, in: *Scientific Computing in Chemical Engineering II* (F. Keil, W. Mackens, H. Voss, J. Werther, Hrsg.), [Part 2:] *Simulation, image processing, optimization, and control*, Springer, Berlin [u. a.], 1999, pp. 152–159.
4. J. BORCHARDT, F. GRUND, D. HORN, *Parallelized methods for large nonlinear and linear systems in the dynamic simulation of industrial applications*, *Surveys Math. Indust.*, **8** (1999), No. 3/4, pp. 201–211.
5. F. GRUND, J. BORCHARDT, K. EHRHARDT, D. HORN, *Divide and conquer strategies in large scale dynamic process simulation*, in: *Chemical Engineering and Reaction Technology ...*, Abstracts of the Lecture Groups/International Meeting on Chemical Engineering, Environmental Protection and Biotechnology, *ACHEMA 2000, DECHEMA*, Frankfurt, Main, 2000, pp. 204–206.
6. K. EHRHARDT, J. BORCHARDT, F. GRUND, D. HORN, *Distributed dynamic process simulation*, erscheint in: *Proceedings of GAMM 2000 Annual Meeting*, Wiley-VCH, Berlin.
7. —, *Divide and conquer strategies in large scale dynamic process simulation*, *Comput. Chem. Engng.*, **23** (1999), Suppl., pp. 335–338.

Gittergenerierung

Bearbeiter: I. Schmelzer

Die Arbeiten am Gittergenerator COG wurden fortgesetzt. Neben Fehlerbeseitigung und Anfertigung von Gittern für Nutzer innerhalb des Instituts wurden dabei folgende Punkte behandelt:

- Schaffung der Voraussetzungen für die Behandlung von Gitterfunktionen. Hierbei wird es ermöglicht, in Gitterpunkten auf verschiedene Weise Funktionswerte zu berechnen: beispielsweise durch Berechnung von C++ Funktionen in Gitterpunkten oder auch durch Interpolation vorhandener Gitterfunktionen auf einem alten Gitter. Beide Methoden können kombiniert und die Funktionswerte zur Berechnung von Verfeinerungskriterien verwendet werden.
- Vollständige Umarbeitung des Konzeptes der Koordinatentransformationen. Das bisherige Konzept hatte sich als unhandlich erwiesen und wurde durch ein besseres und leichter anwendbares Konzept ersetzt.

Im Zusammenhang damit wurden verschiedene neue Koordinatensysteme implementiert.

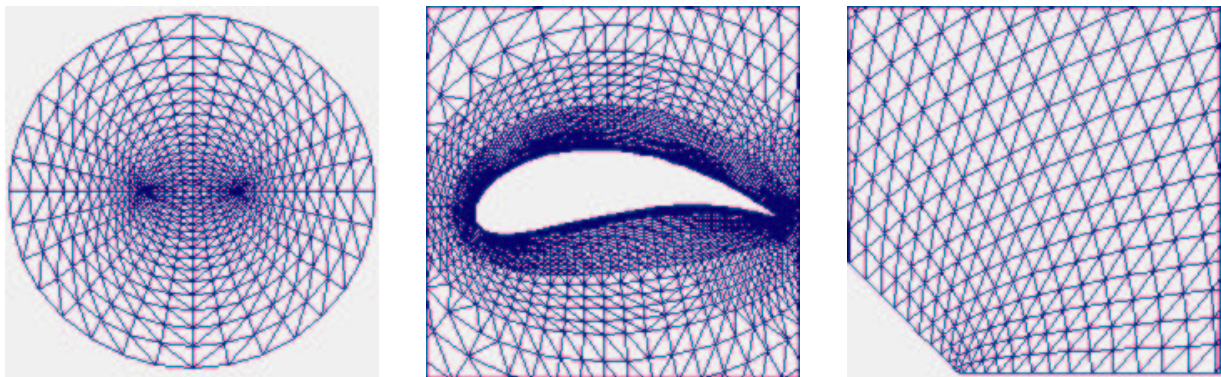


Abb. 1: Beispiele für Gitter, wie sie mit Hilfe der neu implementierten Koordinatensysteme erzeugt werden können.

Weiterhin wurden verschiedene Alternativen für die zukünftige Entwicklung von COG betrachtet. Ziel war die Entwicklung eines langfristigen Konzepts für ein fensterorientiertes Nutzerinterface für COG. Hierbei mussten einige Grundsatzentscheidungen getroffen werden. Eine Möglichkeit besteht darin, eine eigene CAD-ähnliche Umgebung für COG zu entwickeln. Eine Alternative wäre die Schaffung einer Schnittstelle zwischen existierenden CAD-Programmen und COG.

Weiterhin waren für beide Alternativen verschiedene Design-Möglichkeiten, insbesondere die Frage nach verwendbarer externer Software, zu klären. Nach eingehender Betrachtung der Vor- und Nachteile der beiden Alternativen sowie der Abschätzung des jeweils damit verbundenen Aufwandes wurde die Entwicklung einer eigenen CAD-ähnlichen Schnittstelle für COG unter Verwendung der freien Programmpakete LibXML und FLTK favorisiert.

Die Implementierung eines Testcodes, der die Durchführbarkeit dieser Alternative in vertretbarer Zeit zeigen soll, wurde begonnen.

Weiterhin wurde die Schaffung einer Schnittstelle zu NETGEN begonnen.

Literatur

1. I. SCHMELZER, COG 2.1 — *3D grid generation and geometry description package*, <http://www.wias-berlin.de/cog>, 2000.
2. —, *Grid generation and geometry description with COG*, in: Proceedings of contributed papers and posters, „ALGORITMY 2000, 15th Conference on Scientific Computing“, Vysoké Tatry-Podbanské, Slovakia, Sept. 10–15, 2000, pp. 399–405.

Präsentation und Visualisierung von numerischen Simulationen

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

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

Im abgelaufenen Berichtszeitraum hat sich gezeigt, dass die in den letzten Jahren angeschaffte Hard- und Software den Anforderungen des WIAS zur Unterstützung der visuellen Auswertung von Zwischen- und Endergebnissen bei der Berechnung numerischer Probleme und für Präsentationen entspricht.

Aufgrund vielfältiger Kooperationen des WIAS mit Einrichtungen aus Industrie, Forschung und der öffentlichen Hand hat sich ein Schwerpunkt der Arbeiten mit Bilddateien und Dateien mit allgemeinem Charakter (z. B. Textdateien) in den Bereich der Personalcomputer mit Windows-Betriebssystemen verlagert. Ohne eine Ausstattung wie den Windows NT-Server oder den Windows2000-Server mit den gängigen Softwarekomponenten ließe sich ein derartiger computerbasierter Informationsaustausch nicht durchführen.

In der UNIX-Umgebung des Instituts wurden für die COMPAQ-Computer verschiedene Softwarekomponenten für die visuelle Auswertung hinzugefügt, wie die Interface-Bibliothek GLUT¹, eine neue Version des Visualisierungspakets GRAPE² und einige Tools für das Image-Processing.

Im Folgenden werden einige Beispiele aus der Arbeit der Visualisierungsgruppe aufgeführt.

Für das Projekt „Simulation des Widerstands-Impulsschweißens“ der Forschungsgruppe 1 wurde eine neue Technik für die Visualisierung einer Sequenz von Bildern entwickelt, die eine Darstellung von kleinen wichtigen Details gestattet. Mit der herkömmlichen VHS-Videotechnik war diese Aufgabe nicht realisierbar. Über die OpenGL-Bibliothek und die Interface-Bibliothek GLUT wurden mittels eines Programmes in der Programmiersprache C die Ergebnisse der Simulationsrechnung als Sequenz von Bildern auf dem hoch auflösenden Computerbildschirm direkt ausgegeben. Mit einer auf die Workstation abgestimmten zeitlichen Synchronisation wurde der Effekt eines Videofilms geschaffen.

Dieser „Videofilm“ fand als Präsentation auf der Hannover-Messe Verwendung.

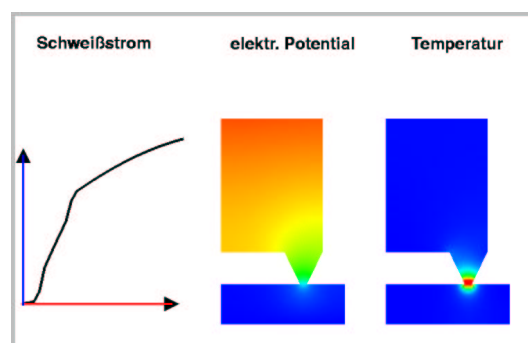


Abb. 1: Bild der Video-Sequenz „Simulation des Widerstands-Impulsschweißens“.

Die bewährte Kooperation mit der Abteilung Multimedia des Rechenzentrums der Humboldt-Universität zu Berlin half bei einer Reproduktion von Teilen eines Videofilms, welcher anlässlich der Namensgebung des Instituts aufgenommen wurde. Diese untypische Aufgabe konnte nur mit der speziellen Ausstattung des Videostudios der genannten Abteilung gelöst werden.

¹http://www.reality.sgi.com/mjk_asd/OpenGLforX.html

²<http://www.iam.uni-bonn.de/sfb256/grape/main.html>

4.4 Forschungsgruppe Nichtlineare Optimierung und Inverse Probleme

4.4.1 Zusammenfassung

Zentraler Forschungsgegenstand der Forschungsgruppe ist Optimierung bei diskretisierten Modellen und Inverse Probleme. Hierin wurde zum einen die Kontinuität in dem langfristig angelegten Projekt zur diffraktiven Optik fortgesetzt. Das im Berichtsjahr hierzu auslaufende BMBF-Projekt wird im Rahmen des Nachfolgeprogramms des BMBF weiterfinanziert.

Zum anderen wurden neue Projekte akquiriert. Mit einem schwäbischen Softwarehaus für Produktionsplanung wurde eine neue Industriekooperation begonnen, in deren Rahmen ausschließlich industriefinanzierte Arbeiten zum Thema „Bahnplanung für Roboter und Menschmodellierung“ durchgeführt wurden.

Im Mai 2000 organisierte die Forschungsgruppe einen Workshop zum Thema „Fast solution of discretized optimization problems“, der regen Anklang fand und dessen Ergebnisse in Form von Proceedings auch noch einem breiteren Publikum zur Verfügung gestellt werden.

Die in diesem Jahr erzielten wissenschaftlichen Ergebnisse werden im Folgenden näher dargestellt.

4.4.2 Projekte

Direkte und inverse Probleme für diffraktive Strukturen in der Optik

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

Kooperation: H.-J. Rostalski (Raytek GmbH Berlin), B. Kleemann (Carl Zeiss Oberkochen), J. Bischoff (Carl Zeiss Jena), G. Bao (Michigan State University, East Lansing, USA), J. Cheng (Fudan Universität, Shanghai, China und Gunma Universität Kiryu, Japan), M. Yamamoto (Universität Tokio, Japan)

Förderung: BMBF: „Analytische und numerische Behandlung direkter und inverser Probleme für diffraktive Strukturen — Optimierung binärer optischer Gitter“ (03EL7FV1/4)

Ziel des Projekts ist die analytische und numerische Behandlung und vertiefte Modellierung direkter und inverser Beugungsprobleme für mikrooptische Strukturen. Solche Bauelemente realisieren optische Eigenschaften und Funktionen, die mit traditionellen optischen Elementen nicht erreichbar sind. Im Zuge der weiteren Miniaturisierung ergeben sich neue interessante Anwendungsfelder solcher Elemente, z. B. in der Lasertechnologie, bei der optischen Datenübertragung oder beim optischen Rechnen.

Ein Teilthema des Projekts „Direkte und inverse Probleme bei diffraktiven Strukturen — Optimierung binärer Gitter“ wurde durch das BMBF gefördert und Mitte 2000 erfolgreich abgeschlossen. Ein neues Projekt „Modellierung und Optimierung mikrooptischer Oberflächenstrukturen“ wird im Rahmen des Förderprogramms „Neue mathematische Verfahren in Industrie und Dienstleistungen“ vom 1. Januar 2001 an für drei Jahre vom BMBF unterstützt.

Im Mittelpunkt der bisherigen Arbeiten standen die Simulation und Optimierung binärer und Multilevel-Gitter. Die Modellierung basiert auf den Maxwell-Gleichungen im dreidimensionalen Ganzraum, deren numerische Lösung aber wegen der hohen Frequenzen des Lichts und der Kleinheit der Strukturen im Submikrometerbereich zurzeit nicht möglich ist. Im Fall periodischer Strukturen, den so genannten Beugungsgittern, können die Maxwell-Gleichungen auf Variationsprobleme mit nichtlokalen Randbedingungen in einer beschränkten zweidimensionalen Zelle reduziert werden.

Beim direkten Problem werden die charakterisierenden Größen der reflektierten und transmittierten Moden gesucht, die durch die Beugung einer zeitharmonischen Welle an einer periodischen Struktur entstehen. Diese Größen lassen sich aus dem ermittelten elektromagnetischen Feld durch einfache Formeln berechnen. Beim Problem des optimalen Entwurfs geht es darum, Gitterstrukturen zu bestimmen, die möglichst genau vorgegebene Größen für die reflektierten und transmittierten Moden annehmen. Die mathematischen Untersuchungen zu diesem Problemkreis wurden weitestgehend abgeschlossen, die entwickelten Algorithmen wurden für den technologisch relevanten Fall der binären und Multilevel-Gitter im Programmsystem DIPOG implementiert. Die Untersuchungen zum inversen Problem der diffraktiven Optik wurden intensiviert. Motivation ist das Problem der Rekonstruktion des Gitterprofils aus gemessenen Fernfelddaten, das z. B. bei der Inspektion diffraktiver Strukturen auftritt. Für Modellprobleme wurden Fragen der Stabilität und Einzigkeit untersucht sowie Konvergenzaussagen für die Tikhonov'sche Regularisierung hergeleitet.

Auf die 2000 durchgeführten Arbeiten wird in den folgenden Punkten näher eingegangen.

1. Direkte Probleme.

Die konische Diffraction wird durch ein System von verallgemeinerten Helmholtzgleichungen, die über Stetigkeitsbedingungen an den Materialgrenzen gekoppelt sind, beschrieben ([3]). Die Berechnung der Beugungseffektivitäten basiert auf einer verallgemeinerten FE/BE-Diskretisierung in einem beschränkten Gebiet, wobei die Ausstrahlungsbedingungen durch nichtlokale Randintegraloperatoren realisiert werden. Ist die Gitterstruktur in ein Schichtsystem eingebettet, dann lassen sich diese Systeme ebenfalls durch nichtlokale Randintegraloperatoren beschreiben, so dass bei der numerischen Lösung nur die inhomogene Struktur diskretisiert werden muss. Die Untersuchungen dieser Randoperatoren sowie die Konvergenzanalyse der entsprechenden Finite-Element-Methode wurden abgeschlossen ([4]). Durch den Einsatz der verallgemeinerten Finite-Element-Methode (GFEM) und der modifizierten Randoperatoren wurde die Effizienz der Algorithmen zur Lösung des direkten Problems wesentlich erhöht.

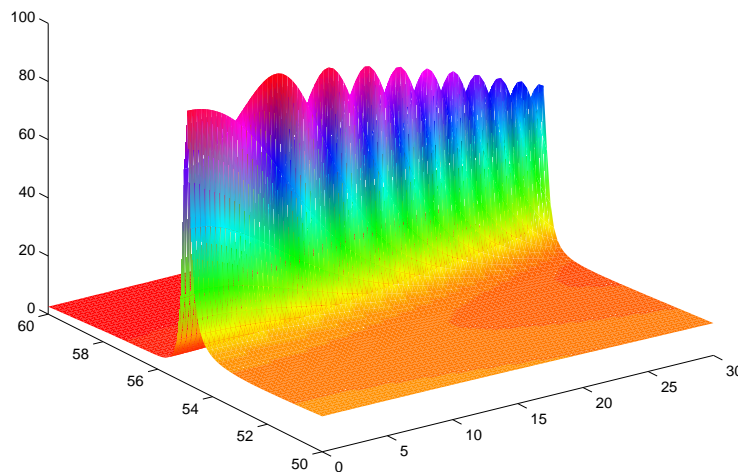


Abb. 1: Reflektierte Energie eines Dünnschichtgitters bei konischer Diffraction in Abhängigkeit von den Einfallswinkeln.

Die Implementierung dieses Zugangs in DIPOG wurde insbesondere bei den Partnern der BMBF-Projekte für die Berechnung von binären und Multilevel-Gittern genutzt. War zu Anfang der Arbeiten zum Projekt die Form von Beugungsgittern bei Perioden unterhalb des Mikrometerbereichs auf binäre Gitter beschränkt, erlaubt die Entwicklung der Herstellungstechniken mittlerweile auch allgemeinere, polygonale Geometrien der Beugungsgitter. Deshalb ist ein Schwerpunkt des neuen BMBF-Projekts die Entwicklung effektiver Lösungsverfahren für Gitter mit möglichst allgemeiner Geometrie und Materialzusammensetzung.

In Zusammenarbeit mit G. Bao wurden mathematische und numerische Untersuchungen von Beugungsgittern aufgenommen, die mit optisch nichtlinearen Materialien beschichtet sind. Unter gewissen Voraussetzungen an die Kristallstruktur der Materialien lassen sich solche Gitter durch ein System von Helmholtzgleichungen modellieren, zu deren Lösung in DIPOG bereitgestellte Algorithmen benutzt werden können. Numerische Ergebnisse belegen eine wesentliche Erhöhung des Wertes der zweiten Harmonischen im Vergleich zu Schichtsystemen. Es ist deshalb vorgesehen, Verfahren zur Geometrieoptimierung solcher Gitter zu entwickeln.

2. Optimale Design-Probleme.

Die auf Abstiegsverfahren beruhenden Algorithmen zum optimalen Design von Beugungsgittern erfordern die Berechnung der Gradienten der Rayleigh-Koeffizienten bezüglich Änderung der

Gitterparameter. Die in [2] erhaltenen analytischen Gradientenformeln waren jedoch auf den Fall der klassischen Diffraktion (Einfall senkrecht zur Gitterebene) an binären Gittern und schwacher Lösungssingularitäten beschränkt. In [6] wurden Methoden aus [5] weiterentwickelt, um den praktisch wichtigen Fall mehrerer zusammenstoßender Materialien und beliebiger Singularitäten bei schrägem Lichteinfall behandeln zu können. Außerdem wird damit der für spätere Anwendungen wichtige Fall allgemeiner polygonaler Geometrien erfasst. Dieser Zugang, der auf dem Konzept der Materialableitung (anstelle der Gebietsableitung) beruht, erlaubt die Berechnung der Ableitungen der Diffraktionskoeffizienten durch wegunabhängige Kurvenintegrale sowohl für binäre diffraktive Elemente als auch für allgemeinere (stückweise glatte) Profile. Damit wurde die Grundlage zur Entwicklung effektiver Algorithmen zum optimalen Design von Beugungsgittern bei konischer Diffraktion gelegt.

3. Inverse Probleme.

Ein weiteres praktisch relevantes inverses Problem ist die Rekonstruktion des Gitterprofils aus den gemessenen Fernfelddaten, das z. B. bei der Inspektion diffraktiver Strukturen auftritt. Dabei ist der Nachweis der Eindeutigkeit sowie der (lokalen oder globalen) Stabilität solcher Probleme von zentraler Bedeutung. Bisher lagen noch keine Ergebnisse zur lokalen Stabilität für nichtglatte Profilkurven vor, die z. B. beim praktisch wichtigen Fall von binären und Multilevel-Gittern auftreten. Globale Stabilitätsabschätzungen für periodische diffraktive Strukturen sind selbst im Fall glatter Grenzflächen bisher nicht publiziert worden. Ein noch größeres Defizit im internationalen Forschungsstand besteht hinsichtlich einer effizienten numerischen Lösung dieser inversen Probleme.

Aufbauend auf den in [5] entwickelten Methoden, konnten in [7] neue lokale Stabilitätsabschätzungen vom Lipschitz-Typ für polygonale Profile beim inversen TE- und TM-Diffraktionsproblem erhalten werden. Weiterhin wurden in Zusammenarbeit mit J. Cheng und M. Yamamoto Untersuchungen zur Eindeutigkeit und Stabilität des inversen Problems im Modellfall eines vollständig reflektierenden, glatten, periodischen Profils durchgeführt. In [9] wurde für glatte Profile erstmalig eine globale Stabilitätsabschätzung gewonnen, aus der man eine Konvergenzrate für die Tikhonov'sche Regularisierung des inversen Problems herleiten kann. Letzteres soll in zukünftigen Untersuchungen geschehen.

Für den Fall diskreter Messpunkte wurde in [8] die Eindeutigkeit in den Fällen eines absorbierenden Mediums einerseits sowie eines nichtabsorbierenden Mediums unter zusätzlichen a priori-Informationen andererseits untersucht. Unter Verwendung von Aussagen über die eindeutige Fortsetzbarkeit von Lösungen der Helmholtzgleichung werden hinreichende Kriterien für die Rekonstruierbarkeit des Profils bewiesen. Für kontinuierliche Beobachtungen auf dem gesamten Intervall sind solche Aussagen weitgehend bekannt. In der Praxis kann jedoch nur an diskreten Stellen gemessen werden.

Weiterhin wurde ein numerisches Verfahren zur Rekonstruktion eines vollreflektierenden zweidimensionalen periodischen Profils aus Fernfelddaten bereitgestellt. Dazu wurde eine von A. Kirsch und R. Kress (vgl. [1]) entwickelte Methode zur Bestimmung glatter Hindernisse in der akustischen Streutheorie der Spezifik der diffraktiven Optik angepasst. Das gestreute Feld wird dabei als Einfachschichtpotential angesetzt, wobei die unbekannte Dichte aus dem Fernfeld zu bestimmen ist. Dann wird das gesuchte Profil aus der Dichte unter Verwendung der homogenen Dirichlet-Randbedingung, die längs des Profils gilt, ermittelt. Diese Methode vermeidet die Lösung direkter Probleme in jedem Iterationsschritt und beruht auf der Zerlegung des schlecht gestellten nichtlinearen Gesamtproblems in ein schlecht gestelltes lineares Teilproblem und ein gut gestelltes nichtlineares Teilproblem. Dabei können moderne Optimierungsverfahren

für das nichtlineare Teilproblem eingesetzt werden. Mit der Implementierung des Verfahrens im Fall glatter Profilkurven wurde begonnen. Es bestehen gute Aussichten, die Konvergenz dieser Methode auch für nichtglatte Profile nachzuweisen.

Literatur

1. D. COLTON, R. KRESS, *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory*, 2. Auflage, Springer, Heidelberg, 1998.
2. J. ELSCHNER, G. SCHMIDT, *Diffraction in periodic structures and optimal design of binary gratings. Part I: Direct problems and gradient formulas*, Math. Methods Appl. Sci., **21** (1998), pp. 1297–1342.
3. J. ELSCHNER, R. HINDER, F. PENZEL, G. SCHMIDT, *Existence, uniqueness and regularity for solutions of the conical diffraction problem*, Math. Models Methods Appl. Sci., **10** (2000), No. 3, 317–341.
4. J. ELSCHNER, R. HINDER, G. SCHMIDT, *Numerics for conical diffraction*, in Vorbereitung.
5. J. ELSCHNER, G. SCHMIDT, *Diffraction in periodic structures and optimal design of binary gratings. Part II: Gradient formulas for TM polarisation*, in: Problems and Methods in Mathematical Physics, The Siegfried Prössdorf Memorial Volume, Oper. Theory Adv. Appl., Birkhäuser, Basel, erscheint 2001.
6. —, *Conical diffraction by periodic structures: Variation of interfaces and gradient formulas*, WIAS-Preprint No. 586, 2000.
7. —, *Inverse scattering for periodic structures: Stability of polygonal interfaces*, eingereicht.
8. G. BRUCKNER, J. CHENG, M. YAMAMOTO, *Uniqueness of determining a periodic structure from discrete far field observations*, WIAS-Preprint No. 605, 2000.
9. —, *An inverse problem of diffractive optics: Conditional stability*, in Vorbereitung.

Optimierungsprobleme mit zufälligen und nichtglatten Daten

Bearbeiter: R. Henrion, A. Möller

Kooperation: W. Römisch (Humboldt-Universität (HU) zu Berlin), G. Wozny (Technische Universität (TU) Berlin), T. Szántai (Technische Universität Budapest, Ungarn), J. Outrata (Institute of Information Theory and Automation (UTIA) Prag, Tschechische Republik), A. Jourani (Université de Bourgogne, Dijon, Frankreich), J. Bukszár (Universität Miskolc, Ungarn)

Förderung: DFG-Schwerpunktprogramm „Echtzeitoptimierung großer Systeme“

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

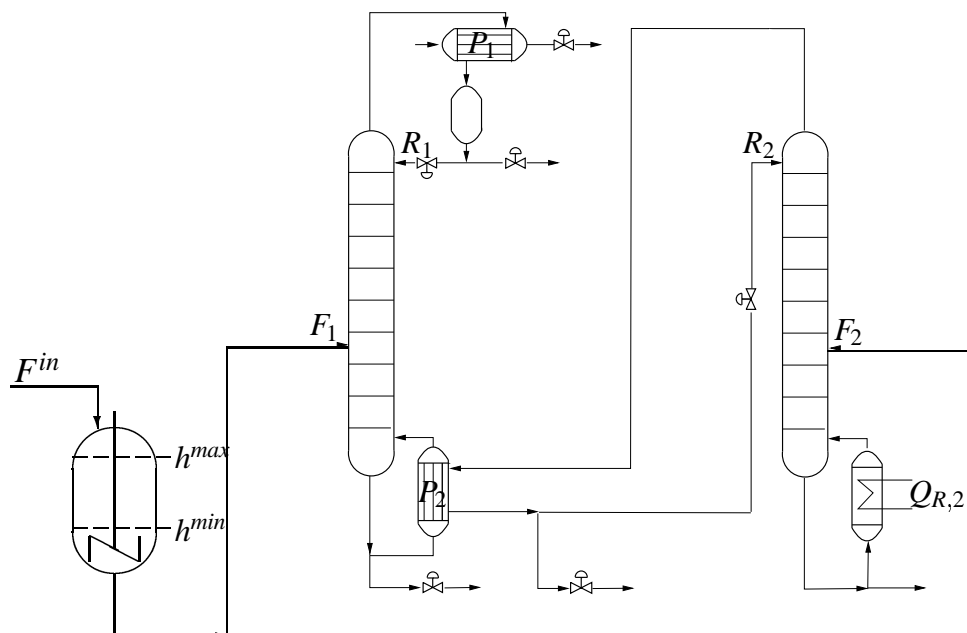


Abb. 1: Fließbild der Versuchsanlage im Parallelbetrieb.

Als Konsequenz werden folgende Restriktionen des entstehenden Optimierungsmodells stochastisch: die *Produktspezifikationen* (Mindestreinheiten, in denen die Bestandteile des zu trennenden Gemisches am Kolonnenkopf bzw. im Sumpf vorliegen), die *Feed-Tank-Restriktionen* (Verhinderung des Voll- oder Leerlaufens des Tanks, siehe Abb. 1) sowie *Zyklusrestriktionen* (Vermeidung einer Optimierung zulasten nachfolgender Planungszeiträume). Um zu behandelbaren Nebenbedingungen zu gelangen, wird im Sinne der angestrebten Robustheit der Fahrweise verlangt, dass

die Restriktionen entsprechend der Zufallsverteilung des stochastischen Parameters mit einer vorgegebenen Mindestwahrscheinlichkeit einzuhalten sind (Wahrscheinlichkeitsrestriktionen).

Die Tätigkeit im Berichtszeitraum umfasste zum einen die Anwendung der entwickelten Verfahren auf reale Anlagen-Daten und zum anderen die Erweiterung der Modellklasse für die stochastische Zuflussrate zum Feed-Tank. Rechenergebnisse für verschiedene Typen simulierter Zufluss-Prozesse wurden in [4] beschrieben. In [6] und [7] wurden Strukturaussagen zu „storage level constraints“ abgeleitet, womit als Spezialfall insbesondere die im vorliegenden Projekt entscheidenden Füllstandsrestriktionen des Feed-Tanks inbegriffen sind. Für die Annahme eines beliebigen deterministischen Zufluss-Prozesses mit stochastischem Startzeitpunkt konnten explizite Restriktionsbeschreibungen erhalten werden, die im kommenden Berichtszeitraum implementiert werden sollen. Werden neben dem Startzeitpunkt noch weitere Lageparameter des Zufluss-Prozesses (etwa Dauer, Intensität) als zufällig angenommen, so ergeben sich im Allgemeinen schwer zu behandelnde implizite Wahrscheinlichkeitsrestriktionen. Vorarbeiten zur Einbeziehung dieses Falles wurden während des Gastaufenthaltes von J. Buzsár (Universität Miskolc) durchgeführt. Ziel der weiteren Zusammenarbeit ist eine Ausnutzung der in [1] beschriebenen effizienten Wahrscheinlichkeitsschranken bei der Evaluierung konvexer Wahrscheinlichkeitsrestriktionen und deren Gradienten.

Aus der konkreten Problemstellung des Projekts ergeben sich theoretische Fragestellungen im Zusammenhang mit Optimierungsproblemen bei zufälligen und nichtglatten Daten. Untersuchungen zur qualitativen und quantitativen Lösungsstabilität in Optimierungsproblemen mit Wahrscheinlichkeitsrestriktionen finden sich in [2] und [3]. In [5] wurde in Kooperation mit J. Outrata (UTIA Prag) eine subdifferentielle Charakterisierung der „Calmness“-Eigenschaft mengenwertiger Abbildungen in endlichdimensionalen Räumen hergeleitet. Hiermit ist es möglich, notwendige Optimalitätsbedingungen, aber auch Konditionierungsbedingungen für Zielfunktionen abzuschwächen, woraus sich potentielle Anwendungen in der stochastischen Optimierung oder bei Komplementaritätsproblemen ergeben. Möglichkeiten und Grenzen einer Verallgemeinerung auf den unendlichdimensionalen Fall wurden im Laufe von Arbeitsbesuchen bei J. Outrata (UTIA Prag) und A. Jourani (Université de Bourgogne, Dijon) diskutiert.

Literatur

1. J. BUKSZÁR, A. PRÉKOPA, *Probability bounds with cherry trees*, erscheint in: Math. Oper. Res.
2. R. HENRION, *Qualitative stability of convex programs with probabilistic constraints*, in: Optimization (V. H. Nguyen, J.-J. Strodiot, P. Tossings, Hrsg.), Lecture Notes in Econom. and Math. Systems, **481**, Springer, New York, 2000, pp. 164–180.
3. R. HENRION, W. RÖMISCH, *Stability of solutions to chance constrained stochastic programs*, in: Parametric Optimization and Related Topics V (J. Guddat et al., Hrsg.), Peter Lang, Frankfurt a. M., 2000, pp. 95–114.
4. R. HENRION, A. MÖLLER, *Optimization of a continuous distillation process under random inflow rate*, Preprint No. 00-4, DFG-Schwerpunktprogramm „Echtzeit-Optimierung großer Systeme“, Berlin, 2000, eingereicht.
5. R. HENRION, J. OUTRATA, *A subdifferential criterion for the calmness of multifunctions*, WIAS-Preprint No. 553, 2000, erscheint in: J. Math. Anal. Appl.

6. R. HENRION, *Structure and stability of probabilistic storage level constraints*, Preprint No. 23, Stochastic Programming Eprint Series (SPEPS), 2000, eingereicht.
7. —, *A note on the connectedness of chance constraints*, Preprint No. 21, Stochastic Programming Eprint Series (SPEPS), 2000, eingereicht.

Numerische Verfahren zur Parameterschätzung bei Pasten und zur Formoptimierung

Bearbeiter: V. Schulz

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

Förderung: BMBF: „Numerische Verfahren zur Parameterschätzung bei Pasten und zur Formoptimierung“ (03WI7HE1/8)

Pasten werden meist in Extrudern zu Strangprodukten geformt. Die Qualität des Stranges hängt dabei erheblich vom Geschwindigkeitsfeld, dem die Strömung während des Presswerkzeugdurchgangs unterliegt, und den dadurch induzierten Spannungen ab. Die Nicht-Newton'sche Strömung in Presswerkzeugen lässt sich in vielen Fällen als wandgleitende Bingham-Strömung modellieren. Die Aussagefähigkeit der numerischen Rechnungen wird jedoch entscheidend beeinflusst von den verwendeten Stoffparametern. Die experimentelle Bestimmung dieser Stoffgrößen, die die Grundlage für eine sinnvolle Auslegung vieler Prozessstufen und den Ausgangspunkt für eine Qualitätsprüfung der Pasten darstellt, ist mit herkömmlichen Methoden nur bedingt möglich. Von zentralem Interesse sind Versuchsanordnungen, die es erlauben, sämtliche rheologischen Parameter der untersuchten Paste in einem Versuchsaufbau als Lösung eines Inversen Problems zu bestimmen. Da hierbei keine analytischen Näherungen (herkömmliches Vorgehen) zum Einsatz kommen können, sind numerische Methoden nötig, die eine modellgestützte Parameterschätzung, bei beliebiger Messdüsengeometrie, ermöglichen.

Bingham-Materialien gehören zur Klasse der Nicht-Newton'schen Fluide. Diese unterscheiden sich von Newton-Fluiden dadurch, dass ihre Zähigkeit vom augenblicklichen Fließzustand abhängt. In technischen Prozessen zeigen diese viskoplastischen Fluide eine weitere Eigenschaft, die in der Rheologie als Wandgleiten bekannt ist. Damit wird ein Phänomen beschrieben, das auf reibungsbedingte Strukturveränderungen des Materials zurückgeführt werden kann. Beide Gesetzmäßigkeiten werden durch Gleichungen beschrieben, die von a priori unbekanntem Parametern abhängen. Diese Systemparameter sollen aus Druckmessungen am Strömungsrand bestimmt werden (vgl. Abb. 1 zum Messaufbau).

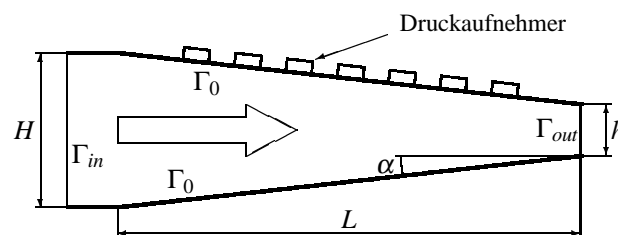


Abb. 1: Messaufbau zur Parameterschätzung bei Pasten.

Als Lösungszugang wird der Output-least-squares-Ansatz gewählt, der den Vorteil hat, auch eine statistische Interpretation und Bewertung der erhaltenen Parameterschätzung über die Berechnung einer Kovarianzmatrix der geschätzten Parameter zu ermöglichen.

Als Lösungsverfahren für den Diskretisierungsanteil haben wir aufgrund seiner optimalen Komplexität ein Mehrgitterverfahren in einer nichtlinearen Variante verwendet ([1]). Zur Lösung der Parameterschätzprobleme wird im Rahmen des Simultanoptimierungsansatzes eine reduzierte SQP-Variante eingesetzt, die berücksichtigt, dass die linearen Teilprobleme nur inexakt gelöst

werden ([2]). Zur Lösung dieses Optimierungsproblems ist für eine einfache 2D-Konfiguration ein erstes SQP-Verfahren implementiert worden (vgl. Abb. 1).

Ein weiteres Ziel des Projektes ist es, durch Geometrieänderung die Identifizierbarkeit aller unbekanntem Modellparameter sicherzustellen. Hierfür wird die Zuverlässigkeit der Parameterschätzung, also ein Funktional der oben erwähnten Kovarianzmatrix optimiert ([3], [4]). Abbildung 2 zeigt eine bezüglich der durchschnittlichen Kovarianz der Parameter optimierte Messdüsengeometrie.

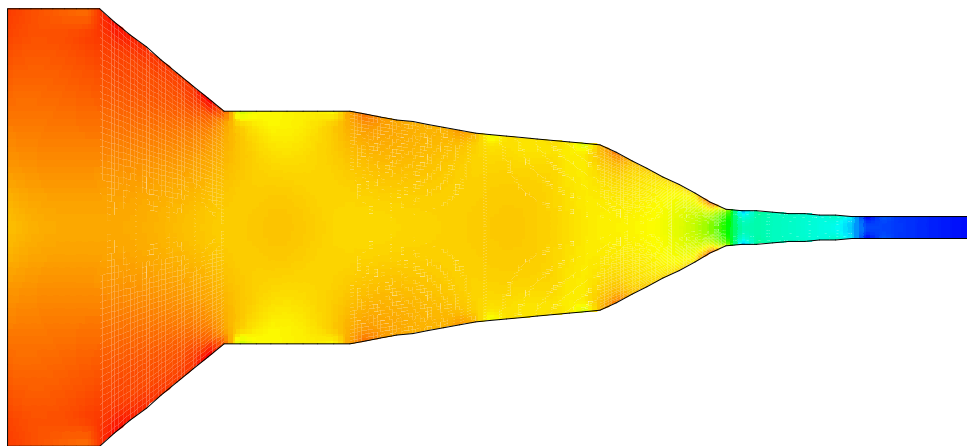


Abb. 2: A-optimale Messdüse.

Als Ergebnis dieses Vorhabens steht nun zum einen ein praktisch einsetzbares Software-Werkzeug zur Verfügung, das es erstmals ermöglicht, die Stoffparameter von Bingham-Fluiden simultan aus Messdaten *eines* Experimentdurchgangs zu schätzen. Zum anderen wurden Methoden entwickelt, mit denen sich die optimale Messdüsengeometrie berechnen lässt, so dass die zu bestimmenden Pasten-Stoffgrößen mit Hilfe der entwickelten Software statistisch möglichst sicher aus Messdaten geschätzt werden können.

Literatur

1. B. MAAR, *Nicht-Newton'sche Fluide — Mehrgitterverfahren für Bingham-Strömungen*, Dissertation, Universität Stuttgart, 1997.
2. G. WITTUM, V. SCHULZ, B. MAAR, D. LOGASHENKO, *Numerical methods for parameter estimation in Bingham fluids*, eingereicht.
3. D. LOGASHENKO, B. MAAR, V. SCHULZ, G. WITTUM, *Optimal geometrical design of Bingham parameter measurement devices*, in: Proceedings of Fast Solution of Discretized Optimization Problems, May, 8–12, 2000 (K.-H. Hoffmann, R. H. W. Hoppe, V. Schulz, Hrsg.), Internat. Ser. Numer. Math., Birkhäuser, Basel, erscheint 2001.
4. —, *Parameter estimation and optimal geometrical design for Bingham measurement devices*, eingereicht.

Bahnplanung für Industrieroboter und Menschmodelle

Bearbeiter: I. Bremer, V. Schulz

Kooperation: ein schwäbisches Softwarehaus für Produktionsplanung, M. Steinbach (Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin)

Der Aufbau virtueller Produktionsanlagen ermöglicht eine präzise Anlagenplanung verbunden mit einer erhöhten Kostensicherheit beim anschließenden Bau dieser Anlagen. In diesem Arbeitsfeld des Industriepartners wurden Methoden entwickelt zur Bahnplanung von Roboter- und Menschmodellen, die bei der Automobilproduktion auch miteinander interagieren sollen. Aufgrund des Online-Einsatzes im Rahmen eines virtuellen Produktionssimulations- und Planungstools und der Tatsache, dass beim praktischen Einsatz immer deutlich mehr als nur ein einzelner Roboter betrachtet werden müssen, standen hierbei Echtzeitgesichtspunkte im Vordergrund.

Im Bereich der Bahnplanung von Robotern wurde zunächst ein schneller Algorithmus für die inverse Kinematik des Mehrkörpersystems Roboter entworfen und implementiert. Für die Bahnplanung wurden gegenüber dem in [1], [2] dargestellten Stand der Technik zur optimalen Offline-Bahnplanung komplexitätsreduzierende Techniken entwickelt, um dem Echtzeitaspekt und aus praktischen Erwägungen speziell gewählten Parametrisierungen gerecht zu werden.

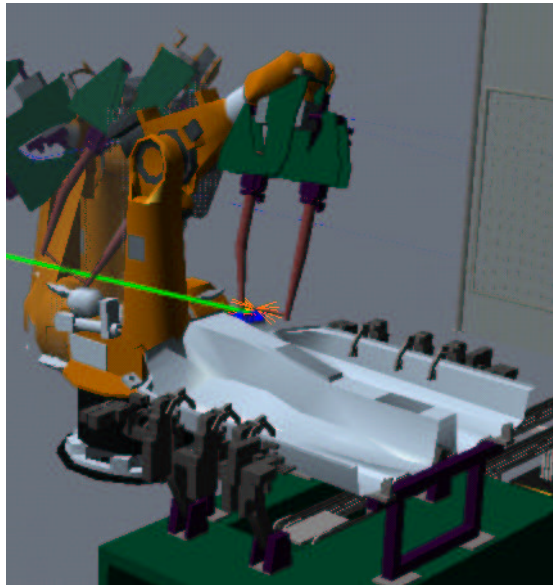


Abb. 1: Roboter bei der virtuellen Fahrt zum Schweißpunkt.

Die Bahnplanung von Menschmodellen wird bereits im Bereich der „inversen Kinematik“ deutlich anspruchsvoller, da beispielsweise die Endposition und -ausrichtung einer Hand durch die Arm- und Rumpfgelenke überparametrisiert ist. Zur Behebung dieses prinzipiellen Problems wurden heuristische Ergonomiefunktionale verwendet, um das Problem der inversen Menschkinematik durch einen Optimierungszugang zu lösen. Die Bahnplanung des Menschmodells wurde in einem ersten Ansatz analog zu den Robotermodellen implementiert. In dem weiteren, praktisch sehr relevanten Aspekt der Kollisionsvermeidung wurden erste Voruntersuchungen unternommen.

Literatur

1. H. G. BOCK, J. P. SCHLÖDER, M. C. STEINBACH, H. WÖRN, V. H. SCHULZ, R. W. LONGMAN, *Schnelle Roboter am Fließband: Mathematische Bahnoptimierung in der Praxis*, in: *Mathematik — Schlüsseltechnologie für die Zukunft* (K.-H. Hoffmann, W. Jäger, Th. Lohmann, H. Schunck, Hrsg.), Springer, Berlin, Heidelberg, 1997, pp. 539–550.
2. M. C. STEINBACH, H. G. BOCK, G. V. KOSTIN, R. W. LONGMAN, *Mathematical optimization in robotics: Towards automated high speed motion planning*, *Surveys Math. Indust.*, **7** (1998), No. 4, pp. 303–340.

Optimierung und Filterdesign

Bearbeiter: J. Tseng, V. Schulz

Kooperation: K. L. Teo (Hong Kong Polytechnic University, China), A. Cantoni (University of Western Australia), Z. Zang (Australian Telecommunications Research Institute), R. H. W. Hoppe, S. I. Petrova (Universität Augsburg)

Das Design von Filtern zur Signalverarbeitung kann häufig aufgefasst werden als beschränktes nichtlineares Optimierungsproblem. Hier wurde zunächst *envelope-constrained filtering* untersucht. Dabei wird das Design eines zeitlich invarianten Filters gesucht mit Impulsantwort $u(t)$, um ein Input-Signal $s(t)$ zu verarbeiten, das durch additives Rauschen gestört wird. Es ist das Ziel, einen Filter zu bestimmen mit minimaler L^2 -Norm, wobei der rauschfreie Output bezüglich des Input-Signals innerhalb einer vorgeschriebenen Umgebung liegen soll, die durch untere und obere Schranken beschrieben wird.

Diese Aufgabenstellung lässt sich in Form eines linear-quadratischen Programms formulieren.

$$\begin{aligned} \min \quad & \|u\|_2^2 \\ \text{subject to} \quad & \varepsilon^-(t) \leq \psi(t) \leq \varepsilon^+(t), \forall t \in [0, \infty), \end{aligned}$$

wobei $\psi(t) = \int_0^\infty u(\tau)s(t-\tau)d\tau$. Für den Online-Einsatz sind Standard-QP-Solver zur Lösung dieses Optimierungsproblems nur bedingt geeignet. Daher wurde ein adaptiver Algorithmus entwickelt, der auf geeigneten Transformationsoperatoren und dem Einsatz des Gradientenflusses basiert ([1], [2], [3]).

Aufbauend auf diesen Vorarbeiten zur iterativen Lösung linear-quadratischer Optimierungsprobleme wurde mit Untersuchungen zur effizienten iterativen Lösung hochdimensionaler QP-Teilprobleme in SQP-Verfahren für nichtlineare diskretisierte Optimierungsprobleme begonnen. Den Ausgangspunkt stellen hierbei in [4] erzielte Ergebnisse zur Topologieoptimierung bei Hochleistungselektronik-Bauelementen dar.

Literatur

1. C. H. TSENG, K. L. TEO, A. CANTONI, *Gradient flow approach to discrete-time envelope-constrained filter design via orthonormal filters*, IEE Proceedings — Vision, Image and Signal Processing, **147** (2000), No. 1, pp. 79–88.
2. C. H. TSENG, K. L. TEO, A. CANTONI, Z. ZANG, *Envelope-constrained filters: Adaptive algorithms*, IEEE Trans. Signal Processing, **48** (2000), No. 6, pp. 1597–1608.
3. —, *Design of robust envelope-constrained filter with orthonormal bases*, IEEE Trans. Signal Processing, **48** (2000), No. 10, pp. 2881–2891.
4. R. H. W. HOPPE, S. I. PETROVA, V. H. SCHULZ, *A primal-dual Newton-type interior-point method for topology optimization*, Technical Report No. 424, Institut für Mathematik, Universität Augsburg, 2000, eingereicht.

Parameterschätzung bei Mehrphasenströmungen

Bearbeiter: V. Schulz

Kooperation: S. B. Hazra, G. Wittum (Universität Heidelberg)

Förderung: DFG: „Inverse Modellierung von Strömungs- und Transportvorgängen im heterogenen Untergrund auf der Basis von Mehrgitterverfahren“

Mehrphasenströmungen spielen eine große Rolle z. B. bei Problemen der Schadstoffentsorgung im Untergrund. Die zugrunde liegenden mathematischen Modelle werden in Form instationärer nichtlinearer partieller Differentialgleichungen formuliert, in die empirische Beziehungen eingehen. Beispielsweise wird die benötigte Kapillardruck-Sättigung-Beziehung durch einen Brooks-Corey-Ansatz beschrieben, bei dem zwei konstitutive Parameter, der Eindringdruck p_d und ein weiterer BC-Parameter λ , a priori unbekannt sind und sich auch nicht aus anderen Beziehungen ableiten lassen. Um realitätsnahe Simulationsrechnungen über den Erfolg geplanter In-situ-Remediationsmaßnahmen durchführen zu können, ist die Schätzung solcher Parameter aus direkt zugänglichen anderweitig gemessenen Größen essentiell. Hier sollen sie aus punktwisen Messungen des Kapillardrucks zu verschiedenen Zeitpunkten gewonnen werden. Zur Durchführung der Parameterschätzung wird ein Output-least-squares-Problem in Form eines Optimierungsproblems mit PDE-Beschränkungen formuliert. Dies führt vor allem auf zwei Problempunkte: die Hochdimensionalität der diskretisierten Optimierungsprobleme und deren Nichtlinearität. Da bekanntermaßen Einzelschießansätze zu numerischen Instabilitäten führen, wird ein Mehrzielverfahren entwickelt, bei dem aufgrund der Tatsache, dass es sich nicht um eine gewöhnliche Differentialgleichung, sondern um eine instationäre partielle Differentialgleichung handelt, als Spezifikum eine schwache Formulierung der Stetigkeitsbedingungen gewählt wird. Um die Hochdimensionalität des Problems zu beherrschen, wird ein reduzierter Gauß-Newton-Zugang angewendet, bei dem die Ableitungsberechnungen im Sinne der Internen Numerischen Differentiation gleichzeitig mit den nötigen Vorwärtsrechnungen durchgeführt werden. Beispielhaft wird in [1] das McWhorter-Problem betrachtet und hier eine Schätzung der oben genannten Parameter erzielt nach etwa sieben nichtlinearen Iterationen. Abbildung 1 zeigt den Verlauf des Kapillardrucks über die Zeit an den ausgewählten Messstellen zu Beginn der Rechnung (links) und am Ende (rechts). Der Multiple-Shooting-Optimierungsalgorithmus wurde im Rahmen der in Heidelberg entwickelten PDE-Software-Toolbox *ug* implementiert.

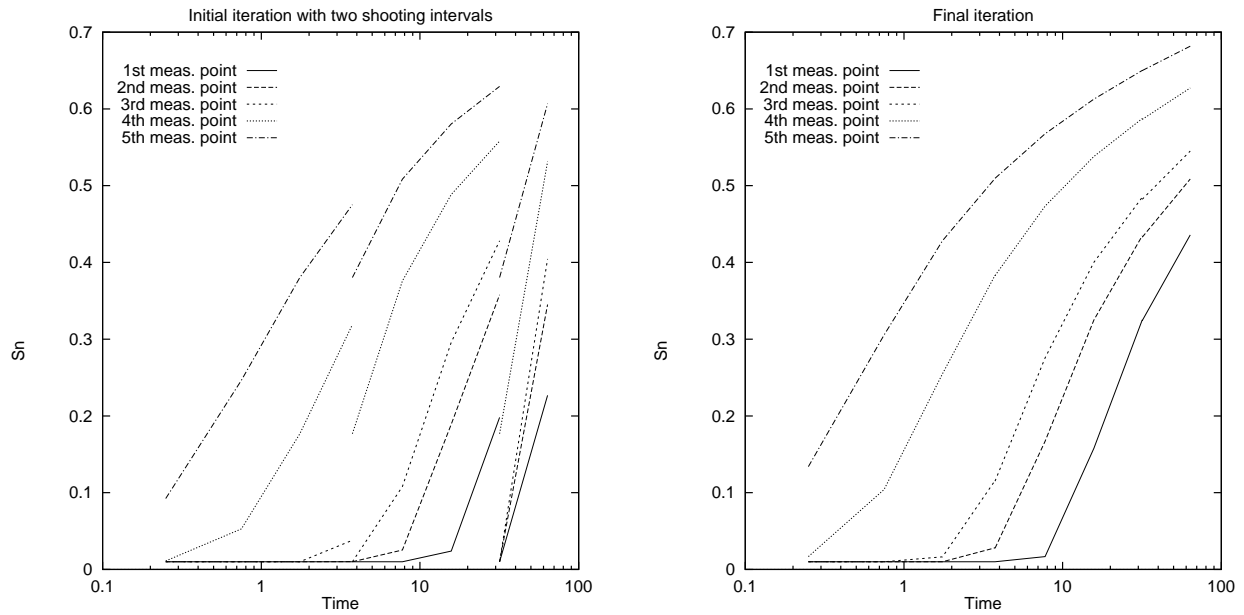


Abb. 1: Kapillardruck an Messpunkten.

Literatur

1. S. B. HAZRA, V. H. SCHULZ, *Numerical parameter identification in multiphase flow through porous media*, eingereicht.

Adaptive Multiskalenmethoden zur Lösung von Randelementmethoden

Bearbeiter: A. Rathsfeld

Kooperation: R. Schneider, M. Konik (Technische Universität Chemnitz)

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

Der komplizierteste und aufwendigste Teil des Waveletalgorithmus besteht in der Aufstellung der komprimierten Matrix des linearen Gleichungssystems mittels Quadraturalgorithmus. Zu diesem Punkt gibt es recht wenig theoretische Untersuchungen. Während v. Petersdorff, Schwab und Schneider ([2], [5]) Algorithmen nur für stückweise analytische Daten und Geometrie entwickelt haben, konnten wir in [1] ein erstes Verfahren vorstellen für den Fall von Randmannigfaltigkeiten mit endlichem Glattheitsgrad und für Kernfunktionen, die sich als Produkt von Funktionen mit endlichem Glattheitsgrad mal Funktion mit der typischen Singularität der Pseudodifferentialoperatoren darstellen lassen. Die Reduktion der Glattheitsvoraussetzungen erschließt neue Anwendungsmöglichkeiten für die schnellen Waveletalgorithmen, wo alternative Methoden wie das schnelle Multipolverfahren oder das Panelclustering nicht mehr zur Verfügung stehen.

In diesem Jahr haben wir zwei neue Verfahren entwickelt. Dabei ist es uns in [4] gelungen, einen Quadraturalgorithmus zur Kollokation für Integraloperatoren der Ordnung null und minus eins zu entwickeln, der nur auf der Calderón-Zygmund-Abschätzung der Kernfunktion basiert. Letztere Abschätzung ist die fundamentale Voraussetzung, die schon für den Kompressionsschritt unabdingbar ist. In einem zweiten Verfahren (siehe [3]) haben wir uns der vollständigen Diskretisierung des Wavelet-Galerkin-Verfahrens für Einfachschichtpotentialgleichungen zugewandt. Wir konnten fast optimale Konvergenzraten für den Fehler herleiten, und im Vergleich mit [1] konnte die Glattheitsvoraussetzung an den Kern $K(P, Q) = f(P, Q, [P - Q]/|P - Q|)|P - Q|^{-1}$ auf die stetige Differenzierbarkeit endlicher Ordnung für die Charakteristik $(P, Q, \Theta) \mapsto f(P, Q, \Theta)$ reduziert werden. Die numerischen Tests zu diesem Verfahren werden voraussichtlich im nächsten Jahr abgeschlossen.

Literatur

1. S. EHRICH, A. RATHSFELD, *Piecewise linear wavelet collocation on triangular grids, Approximation of the boundary manifold and quadrature*, erscheint in: Electron. Trans. Numer. Anal., 2001.
2. T. V. PETERSDORFF, C. SCHWAB, *Fully discrete multiscale Galerkin BEM*, in: Multiresolution Analysis and PDE (A. J. Kurdila, P. Oswald, Hrsg.), Wavelet Analysis and its Applications, Academic Press, San Diego, CA, 1997, pp. 287–346.
3. M. KONIK, A. RATHSFELD, R. SCHNEIDER, *A quadrature algorithm for wavelet Galerkin methods*, in Vorbereitung.
4. A. RATHSFELD, R. SCHNEIDER, *On a quadrature algorithm for the piecewise linear wavelet collocation applied to boundary integral equations*, Preprint No. 00-15, SFB 393, Technische Universität Chemnitz, 2000.

5. R. SCHNEIDER, *Multiskalen- und Waveletkompression: Analysisbasierte Methoden zur effizienten Lösung großer vollbesetzter Gleichungssysteme*, Habilitationsschrift, Adv. in Numer. Math., Teubner, Stuttgart, 1998.

Integralgleichungsmethoden für Probleme der mathematischen Physik**Bearbeiter:** J. Niebsch, G. Schmidt**Kooperation:** V. Maz'ya, T. Ivanov (Universität Linköping, Schweden)**Förderung:** INTAS

Die Untersuchungen zum Konvergenzverhalten von Zeitschrittverfahren zur Lösung von nicht-linearen Evolutionsgleichungen mit nichtlokalen Operatoren, die auf einer von V. Maz'ya vorgeschlagenen Approximationsmethode für Integraloperatoren beruhen ([3] enthält einen Überblick dieser Methode), wurden abgeschlossen. Die Ergebnisse sind in der Dissertation von J. Niebsch ([1]) enthalten, die Ende 2000 eingereicht wurde.

Zur Kubatur von Integraloperatoren über beschränkten Gebieten wurde in Zusammenarbeit mit V. Maz'ya und T. Ivanov ein neuer Zugang entwickelt, der auf der exakten Integration solcher Operatoren im Halbraum basiert. Anwendungen auf die Lösung von Integralgleichungen vom Typ der Lippmann-Schwinger-Gleichung, die mehrdimensionale Streuprobleme beschreibt, werden in [2] untersucht. Dabei handelt es sich um ein Kollokationsverfahren. Als Ansatzfunktionen werden Gaußfunktionen benutzt, die am Rand des Gebiets modifiziert werden. Numerische Tests an eindimensionalen Beispielen zeigen verschiedene Vorteile dieses Integralgleichungszugangs. Da sich z. B. die Integrale der Ansatzfunktionen exakt berechnen lassen, erfüllt die Näherungslösung exakt die Ausstrahlungsbedingungen und besitzt die gleiche Wellenzahl wie die analytische Lösung. Das Verfahren hat hinsichtlich des Konvergenzverhaltens ähnliche Eigenschaften wie Spektralmethoden, so dass selbst bei hoher Wellenzahl schon relativ grobe Diskretisierungen gute Approximationslösungen liefern.

Literatur

1. J. NIEBSCH, *Zur numerischen Lösung von Evolutionsgleichungen mit nichtlokalen Operatoren auf der Basis approximativer Approximationen*, Dissertation, Universität Bremen, eingereicht, 2000.
2. V. MAZ'YA, G. SCHMIDT, *Numerical solution of integral equations for diffraction problems*, in Vorbereitung.
3. G. SCHMIDT, *Approximate Approximations and their applications*, in: The Maz'ya Anniversary Collection, Vol. 1 (J. Rossmann, P. Takác, G. Wildenhain, Hrsg.), Oper. Theory Adv. Appl., **109**, Birkhäuser, Basel, 1999, pp. 111–136.

4.5 Forschungsgruppe Stochastische Systeme mit Wechselwirkung

4.5.1 Zusammenfassung

Entsprechend der im Forschungsprogramm aufgestellten Leitlinien wurde im Berichtsjahr vor allem die Thematik „Stochastische Dynamik“ weiter verstärkt. Dabei wurden einige grundlegende Resultate erzielt, die der Gruppe in diesem Bereich eine starke Stellung sichern werden. Besonders erfreulich ist hierbei auch die sich abzeichnende direkte Relevanz im Bereich der Moleküldynamik, die viele interessante Kollaborationen für die Zukunft verspricht. In diesem Zusammenhang beteiligen wir uns an einer neuen SFB-Initiative.

Im Rahmen der Doktorandenausbildung wurde im Herbst eine Promotion erfolgreich abgeschlossen; zum Jahresende betreute die Forschungsgruppe nunmehr drei Doktoranden, von denen einer über das Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, die beiden anderen ganz oder teilweise durch DFG-Projekte finanziert werden. Weiterhin arbeiteten zwei Postdoktoranden aus dem Graduiertenkolleg in Projekten der Forschungsgruppe mit, eine weitere Projektstelle wurde von der DFG finanziert. Damit erreicht die Gruppe in etwa eine Verdoppelung ihres personellen Effektivs über fremdfinanzierte Mitarbeiter.

Herauszustellen ist im Berichtsjahr die Beteiligung von Mitgliedern der Forschungsgruppe an der Organisation großer Tagungen als Sektionsleiter. Dies betrifft die „Hamburger Stochastik-Tage“, den „5th World Congress of the Bernoulli Society and 63rd Annual Meeting of the Institute of Mathematical Statistics“ in Guanajuato, Mexiko, sowie die „International Conference on Monte Carlo and Probabilistic Methods for Partial Differential Equations“, Monte Carlo, Monaco. Daneben richtete die Forschungsgruppe gemeinsam mit der FG 6 am WIAS eine Tagung zu „Stochastic Models for Turbulent Transport Processes“ aus und war zum wiederholten Male Gastgeber eines Kolloquiums des DFG-Schwerpunktprogramms „Interagierende Stochastische Systeme von hoher Komplexität“.

Über die interessantesten wissenschaftlichen Ergebnisse des Jahres wird im Folgenden näher berichtet.

4.5.2 Projekte

Tieftemperaturphasen in Modellen mit langreichweitiger Wechselwirkung

Bearbeiter: A. Bovier, C. Külske

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

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

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

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

Ein weiterer wichtiger technischer Schritt in der Analyse ungeordneter Kac-Modelle betrifft eine erste Block-Spin-Transformation, die nötig wird, wenn man die strukturelle Nähe zu Mean-Field-Modellen herausarbeiten will. In der Arbeit [3] wurde speziell das Random-Field-Kac-Ising-Modell behandelt. Es wurden die *Gibbs-Eigenschaften* der „renormierten“ Maße untersucht, die aus den möglichen Kac-Gibbs-Maßen durch Blockmittlungs-Transformation hervorgehen, wobei die Blocklänge hinreichend klein ist verglichen mit der Reichweite der Wechselwirkung. Dabei wurde gezeigt, dass diese Maße in der Tat Gibbs-Maße für ein zufälliges Wechselwirkungs-Potential sind, das unabhängig ist von der Wahl des abgebildeten Kac-Gibbs-Maßes. Man erhält dabei auch explizite Abschätzungen an die Größe der nichtlokalen Anteile der Wechselwirkungen, uniform in der Realisierung des Random Fields. Somit ist das Ergebnis sowohl ein nützlicher technischer Zwischenschritt, um die Phasenstruktur des Kac-Modells auf der Ebene der renormierten Maße zu untersuchen, wie auch eine Illustration zur Theorie (Nicht-)Gibbs'scher Maße.

Eine andere Linie der Weiterentwicklung von Entwicklungsmethoden für Tieftemperaturmodelle wird in der Arbeit [4] besprochen. Hier werden (zunächst kurzreichweitige) Modelle mit energetisch niedrig liegenden potentialen Grundzustandskonfigurationen betrachtet, bei denen die Translations-Symmetrie, ebenso wie die Permutations-Symmetrie bezüglich Vertauschung der Spin-Werte, aufgehoben sein dürfen, wohl aber eine uniforme Peierls-Konstante existieren möge. Ein einfaches Beispiel hierfür ist etwa ein Ising-Ferromagnet mit kleiner nichttranslationsinvarianter 3-Spin-Wechselwirkung. In [4] wird nun in Verallgemeinerung der Pirogov-Sinai-Theorie translationsinvarianter Systeme bewiesen, dass es stets lokale Felder $\eta = (\eta_x)_{x \in \mathbb{Z}^d}$ gibt, abhängig vom definierten Wechselwirkungspotential Φ , in deren Anwesenheit sich das System am Punkt der maximalen *Phasen-Koexistenz* befindet. Ferner wird eine detaillierte Untersuchung der Analytizitäts- und Lokalitätseigenschaften der Abbildung $\Phi \mapsto \eta(\Phi)$ gegeben, als Abbildung zwischen den Räumen der Wechselwirkungspotentiale Φ mit fester endlicher Reichweite und dem der beschränkten Felder η .

Literatur

1. A. BOVIER, M. ZAHRADNÍK, *Pirogov-Sinai theory for spin systems with long range interactions*, in Vorbereitung.
2. ———, *A simple inductive approach to the problem of convergence of cluster expansions of polymer models*, J. Statist. Phys., **100** (2000), pp. 765–778.
3. C. KÜLSKE, *On the Gibbsian nature of the random field Kac model under block-averaging*, WIAS-Preprint No. 606.
4. ———, *Non-translational invariant lattice-spin models at phase-coexistence: Analyticity and locality*, in Vorbereitung.

Spin-Gläser und Neuronale Netze

Bearbeiter: A. Bovier, B. Niederhauser (Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“)

Kooperation: I. Kourkova (EURANDOM, Eindhoven, Niederlande und Université Paris VI, Frankreich), M. Löwe (Universität Nijmegen, Niederlande)

Durch eine 1998 als Preprint erschienene Arbeit von M. Talagrand ([1]) rückte eine Klasse *ungeordneter Modelle* in den Vordergrund des Interesses, die bisher weitgehend vernachlässigt worden war, nämlich Modelle mit Mehrkörperwechselwirkung, sog. p -spin-Wechselwirkungen. Talagrand konnte zeigen, dass in der p -spin-Version des Gauß'schen *Sherrington-Kirkpatrick-Modells* für den Fall $p > 2$ rigorose Ergebnisse zum *Spin-Glas-Phasenübergang* bewiesen werden können, die im Fall $p = 2$ noch unerreichbar scheinen, aber ein äußerst interessantes Licht auf diesen Übergang werfen. Dies motivierte uns hinreichend, uns ebenfalls dieser Modellklasse zuzuwenden.

Zunächst widmete sich Beat Niederhauser in seiner Dissertation ([2]) dem Problem, Talagrands Ergebnisse für das SK-Modell auf die entsprechenden Hopfield-Modelle mit p -spin-Wechselwirkung zu übertragen. Nun muss man sehen, dass die Hamiltonfunktion der von Talagrand betrachteten Modelle als *Gauß'scher Prozess* auf einem N -dimensionalen Hyperkubus dargestellt werden kann. Dies ist aber eine sehr spezielle Situation. Es ging uns daher zunächst darum zu sehen, inwieweit Talagrands Resultate von dieser speziellen Eigenschaft abhängen, und welche Methoden entwickelt werden könnten, um in allgemeineren Situationen zum Zuge zu kommen. Im Weiteren ergab sich die Hoffnung, einem seit langem in den Hopfield-Modellen offenen Problem nachgehen zu können, für das sich im $p = 2$ -Fall bisher keine befriedigende Antwort hat finden lassen. So erwartet man nämlich aus heuristischen Überlegungen in diesen Modellen die Existenz einer Spin-Glas-Phase ganz ähnlich derer in den entsprechenden SK-Modellen; insbesondere sollte sich, wenn die Zahl der gespeicherten Patterns groß wird, das Verhalten des Modells immer stärker dem des SK-Modells annähern. Des Weiteren sollten für große Patternzahl die Speichereigenschaften des Modells versagen; beide Erwartungen wurden nun in [2] bestätigt. Technisch ist die Arbeit sehr aufwendig und benötigt komplexe Entwicklungsmethoden.

Ein zweiter interessanter Aspekt der p -spin-Modelle ist die Tatsache, dass sie eine Klasse von Modellen liefern, die vom Standard-SK-Modell bis zum so genannten „*Random-Energy Model*“ (REM) vermitteln. So folgt etwa aus den Ergebnissen in [1] leicht, dass die freie Energie der p -spin-SK-Modelle punktweise gegen die des REM konvergiert, wenn p nach unendlich geht. Mit Kourkova und Löwe haben wir in [3] die Frage aufgegriffen, inwieweit solche Resultate auch auf dem feineren Niveau der zufälligen *Fluktuationen* der Freien Energie gelten. Dazu zeigten wir, dass im p -spin-Modell Fluktuationen der Freien Energie in der Hochtemperaturphase (in der Tieftemperaturphase ist man noch weit davon entfernt, derart feine Effekte zu kontrollieren) nur von der Ordnung $N^{-(p-2)/2}$ sind (p gerade) und dass auf diesem Niveau ein Zentraler Grenzwertsatz gilt. Dies konnte in der Tat für Temperaturen größer als β_p^{-1} bewiesen werden, wobei für $p \uparrow \infty$, $\beta_p \uparrow \sqrt{2 \ln 2}$, den kritischen Wert im REM, strebt. Dies legte nun auch die feinere Untersuchung der Fluktuationen im REM selbst nahe. Dabei zeigte sich, wie zu vermuten, dass die Fluktuationen oberhalb der kritischen Temperatur auf einer exponentiell (in N) kleinen Skala leben, es aber interessanterweise zwei Regime gibt: Oberhalb $\sqrt{\frac{2}{\ln 2}}$ sind die Fluktuationen gaußsch, es gilt ein klassischer Zentraler Grenzwertsatz. Für tiefere Temperaturen

gilt dagegen ein nichtzentraler Grenzwertsatz, die Fluktuationen werden im Wesentlichen durch den Poisson-Prozess der extremalen Ordnungsstatistik getrieben. An der eigentlichen kritischen Temperatur $1/\sqrt{2\ln 2}$ dominieren diese dann auch das fast sichere Verhalten der Freien Energie, d. h. bei diesem Wert endet die Gültigkeit des Gesetzes der Großen Zahlen.

Literatur

1. M. TALAGRAND, *Rigorous low temperature results for the mean field p -spins interaction model*, Probab. Theory Related Fields, **117** (2000), pp. 303–360.
2. B. NIEDERHAUSER, *Mathematical aspects of Hopfield models*, Dissertation, Technische Universität Berlin, 2000.
3. A. BOVIER, I. KOURKOVA, M. LÖWE, *Fluctuations of the free energy in the REM and the p -spin SK-models*, WIAS-Preprint No. 595, 2000, eingereicht.

Stochastische Dynamik

Bearbeiter: A. Bovier, B. Gentz

Kooperation: G. Ben Arous (Ecole Polytechnique Fédérale, Lausanne, Schweiz), N. Berglund (School of Physics, Georgia Institute of Technology, Atlanta, USA und Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Schweiz), V. Gayrard (Centre de Physique Théorique, Marseille, Frankreich und Ecole Polytechnique Fédérale, Lausanne, Schweiz) M. Klein, M. Eckhoff (Universität Potsdam)

Die im Jahresforschungsbericht 1998 beschriebene Thematik der *stochastischen Dynamik* wurde intensiv weiterbetrieben und als thematischer Schwerpunkt ausgebaut, wobei sich sowohl eine Reihe neuer Resultate als auch zahlreiche neue Anwendungsperspektiven eröffnet haben.

Ganz erhebliche Fortschritte für den reversiblen Fall wurden in Richtung auf ein besseres Verständnis des Zusammenhangs zwischen der *Spektraltheorie* einerseits und dem Phänomen der Metastabilität andererseits in der Arbeit [1] erzielt. Diese betreffen auf abstraktem Niveau ganz allgemein Markov-Ketten, deren Zustandsraum in Gebiete zerfällt, zwischen denen Übergänge sehr unwahrscheinlich sind, während andererseits ausgezeichnete Punkte in jedem Gebiet stets „sehr schnell“ besucht werden. Unter zusätzlichen Generizitätsannahmen kann dann jedem solchen Gebiet eine „metastabile“ Austrittszeit τ_i zugeordnet werden, welche dann mit großer Genauigkeit als Inverse eines der Eigenwerte der Übergangsmatrix identifiziert wird. Die zugehörigen Eigenfunktionen liefern darüber hinaus mit hoher Genauigkeit die zugehörigen quasi-invarianten Verteilungen, bzw. metastabilen Maße. Insgesamt wird damit dem Spektrum der Übergangsmatrix nahe bei eins eine präzise physikalische Interpretation gegeben. Alle diese Größen können darüber hinaus durch relative Kapazitäten der Elemente der metastabilen Menge ausgedrückt werden. Damit liegen zum einem unter sehr allgemeinen Bedingungen strukturelle Aussagen vor, die etwa in numerischen Verfahren genutzt werden können ([3]). Andererseits lassen sich über die analytisch recht gut kontrollierbaren Kapazitäten (siehe [2]) in vielen Beispielen präzise asymptotische Resultate beweisen. Daraus ergeben sich für zahlreiche Probleme der stochastischen Dynamik neue Perspektiven. Dem wird in den kommenden Jahren intensiv nachgegangen werden.

Die ursprüngliche Motivation dieser Arbeiten bestand darin, Methoden bereitzustellen, mit denen auch die Besonderheiten der Dynamik komplexer *ungeordneter Systeme* analysiert werden können. Von besonderem Interesse sind hier Systeme, die das Phänomen des „Alterns“ aufweisen. In Kollaboration mit Ben Arous und Gayrard ([4]) haben wir uns nunmehr dieser Problematik angenommen, wobei als erster Schritt das in der physikalischen Literatur als paradigmatisch angesehene *Random-Energy Model* (REM) betrachtet wurde. Die Schwierigkeiten, die hier auftreten, beruhen darauf, dass die in [1] gemachten Generizitätsannahmen an die Menge der metastabilen Zustände gewissermaßen in maximaler Weise verletzt sind. So sind nämlich die Austrittszeiten aus den einzelnen metastabilen Zuständen nicht wohlsepariert, sondern eine unendliche Zahl metastabiler Zustände koexistiert auf einer Zeitskala, und es gibt keine scharfe Trennung dieser Zustände vom Rest. Diese Tatsache ist nicht nur typisch, sondern geradezu kausal für das *Altern*. Ziel ist nun die analytische Kontrolle der effektiven Dynamik auf dieser Zustandsmenge. Dabei zeigt sich, dass in der Tat die in [1], [2] entwickelten Techniken die wesentlichen Voraussetzungen zur Lösung des Problems liefern.

Eine weitere relevante Fragestellung betrifft den Einfluss von stochastischen Störungen auf *nichtautonome dynamische Systeme*. In einer ersten Arbeit ([5]) wurde ein System mit Pitchfork-

Bifurkation untersucht. Als interessanter Effekt ergibt sich hier die Reduktion der so genannten *Bifurkationsverzögerung*, die sich etwa im Experiment störend auf Messungen des Bifurkationspunktes auswirkt. Ein zweiter, derzeit in der physikalischen Literatur viel diskutierter Effekt ist die so genannte *stochastische Synchronisation* oder *stochastische Resonanz*. Hier betrachtet man periodisch getriebene dynamische Systeme, bei denen aber ohne weitere Störung noch kein Wechsel des Gleichgewichtszweiges stattfinden kann. Unter dem Einfluss geeignet gewählter stochastischer Störungen kann es nun aber zu einer Verstärkung der periodischen Störung kommen, die zu (periodischen) Übergängen zwischen Gleichgewichten führt. Dieses Phänomen ist von großer Relevanz etwa für die Analyse von Energiebilanzmodellen in der Klimatologie. Eine Arbeit hierzu für den Fall eines periodisch modulierten „double-well“-Potentials ist fast abgeschlossen ([6]). Dabei wurde wiederum der Zugang aus [5] gewählt, um das typische pfadweise Verhalten des Prozesses zu kontrollieren. Bemerkenswert an diesen Resultaten ist, dass im Gegensatz zu früheren (siehe etwa [7]) auch Rauschniveaus betrachtet werden können, die nicht so klein sind, dass Methoden der „Großen Abweichungen“ greifen. Ebenso werden unnatürliche Annahmen, wie die stückweise konstante Zeitabhängigkeit, vermieden. Für die Zukunft verspricht diese Zugangsweise noch vielfältige, auf Anwendungsprobleme zugeschnittene Resultate.

Literatur

1. A. BOVIER, M. ECKHOFF, V. GAYRARD, M. KLEIN, *Metastability and low-lying eigenvalues for reversible Markov chains*, WIAS-Preprint No. 600, eingereicht.
2. —, *Metastability in stochastic dynamics of disordered mean-field models*, *Probab. Theory Related Fields*, **119** (2001), pp. 99–161 (Online-Publikation, Dezember 2000 unter DOI 10.1007/s004400000104).
3. CH. SCHÜTTE, *Conformational dynamics: Modelling, theory, algorithm, and application to biomolecules*, Preprint Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik (ZIB) SC 99-18, 1999.
4. G. BEN AROUS, A. BOVIER, V. GAYRARD, *Aging in the random energy model*, in Vorbereitung.
5. N. BERGLUND, B. GENTZ, *Pathwise description of dynamic pitchfork bifurcations with additive noise*, WIAS-Preprint No. 604, 2000.
6. —, *A sample-paths approach to stochastic synchronization: Stochastic resonance in a double-well potential*, in Vorbereitung.
7. M. FREIDLIN, *Quasi-deterministic approximation, metastability and stochastic resonance*, *Phys. D*, **137** (2000), pp. 333–352.

Gegenseitig katalysierende Verzweigungsstrukturen

Bearbeiter: K. Fleischmann

Kooperation: S. Athreya (University of British Columbia, Vancouver, Kanada), D. A. Dawson (Carleton University Ottawa, Kanada), A. M. Etheridge (University of Oxford, Großbritannien), P. Mörters (Universität Kaiserslautern), C. Mueller (University of Rochester, USA), L. Mytnik (Technion, Haifa, Israel), E. A. Perkins (University of British Columbia, Vancouver, Kanada), V. A. Vatutin (Steklov Mathematical Institute, Moskau, Russland), A. Wakolbinger (Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt), J. Xiong (University of Tennessee, Knoxville, USA)

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

Gegenseitig katalysierende Verzweigungsprozesse beschreiben die Evolution zweier Substanzen, die sich im Raum zufällig bewegen und vermehren, aber auch verschwinden können. Das System ist interaktiv in dem Sinne, dass die Verzweigungsrate jeder Substanz proportional zur lokalen Dichte der anderen Substanz ist. Durch diese Wechselwirkung wird die Grund-Unabhängigkeits-Annahme der Verzweigungstheorie vollständig außer Kraft gesetzt, insbesondere geht auch der bisher so wertvolle Zusammenhang zu Reaktions-Diffusions-Gleichungen verloren. Es sind also teils vollständig neuartige Methoden zur Behandlung dieses Modells notwendig. Das Modell wurde in [1], [2] von Dawson, Perkins und Mytnik begründet, und zwar im eindimensionalen euklidischen Raum \mathbb{R} bzw. im Gitterraum \mathbb{Z}^d . Kontrovers wurde für eine gewisse Zeit diskutiert, ob auch eine nichtentartete \mathbb{R}^2 -Variante eines solchen Modells existiert.

In diesem Jahr ist es nun gelungen ([3]), die nichtentartete *Existenz eines zweidimensionalen Kontinuummodells* $\mathbf{X} = (X^1, X^2)$ gegenseitig katalysierender Verzweigungsprozesse nachzuweisen. Dabei wurde vom erwähnten \mathbb{Z}^2 -Modell ausgegangen, wodurch zugleich dessen asymptotisches Massen-Zeit-Raum-Skalierungsverhalten beschrieben wurde. Auch wurden ursprünglich diskutierte *Paradoxien* aufgeklärt: Der maßwertige Prozess \mathbf{X} besitzt zu jeder fixierten Zeit Dichtefunktionen, die obendrein auf disjunkten Mengen des \mathbb{R}^2 leben. Trotzdem ist eine Wechselwirkung möglich, da die Dichtefunktionen bei der Annäherung an die Grenzschichten explodieren. Wie im Gitterfall überlebt nur eine der Substanzen im Langzeitverhalten. Zunächst wurde nur der erste Teil des *dreiteiligen Projekts* fertiggestellt, insbesondere wurden vorerst nur endliche Maßzustände behandelt. Auch wurde der Eindeutigkeitsnachweis im beschreibenden Martingalproblem noch zurückgestellt. In [4] haben wir eine Einführung in dieses Forschungsgebiet gegenseitig katalysierender Verzweigungsprozesse gegeben und eine Übersicht über die zu erwartenden Ergebnisse zusammengestellt.

Zu den einfacheren *katalytischen Verzweigungsprozessen*, in denen nur eine einseitige Einwirkung eines Katalysators auf einen Reaktanten auftritt, gibt es auch noch viel Interessantes zu tun. Im Falle des stetigen Super-Brown'schen Reaktanten in \mathbb{R} mit stabilen Punktkatalysatoren wurde in diesem Jahr ein in [5] herausgestelltes offenes Problem gelöst: Die unter Massen-Zeit-Raum-Skalierung sich asymptotisch bildenden Cluster sind makroskopisch *isoliert*. Das Manuskript [6] muss noch fertiggestellt werden.

Selbst für räumliche Verzweigungsprozesse im *konstanten Medium* bleibt noch so manches aufzuklären. Nachdem in [7] aufgezeigt wurde, dass im Falle von Teilchenlebenszeiten mit einem Verteilungsindex kleiner als eins in der kritischen Dimension überraschenderweise das übliche lokale Sterben verletzt ist, haben wir nun für diesen Fall die persistente *Konvergenz*

im Langzeitverhalten nachgewiesen und den Grenzwert identifiziert: Der Limes ist ein *Poisson'sches Teilchensystem mit zufälliger Intensität*, die durch eine lokale Dichte im zugehörigen Superprozess im Zeit-Raum-Regime beschrieben wird ([8]). Dabei tritt eine formale Analogie zu katalytischen Verzweigungsprozessen in der kritischen Dimension auf.

Literatur

1. D. A. DAWSON, E. A. PERKINS, *Long-time behavior and coexistence in a mutually catalytic branching model*, Ann. Probab., **26** (1998), No. 3, pp. 1088–1138.
2. L. MYTNIK, *Uniqueness for a mutually catalytic branching model*, Probab. Theory Related Fields, **112** (1998), No. 2, pp. 245–253.
3. D. A. DAWSON, A. M. ETHERIDGE, K. FLEISCHMANN, L. MYTNIK, E. A. PERKINS, J. XIONG, *Mutually catalytic branching in the plane: Finite measure states*, WIAS-Preprint No. 615, 2000.
4. D. A. DAWSON, K. FLEISCHMANN, *Catalytic and mutually catalytic super-Brownian motions*, WIAS-Preprint No. 546, 2000.
5. D. A. DAWSON, K. FLEISCHMANN, *Critical branching in a highly fluctuating random medium*, Probab. Theory Related Fields, **90** (1991), pp. 241–274.
6. D. A. DAWSON, K. FLEISCHMANN, P. MÖRTERS, *The clumping behaviour of super-Brownian motion in a stable catalytic medium*, in Vorbereitung (2001).
7. V. A. VATUTIN, A. WAKOLBINGER, *Spatial branching processes with long individual life times*, Theory Probab. Appl., **43** (1999), No. 4, pp. 620–632.
8. K. FLEISCHMANN, V. A. VATUTIN, A. WAKOLBINGER, *Branching systems with long living particles at the critical dimension*, WIAS-Preprint No. 619, 2000.

Elektronentransport in ungeordneten Materialien

Bearbeiter: A. Liemant

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

In Zusammenarbeit mit L. Brehmer wurden die Untersuchungen zum *Hoppingtransport* von Ladungsträgern in ungeordneten Materialien (energetische Zustände mit einer Zustandsdichte $g(E)$) fortgeführt. Auf der Basis der bisher gewonnenen Ergebnisse (Herleitung einer *nichtlinearen Transportgleichung* aus einer mikroskopischen Hoppingdynamik) sind Computersimulationen durchgeführt worden, speziell zur Fortpflanzung von Ladungsträgerpaketen (*time of flight (TOF) signals*) in einer dünnen Schicht. Ein Ergebnis ist: Im Unterschied zu einem Transport, der von einer linearen Gleichung gesteuert wird, verändert sich hier das Signal beim Durchlaufen der Schicht auch bei einem dominanten äußeren elektrischen Feld. Es stellte sich heraus, dass die Form des Signals bei gegebener Gesamtladung nach Erreichen der *Transitzeit* (hinreichend große Schichtdicke) unabhängig von der Gestalt des Ausgangssignals ist und analytisch bestimmt werden kann.

Ein *inverses Problem*, die Bestimmung der Energiezustandsdichte, wurde in einem allgemeineren Rahmen unter Berücksichtigung des inneren Feldes behandelt. Bei einer bestimmten experimentellen Anordnung können aus dem Gleichgewichtsprofil der Ladungsträger Rückschlüsse auf die Energiezustandsdichte $g(E)$ gezogen werden. Sei $g_T(E) = g * f_T(E)$ die „thermisch verauschte“ Zustandsdichte, wobei

$$f_T(E) = (kT)^{-1} \exp(-E/kT) / (1 + \exp(-E/kT))^2.$$

Dann bekommt man diese auf einem Energieabschnitt der Länge ΔE nach der Formel

$$g_T(E + E^*) = \kappa \frac{\phi'''(\phi^{-1}(-E/e))}{\phi'(\phi^{-1}(-E/e))}, \quad 0 \leq E \leq \Delta E,$$

wobei κ ein Materialparameter ist und E^* und ΔE steuerbare Versuchsparameter sind. $\phi(x)$ ist die Potentialfunktion für das Gleichgewichtsprofil.

Literatur

1. A. LIEMANT, *Ein inverses Problem*, in Vorbereitung.
2. J. STEPHAN, A. LIEMANT, F. ALBRECHT, L. BREHMER, *Interplay of polaronic and disorder effects on electronic charge transport*, *Synthetic Metals*, **109** (2000), pp. 327–331.

Stochastische Partikelsysteme als numerische Verfahren für Probleme der Aerosoldynamik

Bearbeiter: W. Wagner, A. Eibeck

Kooperation: H. Babovsky (Technische Universität Ilmenau), A. Lushnikov (Karpov Institute of Physical Chemistry, Moskau, Russland), J. Norris (University of Cambridge, Großbritannien), M. Kraft (University of Cambridge, Großbritannien), K. Sabelfeld (FG 6)

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

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

$$\frac{\partial}{\partial t} c(t, x) = \frac{1}{2} \sum_{y=1}^{x-1} K(y, x-y) c(t, y) c(t, x-y) - \sum_{y=1}^{\infty} K(x, y) c(t, x) c(t, y) \quad (1)$$

benutzt. Die Lösung $c(t, x)$ entspricht der Konzentration von Teilchen der Größe $x = 1, 2, \dots$ zur Zeit t . Weiterhin bezeichnet K den Koagulationskern. Das Forschungsprojekt befasst sich mit der Untersuchung des Zusammenhangs zwischen *stochastischen wechselwirkenden Teilchensystemen* und Lösungen von Gleichungen des Typs (1). Zum einen führen dabei Ergebnisse über das asymptotische Verhalten der stochastischen Systeme (bei wachsender Teilchenzahl) zu Aussagen über Eigenschaften der Lösung. Zum anderen können geeignete stochastische Systeme zur Entwicklung von *Partikelverfahren* zur numerischen Behandlung der makroskopischen Gleichung benutzt werden.

Ein zur Koagulation von Teilchen entgegengesetzter Vorgang ist die Fragmentation, d. h. das Zerfallen von aus vielen Monomeren bestehenden Teilchen in kleinere Bestandteile. Die Koagulations-Fragmentations-Gleichung für ein kontinuierliches Größenspektrum wurde in der Arbeit [1] betrachtet. Für geeignete stochastische Teilchensysteme konnten unter sehr allgemeinen Voraussetzungen an die Kerne zum einen die relative Kompaktheit der entsprechenden *empirischen Maße* gezeigt und zum anderen die Häufungspunkte als Lösungen der Gleichung charakterisiert werden. Bemerkenswert an diesen Ergebnissen ist, dass sie neben den Erkenntnissen über das asymptotische Verhalten der stochastischen Systeme auch zu *Existenzaussagen* für Lösungen der betrachteten Gleichungen führen, die über die bisher bekannten hinausgehen. Des Weiteren wurde in der Arbeit [2] auf der Grundlage des Studiums der relevanten Markov-Prozesse ein effizienter numerischer Algorithmus entwickelt. Dieses Verfahren basiert auf der Einführung einer geeigneten fiktiven Wechselwirkung sowie auf speziellen Techniken zur Modellierung der dabei entstehenden Wahrscheinlichkeitsverteilungen.

Ein bei stark wachsenden Koagulationsraten K auftretendes Phänomen von sowohl theoretischem als auch praktischem Interesse stellt die *Gelation* dar. Im Rahmen der analytischen Beschreibung durch die Gleichung (1) wird dieser Effekt durch einen Masseverlust der Lösung widerspiegelt. Eine entsprechende Interpretation in der Sprache der stochastischen Teilchensysteme ist die Bildung sehr großer Teilchen (proportional zur Größe des Gesamtsystems) in endlicher Zeit. In der Arbeit [3] wurde ein neuartiges stochastisches Verfahren zur quantitativen Untersuchung des Gelationseffekts vorgestellt. Es basiert auf einer Transformation der Gleichung (1) und der Approximation der modifizierten Lösung durch stochastische Teilchensysteme. Der neue

Algorithmus zeichnet sich durch mehrere vorteilhafte Eigenschaften aus. Zum einen führt er zu einer beträchtlichen Reduktion der Varianz bei der Approximation von Funktionalen der Lösung. Zum anderen besitzt er wesentlich bessere Approximationseigenschaften (schnellere Konvergenz), speziell im Fall gelierender Kerne. Das theoretische Verständnis dieses Effekts stellt eine Herausforderung für die weitere Forschung auf diesem Gebiet dar.

Literatur

1. A. EIBECK, W. WAGNER, *Approximative solution of the coagulation-fragmentation equation by stochastic particle systems*, Stochastic Anal. Appl., **18** (2000), No. 6, pp. 921–948.
2. —, *An efficient stochastic algorithm for studying coagulation dynamics and gelation phenomena*, SIAM J. Sci. Comput., **22** (2000), No. 3, pp. 802–821.
3. —, *Stochastic particle approximations for Smoluchowski's coagulation equation*, WIAS-Preprint No. 585, 2000.

Effektive Steuerung von stochastischen Partikelverfahren für Strömungen in verdünnten Gasen

Bearbeiter: W. Wagner, A. Eibeck, I. Matheis

Kooperation: A. Bobylev (Karlstad University, Schweden), S. Ermakov (St. Petersburg University, Russland), A. Garcia (San Jose State University, San Jose, USA), C. Lécot (Université de Savoie, Chambéry, Frankreich), S. Rjasanow (Universität des Saarlandes, Saarbrücken)

Förderung: DFG: „Effektive Steuerung von stochastischen Partikelverfahren für Strömungen in verdünnten Gasen“

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

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

mit

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

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

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

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

mit dessen Hilfe das Verhalten des realen Gases approximiert wird. Hier bezeichnen $x_i(t) \in D \subset \mathcal{R}^3$ und $v_i(t) \in \mathcal{R}^3$ jeweils die Position und die Geschwindigkeit des i -ten Teilchens zur Zeit t . Bei der numerischen Behandlung kinetischer Gleichungen mittels stochastischer Partikelverfahren treten Fluktuationen auf, d. h. die zu berechnenden Werte werden durch zufällige Schwankungen überlagert. Deshalb besteht ein wichtiges Problem in der Konstruktion von Verfahren mit reduzierten Fluktuationen.

In der Arbeit [1] wurde mit Hilfe von auf der lokalen Temperatur in den Simulationszellen basierenden Abschätzungen ein Zeitzählmechanismus entwickelt, der den bisher vorhandenen Cutoff-Fehler bei hohen Geschwindigkeiten vermeidet. Darüber hinaus können die Zeitschritte zwischen den einzelnen Kollisionen wesentlich größer gewählt werden. Zusammen mit neu

entwickelten effizienten Algorithmen zur Generierung der Index-Verteilung führt dies zu einer erheblichen Reduzierung der Rechenzeit. Insgesamt bewirken die neuen Resultate eine stabilere Arbeit des Verfahrens in Situationen, in denen so genannte „seltene“ Ereignisse (z. B. ein einzelnes Teilchen mit sehr hoher Geschwindigkeit) eine Rolle spielen. Insofern ordnen sich diese Ergebnisse in das oben beschriebene Problem der Varianzreduktion ein.

Neben der zu einem entsprechenden numerischen Fehler führenden endlichen Anzahl von Simulationsteilchen beinhalten stochastische Verfahren zur Behandlung der Gleichung (1) weitere Approximationsparameter. Ein solcher Parameter ist die Zeitschrittweite, die dazu benutzt wird, die Prozesse der freien Bewegung und der Kollisionen zu entkoppeln. In der Arbeit [2] wurden Untersuchungen zur Konvergenzordnung bezüglich dieses Parameters angestellt. Für verschiedene einfache Strömungen konnte Konvergenz zweiter Ordnung bezüglich der Zeitschrittweite bei der Bestimmung von unterschiedlichen Transportkoeffizienten nachgewiesen werden. Diese Untersuchungen wurden sowohl für transiente als auch für stationäre Strömungen durchgeführt.

Die Anwendung der Gleichung (1) ist auf Strömungen beschränkt, in denen die mittlere freie Weglänge der Moleküle genügend groß gegenüber der charakteristischen Längenskala ist. Nun sind in der Literatur Modifikationen der stochastischen Simulationsalgorithmen entwickelt worden, die ihren Anwendungsbereich in Richtung dichter Gase ausdehnen. In der Arbeit [3] wurde das Konvergenzverhalten eines solchen Verfahrens theoretisch analysiert und die Gleichung gefunden, deren Lösung für wachsende Teilchenzahl approximiert wird. Diese Gleichung verallgemeinert die klassische Boltzmann-Gleichung (1). Eine Untersuchung ihres Verhältnisses zur Enskog-Gleichung ist Gegenstand weiterer Forschung.

Literatur

1. S. RJASANOW, W. WAGNER, *A temperature time counter scheme for the Boltzmann equation*, SIAM J. Numer. Anal., **37** (2000), No. 6, pp. 1800–1819.
2. A. L. GARCIA, W. WAGNER, *Time step truncation error in direct simulation Monte Carlo*, Phys. Fluids, **12** (2000), No. 10, pp. 2621–2633.
3. ———, *A new kinetic equation for dense gases*, WIAS-Preprint No. 562, 2000.

4.6 Forschungsgruppe Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik

4.6.1 Zusammenfassung

Die Forschungsgruppe befasst sich mit Arbeiten zur Angewandten Stochastik und Finanzmathematik im Rahmen der Institutsforschungsprojekte *Statistische Datenanalyse*, *Angewandte Finanzmathematik* und *Numerische Verfahren*.

Die theoretische Basis des Forschungsprogramms bilden moderne nichtparametrische statistische Verfahren für komplexe Zusammenhänge und numerische Methoden zur Untersuchung stochastischer Modelle. Der Schwerpunkt in der Finanzmathematik liegt auf der Entwicklung von Verfahren zu Risikomessung und -management sowie der Modellierung von Risikofaktoren. Auf diesen Gebieten, die sowohl bei der Lösung von Problemen in Technologie und Umweltforschung als auch bei der Risikomessung und Bewertung von Finanzderivaten Anwendung finden, hat sich die Forschungsgruppe in den vergangenen Jahren mit wichtigen mathematischen Beiträgen und mit der Entwicklung anerkannter statistischer Software eine führende Stellung erworben.

Für das vergangene Jahr wurden in der Forschungsgruppe die folgenden Schwerpunkte der Arbeit gesetzt:

- Nichtparametrische statistische Methoden der Bildverarbeitung, der Finanzmärkte, der Ökonometrie, der Cluster- und Diskriminanzanalyse,
- Angewandte Finanzmathematik, speziell Risikomessung und -steuerung, Bewertung und Simulation von Zinsderivaten sowie Portfolio-Optimierung unter Transaktionskosten,
- Stochastische Algorithmen und Turbulenztheorie, insbesondere Modelle für voll entwickelte Turbulenz, für Partikelverhalten in turbulenten Regimen sowie dynamische stochastische Algorithmen.

4.6.2 Projekte

Inferenz für komplexe statistische Modelle

Bearbeiter: S. Jaschke, P. Mathé, G. N. Milstein, H.-J. Mucha, J. Polzehl, V. Spokoiny

Kooperation: K. Hahn (GSF-IBB, München), F. Godtliessen (Universität Tromsø, Norwegen), G. Sebastiani (CNR/IAC Rom, Italien), F. Baumgart, T. Kaulisch (Leibniz-Institut für Neurobiologie, Magdeburg), A. Juditski (INRIA Grenoble, Frankreich), M. Hristache (Universität Rennes, Frankreich), L. Dümbgen (Medizinische Universität Lübeck), J. Horowitz (University of Iowa, USA), S. Sperlich (Universität Carlos III, Madrid, Spanien), B. Grund (University of Minnesota, USA), O. Bunke, B. Droge, W. Härdle, H. Herwartz, G. Teyssièrè (SFB 373, Humboldt-Universität zu Berlin), E. Heimerl (Universität Salzburg, Österreich), S. Hizir, D. Mercurio (Humboldt-Universität zu Berlin), M. Nussbaum (Cornell University, Ithaca, USA), S. V. Pereverzev (Nationale Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Kiew), R. von Sachs, X. Baes (Universität Louvain-la-Neuve, Belgien)

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

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

- Adaptive Verfahren der Bildverarbeitung,
- Effektive Dimensionsreduktion hochdimensionaler Daten,
- Statistische Inferenz für zeithomogene Finanzzeitreihen,
- Robuste nichtparametrische Testverfahren,
- Clusteranalyse und
- Numerik statistischer schlecht gestellter Probleme

zugeordnet.

Adaptive Verfahren der Bildverarbeitung (Bearbeiter: J. Polzehl, V. Spokoiny).

Untersuchungsmethoden in Technik, Medizin, Umweltschutz, Meteorologie und Geologie liefern vielfach Daten in Form von zwei- und dreidimensionalen Bildern. Beispiele sind u. a. *Satellite Apendure Radar* (SAR)-Bilder, Magnet-Resonanz (MR)-Aufnahmen oder seismische 3D-Daten in der Geologie.

Diese Bilder sind oft durch homogene Strukturen und Diskontinuitäten gekennzeichnet. Die Aufgabe, derartige Strukturen aus fehlerbehafteten (verrauschten) Bildern herauszufiltern, ist von vielen Autoren unter Nutzung verschiedener statistischer Modellansätze für verschiedene spezifische Anforderungen an das rekonstruierte Bild untersucht worden.

Ziele der Rekonstruktion sind z. B. ein Entrauschen der Bilder, das Finden homogener Bereiche und das Verstärken von Kontrasten. Das von uns entwickelte *Adaptive Weights Smoothing* (AWS)-Verfahren verfügt über in diesem Kontext besonders wünschenswerte Eigenschaften, wie Erhaltung von Ecken und Kanten (Kontrast) und „optimale“ Reduktion des Rauschens. Das Verfahren ist lokal adaptiv und nutzt die strukturelle Annahme eines lokal konstanten Regressionsmodells.

Ausgangspunkt ist das Regressionsmodell

$$Y = f(x) + \varepsilon \quad (1)$$

mit Y — beobachtete Werte an den Bildpunkten, $x \in \mathbb{R}^d$ — Bildpunkte im d -dimensionalen Raum und ε — zufällige Beobachtungsfehler. Unser Verfahren bestimmt für jeden Bildpunkt iterativ geeignete Umgebungen $V(x)$ und schätzt $f(x)$ durch eine Mittlung der Beobachtungswerte über $V(x)$. Simulative Untersuchungen anhand künstlicher Bilder zeigen eine Überlegenheit gegenüber klassischen Glättungsverfahren, insbesondere in Situationen, in denen die Funktion f Sprünge aufweist und sich gut durch eine stückweise konstante Funktion approximieren lässt (siehe [18]). Abbildungen 1 und 2 illustrieren die Ergebnisse beim Entrauschen eines Testbildes und einer SAR-Aufnahme (E. Attema, European Space Research and Technology Centre, Noordwijk, Niederlande).

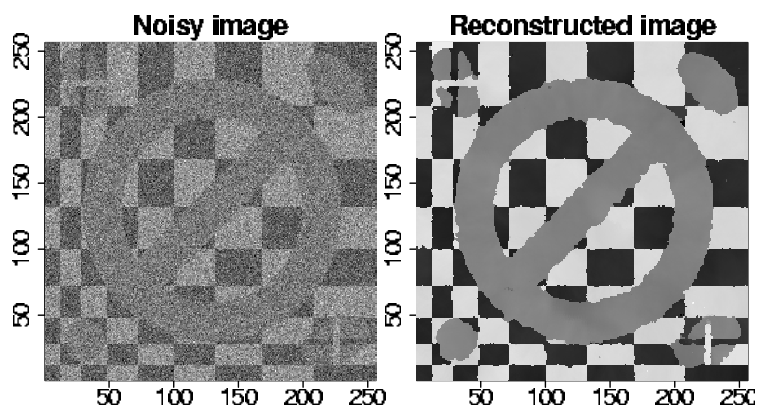


Abb. 1: Original und Rekonstruktion eines Testbildes.

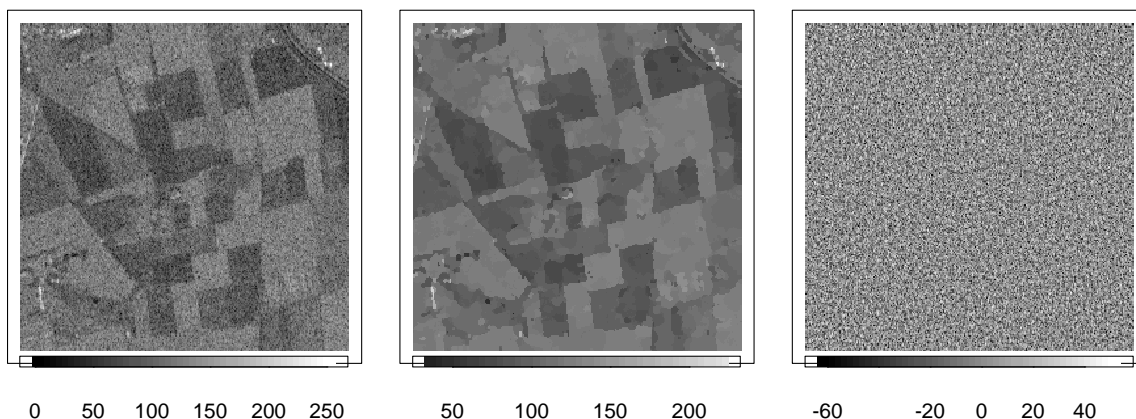


Abb. 2: Synthetic aperture radar (SAR): Originalbild (links), AWS-Rekonstruktion (Mitte) und Residualbild (rechts).

Die AWS zugrunde liegenden Ideen erlauben die effiziente Bearbeitung wesentlich komplizierterer Probleme. Magnet-Resonanz-Bilder (fMRI) entstehen bei Experimenten zur Bestimmung

funktioneller Zentren im Gehirn. Hierbei werden Patienten einer Folge von Signalen ausgesetzt. Gleichzeitig wird eine Zeitreihe von Magnet-Resonanz-Bildern aufgezeichnet. Gegenüber der häufig verwendeten voxelweisen Analyse ermöglicht unsere Herangehensweise eine erhöhte Sensitivität durch eine zusätzliche räumlich adaptive Glättung. Die in [19] vorgeschlagene Methodik kombiniert die in [18] entwickelte Idee adaptiver Gewichte mit einer Reduktion (in Zeitrichtung) der Dimensionalität der Daten unter Erhalt der für die Problemstellung wichtigen Information.

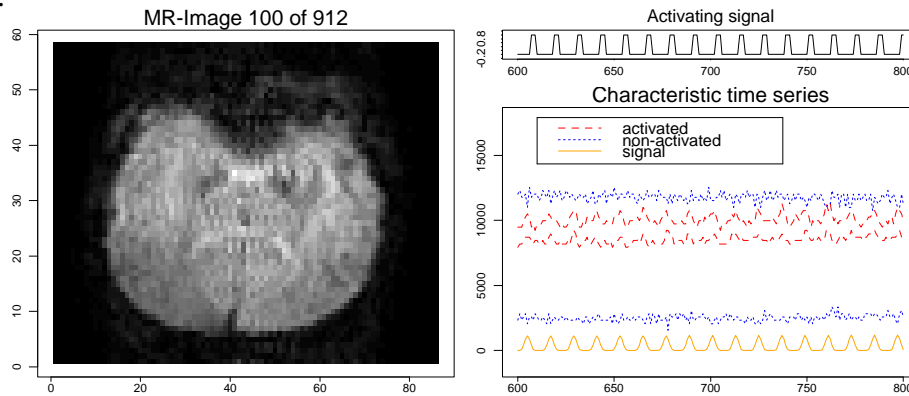


Abb. 3: fMRI-Experiment: typisches T2-gewichtetes MR-Bild (links), Stimulus (rechts oben) und beobachtete Zeitreihen in ausgewählten Voxeln (rechts unten).

Abbildung 3 illustriert ein funktionelles Magnet-Resonanz-Experiment. Während der Patient einem Stimulus (rechts oben) ausgesetzt ist, wird eine Zeitreihe von 2D- bzw. 3D-MR-Bildern aufgezeichnet (linkes Bild). In durch das Signal aktivierten Regionen des Gehirns lassen sich induzierte Signale (BOLD-Effekt) beobachten (rechts unten).

Das in [19] vorgeschlagene räumlich adaptive Glättungsverfahren kombiniert die in [18] entwickelte Idee adaptiver Gewichte mit einer Reduktion (in Zeitrichtung) der Dimensionalität der Daten. Dies ermöglicht die effiziente Nutzung der räumlichen Ausdehnung aktivierter Regionen zur Verbesserung der Sensitivität und Spezifität der Signaldetektion.

Abbildung 4 zeigt die detektierten Signale für einen fMRI-Datensatz (Max-Planck-Institut für kognitive Neurowissenschaften, Leipzig).

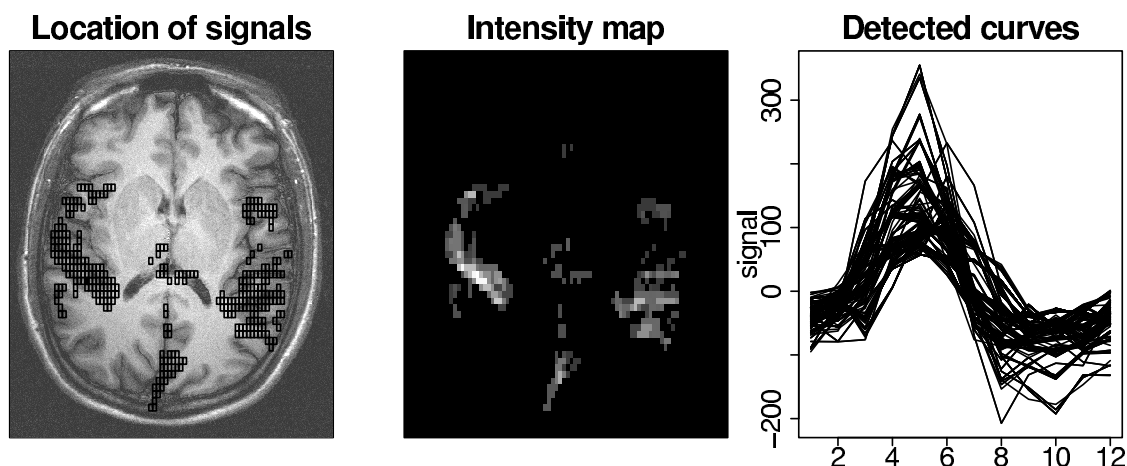


Abb. 4: Signalerkennung in fMRI.

Eine Anwendung der gleichen Methodik auf die Klassifikation von Gewebe anhand der zeitlichen Wirkung eines Kontrastmittels in dynamischen MR-Experimenten wird ebenfalls in [19] beschrieben.

Die Verfahren wurden im Rahmen eines Industrieprojektes zur Strukturierung geologischer Daten eingesetzt.

Effektive Dimensionsreduktion (Bearbeiter: S. Jaschke, J. Polzehl, V. Spokoiny).

Single- und Multi-Index-Modelle werden in multivariaten Problemen häufig benutzt, um das so genannte „curse of dimensionality“-Problem zu vermeiden. Diese Modelle verallgemeinern die klassischen linearen Modelle und können als guter Kompromiss zwischen oft zu restriktiven linearen Modellen und zu variablen rein nichtparametrischen Modellen angesehen werden. Interessierende Parameter der statistischen Analyse in diesen Modellen sind typischerweise Index-Vektoren. Derartige Indices dienen häufig zur Beschreibung makroökonomischer Daten in Ökonomie und Finanzwirtschaft. Typische Beispiele sind Börsenindices wie DAX oder Dow-Jones. Große Banken berücksichtigen 5000–10000 Finanzprodukte. Eine Dimensionsreduktion durch Zusammenfassung dieser Produkte zu Indices ermöglicht sowohl eine Risikobewertung, als auch eine Optimierung von Portfolios.

Eine neue Methode zum Schätzen des Index-Vektors im Single-Index-Modell wurde in der Gruppe vorgeschlagen [10]. Der Ansatz lässt sich als rekursive Verbesserung der klassischen Average-Derivative-Schätzer darstellen. Die theoretischen Ergebnisse zeigen, dass nach logarithmisch vielen Iterationsschritten die entsprechende Schätzung *root-n-konsistent* wird. Die Methode ist voll adaptiv hinsichtlich des Versuchsplans und der unbekanntem Glattheitseigenschaften der Link-Funktion. Die Resultate gelten unter sehr schwachen Modellannahmen. Simulationsergebnisse zeigen eine sehr stabile und gute Leistung der Methode für hochdimensionale Zusammenhänge und moderate Stichprobenumfänge. Falls die Single-Index-Annahme nicht erfüllt ist, kann die Anwendung dieser Methode zum Informationsverlust und zu falschen Schlussfolgerungen führen. Das motivierte die weitere Entwicklung dieses Ansatzes mit dem Ziel, eine Methode anzubieten, die für breite Modellklassen erlaubt, effiziente Dimensionsreduktion ohne signifikanten Informationsverlust durchzuführen.

Eine solche Verallgemeinerung der ursprünglichen Methode für den Fall eines Multi-Index-Modells ist in [9] entwickelt. Ein wichtiger Vorteil der neuen Methode besteht darin, dass diese keine strukturellen Voraussetzungen für das Modell benötigt. Simulationsergebnisse zeigen eine hervorragende Leistung der Methode.

Abbildung 5 demonstriert das Ergebnis der vorgeschlagenen Methode an einem künstlichen Beispiel für das Single-Index-Modell $Y_i = f(X_i^T \beta) + \varepsilon_i$ mit Gauß'schen Fehlern ε_i . Das „first step“-Ergebnis entspricht der klassischen Average-Derivative-Schätzung. Die Verbesserung während des Iterierens ist leicht sichtbar.

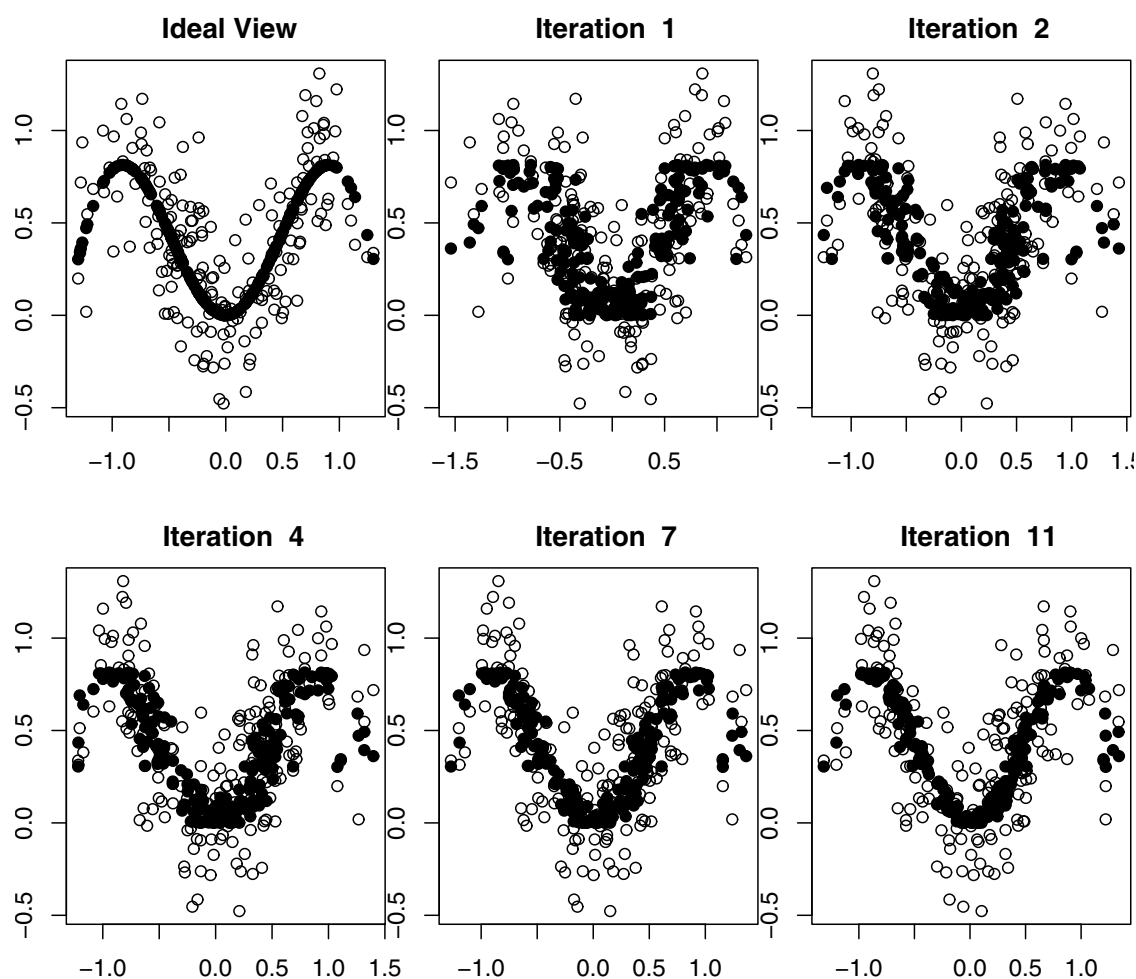


Abb. 5: Projektion von Beobachtungen (Kreise) und wahren Funktionswerten (Punkte) auf den geschätzten Indexraum im zehndimensionalen Single-Index-Modell.

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

Log>Returns R_t erhält man als Logarithmus des Quotienten zweier aufeinanderfolgender Werte eines zugrunde liegenden Preisprozesses. Ein typisches Ziel der statistischen Analyse ist eine Kurzzeitvorhersage des Volatilitätsprozesses. Dieser Prozess wird meist mittels einer parametrischen Annahme modelliert. Beispiele solcher Modellannahmen sind ARCH, verallgemeinerte ARCH (GARCH) oder stochastische Volatilitätsmodelle. Alle diese Modelle sind zeithomogen und daher nicht in der Lage, strukturelle Änderungen des zugrunde liegenden Prozesses nachzuvollziehen. In [7, 12] werden alternative Ansätze vorgeschlagen, die auf der Annahme lokaler Zeithomogenität basieren und zum Schätzen bzw. Vorhersagen der Volatilität benutzt werden können.

Eine Erweiterung dieses Ansatzes auf hochdimensionale Finanzdaten ist in [6] entwickelt worden. Das Verfahren beinhaltet Datentransformation, Dimensions-Reduktion und nichtparametrische Glättung.

Abbildung 6 demonstriert das Ergebnis der Methode für einen Währungsprozess.

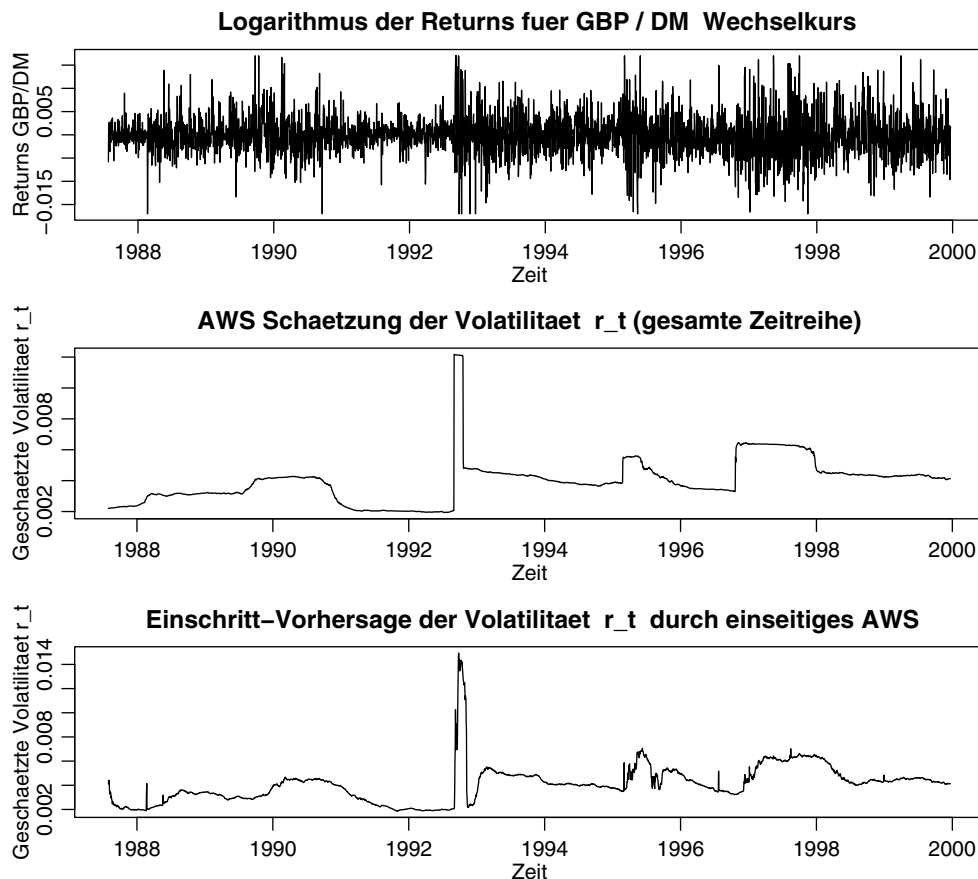


Abb. 6: Logarithmische Returns, Schätzungen auf Basis der gesamten Zeitreihe und 1-Schritt-Vorhersagen der Volatilität der täglichen GBP/DM-Wechselkurse im Zeitraum 1988–2000.

Robuste nichtparametrische Testverfahren (Bearbeiter: J. Polzehl, V. Spokoiny).

Ein wichtiges Problem der statistischen Inferenz ist das Testen einer linearen Hypothese. Es gibt eine Vielzahl von verschiedenen Methoden, die speziell für dieses Problem entwickelt worden sind. Trotzdem besteht in vielen Anwendungsgebieten Bedarf an neuen Testverfahren, die robust und adaptiv hinsichtlich Modellannahmen sind, insbesondere betrifft das die Annahmen über Fehlerverteilung. Ein perspektivischer Ansatz in dieser Richtung besteht darin, die Verteilungsquantilen statt den Erwartungswert zu betrachten. Ein wichtiges Beispiel wird durch das Median-Regressions-Modell gegeben:

$$\text{Med}[Y | X] = f(X)$$

statt $E[Y | X] = f(X)$, wobei Y (bzw. X) die Response- (bzw. Regressions-) Variable bezeichnet und f die Regressionsfunktion ist.

Ein adaptiver Test der linearen Hypothese $f(x) = \beta^T x$ gegen allgemeine nichtparametrische Alternativen wurde in [8] entwickelt. Die theoretischen Ergebnisse beschreiben die Güte des Tests und beweisen seine Rate-Optimalität.

In [5] werden Tests linearer Hypothesen in additiven Survival-Modellen entwickelt.

Clusteranalyse (Bearbeiter: H.-J. Mucha).

Mit der modellbasierten Clusteranalyse können viele Anwendungssituationen in guter Näherung beschrieben und somit auch die gesuchten Teilpopulationen (Cluster) erkannt und deren Parameter bestimmt werden. Die Erkennung sehr unterschiedlich großer Cluster verschiedener Form ist

jedoch restriktiv bzw. problematisch immer dann, wenn es sich um hochdimensionale Probleme handelt. Wenn die Beobachtungsanzahl einiger Cluster geringer als die Variablenanzahl ist, dann reduziert sich die Modellwahl meist auf das Varianzkriterium und das logarithmierte gemittelte Varianzkriterium. Letzteres kann zur Erkennung sowohl von Clustern mit vielen Beobachtungen als auch von Clustern mit einigen wenigen Beobachtungen geeignet sein. Abbildung 7 zeigt eine Anwendung dieses Modells auf chemometrische Daten aus der Archäologie. Das kleinste Cluster enthält hier nur sieben Beobachtungen, und es werden zugleich Cluster mit mehr als hundert Beobachtungen erkannt.

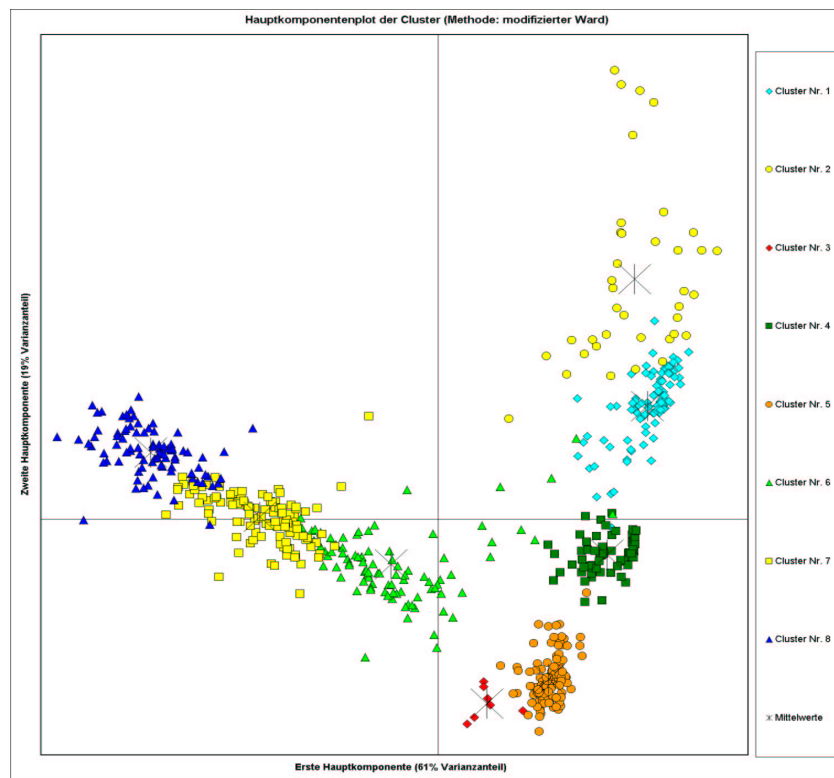


Abb. 7: Hauptkomponentenplot der acht Cluster aus dem modifizierten Ward-Verfahren.

Die Statistiksoftware `ClusCorr98`[®] zur automatischen Klassifikation, statistischen Datenanalyse und multivariaten Visualisierung wurde um modellbasierte Verfahren erweitert. `ClusCorr98`[®] ist in *Visual Basic for Applications* geschrieben und unter Windows oder Windows NT lauffähig. Im Industrieprojekt mit der Firma EEG (Erdgas Erdöl GmbH Berlin) wurden die in der Statistiksoftware verfügbaren adaptiven Methoden der partitionierenden Clusteranalyse zur Erkundung von Rohstofflagerstätten eingesetzt.

Numerik statistischer schlecht gestellter Probleme (Bearbeiter: P. Mathé).

Beim Entwurf numerischer Verfahren zur Lösung konkreter Probleme ist es wichtig, gegebene *a priori*-Informationen effektiv (optimal) zu nutzen. Dieser Aspekt hat Bedeutung sowohl bei der Festlegung von Diskretisierungen, als auch bei der Wahl geeigneter Algorithmen bei gegebener Diskretisierung, da sich hier entscheidet, ob mit den diskreten Daten effizient gearbeitet wird oder ob ein unnötiger „computational overhead“ erzeugt wird.

In Zusammenarbeit mit S. V. Pereverzev wird dieser Problemkreis anhand schlecht gestellter statistischer Probleme

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

beziehungsweise der Diskretisierung

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

untersucht, wobei A injektiv und kompakt entlang einer Hilbert-Skala wirkt und $\delta > 0$ das Rauschniveau der fehlerbehafteten Daten $y_{\delta,i}$ beschreibt.

Die Untersuchungen konzentrierten sich auf das Problem, Funktionale von Lösungen obiger Gleichungen approximativ zu berechnen. Möglich ist hierbei der Zugang über die approximative Bestimmung der gesamten Näherungslösung und die nachherige Anwendung des Funktionals, die *Solution-Functional Strategy*, aber auch die direkte Bestimmung unmittelbar aus den Daten, die *Data-Functional Strategy*, siehe [1, 3]. Die Erkenntnisse aus den von der DFG geförderten Untersuchungen können wie folgt zusammengefasst werden.

1. Die optimale Data-Functional Strategy ergibt sich zwangsläufig als Tikhonov-Regularisierung eines dualen Problems, falls das Rauschen stochastisch ist.
2. Für diskrete endlich viele Daten wurde ein ordnungsoptimales Verfahren konstruiert.
3. Es wurde gezeigt, dass dieses Verfahren von minimaler Informationskomplexität ist.

Die erzielten Ergebnisse sind in [11] niedergelegt. Falls Glattheitseigenschaften der Lösung nicht a priori bekannt sind, muss auf die Solution-Functional Strategy zurückgegriffen werden, mit deren Hilfe eine adaptive Bestimmung jener aus den zur Verfügung stehenden Daten möglich ist. Die Effizienz dieses Verfahrens ist in [4] analysiert.

Herr Pereverzev hat die Ergebnisse auf der Konferenz „Mathematical Statistics“ (Marseille-Luminy, Frankreich, 11.–15. Dezember 2000) vorgestellt.

Statistische und Monte-Carlo-Methoden für die Bewertung der Markov'schen Übergangswahrscheinlichkeitsdichte (Bearbeiter: G. N. Milstein, J. Schoenmakers, V. Spokoiny).

Die bekannte wahrscheinlichkeitstheoretische Repräsentation von Lösungen linearer partieller Differentialgleichungen und numerische Integration stochastischer Differentialgleichungen werden gemeinsam mit Ideen der Mathematischen Statistik zum Schätzen der Markov'schen Übergangsdichte von Diffusionsprozessen, siehe [14], genutzt. Ein weiteres Problem der statistischen Schätztheorie wird in [13] betrachtet.

Literatur

1. R. S. ANDERSSON, *The linear functional strategy for improperly posed problems*, in: Inverse problems, Oberwolfach, 1986, Birkhäuser, Basel, 1986, pp. 11–30.
2. J. D. BANFIELD, A. E. RAFTERY, *Model-based Gaussian and non-Gaussian clustering*, Biometrics, **49** (1993), pp. 803–821.
3. M. A. GOLBERG, *A method of adjoints for solving some ill-posed equations of the first kind*, Appl. Math. Comput., **5** (1979), No. 2, pp. 123–129.
4. A. GOLDENSHLUGER, S. V. PEREVERZEV, *Adaptive estimation of linear functionals in Hilbert scales from indirect white noise observations*, Probab. Theory Related Fields, **118** (2000), No. 2, pp. 169–186.
5. B. GRUND, J. POLZEHL, *Semiparametric lack-of-fit tests in an additive hazard regression model*, erscheint in: Statistics and Computation.

6. W. HÄRDLE, H. HERWATZ, V. SPOKOINY, *Time inhomogeneous multiple volatility modelling*, eingereicht.
7. W. HÄRDLE, V. SPOKOINY, G. TEYSSIÈRE, *Adaptive estimation for a time inhomogeneous stochastic-volatility model*, eingereicht.
8. J. HOROWITZ, V. SPOKOINY, *An adaptive, rate-optimal test of linearity for median regression model*, eingereicht.
9. M. HRISTACHE, A. JUDITSKI, J. POLZEHL, V. SPOKOINY, *Structure adaptive approach for dimension reduction*, eingereicht.
10. M. HRISTACHE, A. JUDITSKI, V. SPOKOINY, *Direct estimation of the index coefficients in a single-index model*, Ann. Statist., im Druck.
11. P. MATHÉ, S. V. PEREVERZEV, *Direct estimation of linear functionals from indirect noisy observations*, eingereicht.
12. D. MERCURIO, V. SPOKOINY, *Statistical inference for time-inhomogeneous volatility models*, eingereicht.
13. G. N. MILSTEIN, M. NUSSBAUM, *Maximum likelihood estimate for nonparametric signal in white noise by optimal control*, WIAS-Preprint No. 596, 2000.
14. G. N. MILSTEIN, J. SCHOENMAKERS, V. SPOKOINY, Manuskript in Vorbereitung.
15. H.-J. MUCHA, *Clusteranalyse mit Mikrocomputern*, Akademie Verlag, Berlin, 1992.
16. H.-J. MUCHA, H.-G. BARTEL, J. DOLATA, *Exploring roman brick and tile by cluster analysis with validation of results*, in: Classification, Automation, and New Media, Proceedings of the 24th Annual Conference of the Gesellschaft für Klassifikation, Universität Passau, Springer, Heidelberg, im Druck.
17. J. POLZEHL, V. SPOKOINY, *Image denoising: Pointwise adaptive approach*, Discussion paper, No. 38, SFB 373, Humboldt-Universität zu Berlin, 1998, eingereicht.
18. —, *Adaptive weights smoothing with applications to image restoration*, J. Roy. Statist. Soc., Ser. B., **62** (2000), No. 2, pp. 335-354.
19. —, *Functional and dynamic Magnet Resonance Imaging using vector adaptive weights smoothing*, erscheint in: J. Roy. Statist. Soc., Ser. C.
20. —, *Discrimination analysis by adaptive weights smoothing*, Manuskript in Vorbereitung.
21. —, *Volatility modelling by adaptive weights smoothing*, Manuskript in Vorbereitung.

Angewandte Finanzmathematik

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

Kooperation: A. Bachi (Technische Universität Twente, Niederlande), J. Breckling (Insiders GmbH, Mainz), M. Broadie (Columbia University, New York, USA), B. Coffey (Merrill Lynch, New York, USA), H. Föllmer, U. Küchler, R. Stehle (Humboldt-Universität zu Berlin), H. Haaf (Münchener Rückversicherung AG, München), A. W. Heemink, H. van der Weide (Technische Universität Delft, Niederlande), Y. Kashtanov (Staatliche Universität St. Petersburg, Russland), P. Kloeden (Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt am Main), J. Kremer, C. März (Bankgesellschaft Berlin AG, Berlin), O. Kurbanmuradov (Akademie der Wissenschaften Turkmenistans, Ashchabad), W. Schmidt (Deutsche Bank AG, Frankfurt am Main), M. Schweizer (Technische Universität Berlin), U. Wystup (Commerzbank AG, Frankfurt am Main)

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

Die Abteilung „Angewandte Finanzmathematik“ der Forschungsgruppe „Stochastische Algorithmen und Nichtparametrische Statistik“ befasst sich mit der stochastischen Modellierung von Prozessen in Finanzmärkten, der Bewertung von derivativen Instrumenten (Optionen) und Fragen des Risikomanagements für Finanzinstitute. Die Implementierung der Modelle sowie die Anwendung in der Praxis sollen in Zusammenarbeit mit Finanzinstituten erfolgen. Dabei ist zurzeit das Risikomanagement für Banken, insbesondere die aufsichtsrechtlich zugelassene Verwendung „interner Modelle“, das Hauptthema. Zusammen mit der Bankgesellschaft Berlin AG wird das BMBF-Projekt „Effiziente Methoden zur Bestimmung von Risikomaßen“ gestartet. Dieses Projekt wird von der Bankgesellschaft Berlin AG mitfinanziert. Ein weiteres Projekt ist die Erstellung eines Gutachtens zum konzernweiten Risikomanagementsystem der Bankgesellschaft.

In der finanzmathematischen Modellierung ist es zweckmäßig, über Methoden zur Bestimmung von Übergangswahrscheinlichkeiten von Diffusionen zu verfügen. Hierzu werden sowohl Monte-Carlo-Methoden im Zusammenhang mit der numerischen Integration von stochastischen Differentialgleichungen als auch statistische Ansätze benutzt. In diesem Rahmen wird mit den Projekten „Inferenz für komplexe statistische Modelle“ und „Numerik komplexer stochastischer Modelle“ zusammengearbeitet.

Die Forschung zum Thema „LIBOR Zinsderivate, Zinsmodelle und Kalibration“ wurde im Berichtszeitraum fortgesetzt. Die Methode zur Kalibration von LIBOR-Modellen wurde weiterentwickelt ([17]) und auf den RISK-Konferenzen in New York (Math Week) und Genf (ICBI) vorgestellt.

LIBOR Zinsderivate, Zinsmodelle und Kalibration (begonnen 1998, Bearbeiter: G. N. Milstein, O. Reiß, J. Schoenmakers).

Es wurde ein Multi-Faktor-LIBOR-Zinsmodell [3, 7, 9, 16] mit bestimmter Korrelationsstruktur vorgeschlagen. Dieses Modell wurde weiter untersucht und es wurde eine allgemeine Methode zur Erzeugung von parametrischen und semiparametrischen Korrelationsstrukturen entwickelt. Es wurde gezeigt, dass ein LIBOR-Markt-Modell ausgestattet mit derartigen Strukturen sich stabil gegen Marktpreise von „Caps“ und „Swaptions“ kalibrieren lässt ([17]). Darüber hinaus

ist die dabei erhaltene Korrelationsstruktur konsistent mit einer historisch geschätzten Korrelationsmatrix. Die erzielten Ergebnisse wurden auf den RISK-Konferenzen in New York (Math Week) und Genf (ICBI) vorgestellt.

Das im vorherigen Jahr begonnene Forschungsthema zur einheitlichen Modellierung von Zinsen und Aktien wurde fortgesetzt. Ausgehend von einem vollständigen Aktienmarkt wird ein Zinsstrukturmodell erzeugt, das die in der Praxis beobachteten Korrelationen zwischen Zinsen und Aktien auf natürliche Weise beschreibt. Insbesondere wurde in diesem Modell eine interessante Beziehung zwischen dem kurzfristigen Zins, dem Aktienindex und dem „Market-Price of Risk“ gefunden ([14]).

Risikomanagement für Finanzinstitute (Bearbeiter: S. Jaschke, O. Reiß, J. Schoenmakers J.-H. Zacharias).

Von der Bank für Internationale Zusammenarbeit (Basle Committee) wurden Grundsätze entwickelt, die innerhalb eines Risikomanagementsystems einer Bank eingehalten werden müssen. Im Zentrum dieser Beschlüsse steht der Begriff „Value at Risk“, der eine Kenngröße des Marktpreisrisikos eines Portfolios von Wertpapieren ist. Nach den Baseler Richtlinien berechnet sich aus dem Value at Risk das Eigenkapital, mit dem eine Bank dieses Risiko absichern muss. Entscheidend für die Nachfrage nach modernen mathematischen Methoden ist dabei, dass die Ergänzung der Baseler Richtlinien von 1995 die Verwendung so genannter „interner Modelle“ zulässt. Damit können Banken nicht nur über innovative Finanzprodukte, sondern auch über innovative Risikomodellierung konkurrieren. Die Richtlinie wurde 1997/98 in EU- und deutsches Recht umgesetzt und erlaubt deutschen Kreditinstituten die Verwendung interner Modelle seit Oktober 1998. Es gibt mehrere Anreize für die Verwendung interner Modelle, z. B.

1. Meist verringert die Verwendung interner Modelle die Höhe der Kapitalanforderungen, im Derivate-Handel mitunter erheblich.
2. Die Tatsache, dass ein internes Modell vom Bundesaufsichtsamt für Kreditwesen genehmigt worden ist, kann das Rating, Standing oder Handelsvolumen erhöhen.
3. Die Verwendung aufsichtsrechtlich anerkannter interner Modelle vermeidet eine doppelte Risikomessung und Buchführung.

Nach allgemeiner Erfahrung benötigt die Implementierung eines konzernweiten Risikomanagementsystems unter Verwendung aufsichtsrechtlich anerkannter interner Modelle mindestens drei Jahre und Budgets im mehrstelligen Millionenbereich.

In Zusammenarbeit mit der Bankgesellschaft Berlin AG wird ein Projekt bearbeitet, das Teilprobleme dieses Risikomanagementsystems löst. Ein solches System erfordert eine effiziente Bewertung aller Finanzinstrumente. Es wurden insbesondere verschiedene Algorithmen für die Behandlung von Wandelanleihen entwickelt, die sowohl praxisrelevante Probleme wie Dividendenzahlungen von Aktien oder Zinsstrukturkurven mit einbeziehen, als auch das Ausfallrisiko des Emittenten berücksichtigen.

Im Rahmen eines Risikomanagementsystems müssen neben den Preisen von Finanzinstrumenten auch deren Ableitungen, die so genannten Griechen, bestimmt werden. Durch Analyse der Symmetriebeziehungen in einem Finanzmarkt wurden Beziehungen zwischen den Optionssensitivitäten aufgedeckt, die u. a. zur Konsistenzprüfung von numerisch bestimmten Ableitungen verwendet werden können ([15]).

Im Zusammenhang mit der Vorlesung *Risikomanagement* (Angewandte Finanzmathematik), die von S. Jaschke im Wintersemester 2000/2001 an der Humboldt-Universität zu Berlin gehalten

wird, wurde eine umfangreiche Sichtung der Literatur zum Risikomanagement für Finanzinstitute durchgeführt. Die praktische Implementierung eines konzernweiten Risikomanagementsystems erfordert ein umfassendes Verständnis der ökonomischen, statistischen, numerischen und IT-Infrastruktur-Aspekte des Gesamtproblems. Die im Laufe der Vorbereitung dieser Vorlesung gewonnenen Einsichten gestatten es, nicht nur die akademisch-mathematische, sondern auch die praktische Relevanz neuer Ideen oder offener Fragen abzuschätzen.

In Zusammenarbeit mit Prof. R. Stehle, Humboldt-Universität zu Berlin, wird (Oktober 2000 – Februar 2001) ein Gutachten über das konzernweite Risikomanagementsystem der Bankgesellschaft erstellt.

Im Rahmen eines bewilligten BMBF-Projekts wird in Zukunft die Risikobewertung großer Portfolios unter Verwendung von Monte-Carlo-Verfahren angestrebt [2, 4, 6]. Dabei werden innerhalb der Forschungsgruppe Synergien genutzt werden. So ist die Schätzung von Korrelationen einzelner Risikofaktoren notwendig [5, 13], die über Zeitreihenanalysen durchgeführt wird und dieses Projekt mit dem Projekt „Inferenz für komplexe statistische Modelle“ unserer Forschungsgruppe verbindet. Da in diesem Forschungsvorhaben Monte-Carlo-Methoden eingesetzt werden, wird mit dem Projekt „Numerik komplexer stochastischer Modelle“ kooperiert. Insbesondere werden Techniken zur Varianzreduktion (Importance Sampling, Stratified Sampling) eingesetzt. Die bekannten Methoden zur approximativen Bestimmung des Value at Risk wie Delta-Normal oder Delta-Gamma-Normal sollen dabei als Näherungslösung dienen.

Literatur

1. L. ANDERSEN, J. ANDREASEN, *Volatility skews and extensions of the LIBOR market model*, Arbeitspapier, General Re Financial Products, 1998.
2. P. ARTZNER, F. DELBAEN, J. M. EBER, D. HEATH, *Coherent measures of risk*, Math. Finance, **9** (1998), pp. 203–228.
3. A. BRACE, D. GATAREK, M. MUSIELA, *The market model of interest rate dynamics*, Math. Finance, **7** (1997), No. 2, pp. 127–155.
4. P. EMBRECHTS, C. KLÜPPELBERG, T. MIKOSCH, *Modelling Extremal Events*, Springer, Berlin, 1997.
5. P. EMBRECHTS, A. MCNEIL, D. STRAUMANN, *Correlation: Pitfalls and alternatives*, RISK Magazine, 1999.
6. J. FRANKE, W. HÄRDLE, G. STAHL, *Measuring Risk in Complex Stochastic Systems*, erscheint in: Lecture Notes in Statist., Springer, Berlin.
7. P. GLASSERMAN, X. ZHAO, *Arbitrage-free discretization of lognormal forward Libor and swap rate models*, erscheint in: Finance Stochast.
8. W. HÄRDLE, H. HERWARTZ, V. SPOKOINY, *Multiple volatility modelling*, in Vorbereitung.
9. F. JAMSHIDIAN, *LIBOR and swap market models and measures*, Finance Stochast., **1** (1997), pp. 293–330.
10. O. KURBANMURADOV, K. K. SABELFELD, J. SCHOENMAKERS, *Lognormal random field approximations to LIBOR market models*, WIAS-Preprint No. 481, 1999.

11. G. N. MILSTEIN, J. G. SCHOENMAKERS, *Numerical construction of a hedging strategy against the multi-asset European claim*, WIAS-Preprint No. 507, 1999, eingereicht.
12. K. R. MILTERSEN, K. SANDMANN, D. SONDERMANN, *Closed-form solutions for term structure derivatives with lognormal interest rates*, *J. Finance*, **52** (1997), pp. 409–430.
13. R. B. NELSON, *An Introduction to Copulas*, Springer, New York, 1999.
14. O. REIß, J. G. SCHOENMAKERS, M. SCHWEIZER, *Interest rate term structure dynamics induced by a multi stock market; Finite factor HJM models*, in Vorbereitung.
15. O. REIß, U. WYSTUP, *Efficient computation of option price sensitivities using homogeneity and other tricks*, WIAS-Preprint No. 584, 2000, eingereicht.
16. J. G. SCHOENMAKERS, B. COFFEY, *LIBOR rate models, related derivatives and model calibration*, WIAS-Preprint No. 480, 1999.
17. ———, *Stable implied calibration of a multi-factor LIBOR model via a semi-parametric correlation structure*, WIAS-Preprint No. 611, 2000.
18. J. SIDENIUS, *LIBOR market models in practice*, Skandinaviska Enskilda Banken, Copenhagen, 1997.

Numerik komplexer stochastischer Modelle

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

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

Förderung: BMBF: „Entwicklung der mathematischen Grundlagen für ein neues Ultraschallpulsmeßverfahren“ (03-MAFV1-5), INTAS, NATO

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

Stochastische Modelle für den Transport von Aerosolpartikeln in der Grenzschicht der turbulenten Atmosphäre (Bearbeiter: K. K. Sabelfeld).

Die Menschheit wird mit einer zunehmenden Anzahl von lokalen, regionalen und globalen Umweltproblemen konfrontiert, die mit erheblichen ökologischen, ökonomischen und sozialen Auswirkungen verbunden sind. Innerhalb des Klimasystems ist das atmosphärische Aerosol ein multidimensionaler Parameter von immenser Bedeutung, dessen Einfluss sich heute noch nicht abschätzen lässt. Wenn man sich auf eine Bezugsgröße wie den Radius verständigt, also die suspendierten Teilchen als kugelförmig annimmt, so muss man sehr viele direkte und indirekte radiusabhängige Größen betrachten. In Form von „Dichte-Verteilungen“ sind direkte Abhängige z. B. Anzahl (Menge), Volumen, Oberfläche, Form, chemische Zusammensetzung (auch biologische) und elektrische Ladung. Indirekte Abhängige sind Material- und hydrodynamische Dichte, optische Brechung und Absorption, Radioaktivität, Phasenzustand (fest, flüssig oder beides), Wasseranlagerung (Vorkondensation, Wolken- und Nebelbildung), struktureller Aufbau der Teilchen (z. B. schalenförmige Anordnung der chemischen Bestandteile, chemisch aktive Zentren auf der Oberfläche — Stichwort Eiskeime) und andere. Jede Inhomogenität im Gas kann zur Differenz von Geschwindigkeiten der Partikel führen. Das heißt, die relative Geschwindigkeit zwischen zwei Partikeln ist dann positiv, und es ergibt sich eine Kollision und danach eine Koagulation. Wir erwähnen folgende Phänomene, die zur Koagulation führen: Brown'sche Bewegung, Gravitationsfall, frei molekulare Kollision, turbulente Bewegung der tragenden Strömung, akustische Wellen, die Gradienten der Dichte der Konzentration und der Temperatur, die

elektrische Ladung. In unterschiedlichen Strömungen wirken auch unterschiedliche Koagulationsregimes; in [26, 27] haben wir beispielsweise frei molekulare Kollision verwendet, und in [7] waren komplizierte turbulente Koagulationsregimes unvermeidbar. Folgende Schwerpunkte bestehen in diesem Projekt:

- Entwicklung stochastischer Modelle und Methoden für die Simulation der klassischen, völlig entwickelten turbulenten Strömungen, und Studie des turbulenten Transports, der turbulenten Verbrennung, Nukleation und Koagulation von Partikeln in turbulenten Regimes.
- Numerische Simulation der stochastischen Phänomene für folgende industrieorientierte Probleme: turbulente Verbrennung in Motoren und Analyse der Formung von Aerosol-Partikeln des Auspuffs, turbulenter Transport von Aerosol-Partikeln in der Atmosphäre und deren Einfluss auf die Aufforstung.

Als aussichtsvolles Anwendungsgebiet, für das die entwickelten stochastischen Algorithmen und insbesondere die „Backward Trajectory-Technik“ effektiv sein sollte, wird das so genannte „Footprint Problem“ ([2], [9]) betrachtet: Es ist erforderlich, den relativen Beitrag von verschiedenen Quellen der Aerosol-Partikel in einem fixierten Punkt zu berechnen. Dabei wird angenommen, dass die Größe der Quellen groß genug ist (z. B. Auspuffgase). In diesem Fall simuliert man die Trajektorien rückwärts: Die Trajektorien starten aus dem Detektor und enden in den Quellen.

Gegenstand des Projekts ist die Konstruktion und Entwicklung neuer stochastischer Modelle und Monte-Carlo-Methoden für die Modellierung des Transports von Substanzen und Aerosolpartikeln in der Grenzschicht der Atmosphäre mit Anwendungen in der Aufforstung. Die Aerosol-Partikel wachsen in einem komplizierten Phasenübergang aus dem Gas. Das erste Stadium, die Nukleation, ist mit zwei Hauptmethoden beschrieben: Die erste ist die klassische thermodynamische Methode, die die kritische Größe der stabilen Monomeren gibt. Leider kann man mit dieser Methode nur einfachste Systeme behandeln. In der zweiten Methode nutzt man die Smoluchowski-Gleichung mit entsprechenden Verdampfungs- und Kondensations-Koeffizienten. In beiden Verfahren nutzt man Monte-Carlo-Methoden. Das zweite Stadium ist die Koagulation: Die stabilen Monomeren wachsen über Kondensation und Kollisionen mit anderen Partikeln. Die Zahl der Gleichungen im Smoluchowski-System ist enorm. Tatsächlich besteht ein Partikel von der Größe eines Mikrons aus etwa $10^9 - 10^{10}$ Atomen, und es ist praktisch nicht möglich, diese Information zu speichern (was aber in deterministischen Methoden notwendig ist). Die stochastische Beschreibung hat hier den Vorteil, nicht alle Partikel behandeln und speichern zu müssen. Ein wichtiges Problem ist die Abschätzung der Konvergenzgeschwindigkeit des stochastischen Systems, das aus N Partikeln besteht.

Die Geschwindigkeitskomponenten $u_i(\mathbf{x}, t)$, $i = 1, 2, 3$, in turbulenten Strömungen werden in der statistischen Strömungsmechanik als zufällige Felder betrachtet. Deshalb sind die Substanzkonzentrationen auch stochastische Felder. In Anwendungen interessiert man sich nicht für die Realisierungen dieser Felder, sondern für die Mittelwerte von Konzentrationen und ihren Flüssen. Man verwendet zwei grundlegende Methoden für die Berechnung dieser Mittelwerte:

- (i) Die klassische halbempirische Beschreibung dieser Probleme basiert auf der Mittelwertbildung und dem Verschluss-Verfahren und
- (ii) Lagrange'scher stochastischer Simulationen.

Die halbempirische Betrachtung ist in der Praxis ausführlich und fortgeschritten, aber das Verschluss-Problem ist bis heute nicht gelöst. Außerdem sind die Anwendungsgebiete sehr

beschränkt und sogar oft unklar. Die Haupteinschränkung der halbempirischen Betrachtung besteht darin, dass die räumlichen Maßstäbe der Turbulenz viel kleiner sein sollen als die räumlichen Maßstäbe der Substanzkonzentrationsfelder.

Die Lagrange'schen stochastischen Simulationsmethoden sind frei von der oben erwähnten Einschränkung, und das Verschluss-Problem taucht hier nicht auf. Das Hauptproblem besteht hier in der Berechnung der Lagrange'schen Übergangsdichte

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

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

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

Hier bezeichnen wir durch $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = (u_1(\mathbf{x}, t), u_2(\mathbf{x}, t), u_3(\mathbf{x}, t))$ den Geschwindigkeitsvektor.

Kennt man die Dichte $p_L(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0)$, so berechnet man die Mittelwerte von Konzentrationen und ihren Flüssen. Die Konzentration ist durch das Integral ([3, 17])

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

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

Die wichtigste Frage ist hier also: Wie kann man die Lagrange'sche Dichte $p_L(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0)$ bei stochastischen Verfahren konstruieren? Es gibt zwei grundlegende Methoden im Rahmen der stochastischen Beschreibung. Die erste, die Euler'sche, basiert auf Simulation der Euler'schen Geschwindigkeit mit gegebener Verteilung. Man modelliert die Bewegung der Partikel-Trajektorien in den stochastisch simulierenden Geschwindigkeits-Samples. Im Lagrange'schen Schema simuliert man die Lagrange'schen Trajektorien wie einen stochastischen Prozess [2–6] (betrachtet als eine Lösung eines Systems stochastischer Differentialgleichungen). In Euler'schen Methoden ist es im Prinzip möglich, die Geschwindigkeit bei der DNS-Methode (Direct Numerical Simulation Method) zu simulieren. Die Pionierarbeiten von S. Orszag, der die DNS-Methode vorschlug, waren an Navier-Stokes-Gleichungen erprobt. Leider ist diese Methode nicht anwendbar, wenn die Reynolds-Zahl sehr groß ist. Das bedeutet, dass man nicht die völlig entwickelte Turbulenz mit DNS (wie auch mit anderen numerischen Methoden) simulieren kann. Deshalb ist die stochastische Behandlung der völlig entwickelten Turbulenz sehr wichtig. Die stochastische Theorie der Turbulenz wurde wesentlich von Taylor, Richardson, Kolmogorov und Obukhov entwickelt. Die stochastische Simulation des turbulenten Transports, die auf der Randomized-Spektral-Darstellung der Euler'schen turbulenten Geschwindigkeit basierte, wurde zuerst von R. Kraichnan betrachtet. Dieses Modell wurde von weiteren Autoren entwickelt, ausgerichtet und verallgemeinert, und in [31] wurde eine weitere Methode, die so genannte „Backward Trajectory Technique“ eingeführt. Diese Methode ermöglicht es, die Konzentration des Schadstoffes und die Lagrange'sche Korrelationsfunktion effektiv zu berechnen. Leider ist diese Methode, die auf Monte-Carlo-Simulation der Euler'schen Geschwindigkeit basiert, nur anwendbar, wenn die Geschwindigkeitsfelder homogen und gaußverteilt sind. In praktischen Anwendungen, wie z. B. Schichten der Atmosphäre, sind die Geschwindigkeitsfelder im Wesentlichen nichthomogen. Deshalb sind die Lagrange'schen stochastischen Modelle (LSM) entwickelt worden, die nichthomogene wie auch nichtgaußsche Geschwindigkeitsverteilungen

berücksichtigen. Wir beschreiben nun die wichtigsten Prinzipien, auf denen die LSM-Methode basiert. In der LSM-Beschreibung ist die wahre Trajektorie $\mathbf{X}(t)$ durch eine simulierte Trajektorie $\hat{\mathbf{X}}(t)$ approximiert, die wie eine Lösung von einer stochastischen Differentialgleichung des Ito-Typs konstruiert ist (siehe z. B. [6], [29], [34]):

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

wobei mit $\hat{V}_1, \hat{V}_2, \hat{V}_3$ die Komponenten der simulierten Lagrange'schen Geschwindigkeit und mit $B_1(t), B_2(t), B_3(t)$ die standardunabhängigen Wiener-Prozesse bezeichnet sind; a_i und b_{ij} sind im Allgemeinen Funktionen von $(t, \hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{V}})$. Hier benutzen wir die Summierungs-Konvention. Im idealen Fall wünschte man sich, dass wahre und simulierte Trajektorien identisch sind: $\hat{V}_i(t) = u_i(\hat{\mathbf{X}}(t), t)$. Aber es ist nicht realistisch, solche Modelle zu konstruieren. Deshalb benutzt man folgende wichtige Prinzipien: Das „*Consistency principle*“ erfordert, dass die Statistik simulierter Trajektorien $\hat{\mathbf{X}}(t), \hat{\mathbf{V}}(t)$ und die von wahren Trajektorien $\mathbf{X}(t), \mathbf{V}(t)$ die gleichen Eigenschaften haben. Die Lagrange'schen Geschwindigkeitskomponenten sind wie $\mathbf{V}(t) = \mathbf{u}(\mathbf{X}(t), t)$ definiert.

Laut Kolmogorov'scher Analogie-Theorie gilt $\langle dV_i dV_j \rangle = \delta_{ij} C_0 \varepsilon dt$, $i, j = 1, 2, 3$, wobei wir folgende Bezeichnungen benutzen: dV_i für die Inkrementskomponente der Lagrange'schen Geschwindigkeit, ε ist die Mittelrate der Dissipation von Turbulenzenergie, C_0 ist eine universelle Konstante ([24]) und δ_{ij} ist das Kronecker'sche Symbol. Durch $\langle \cdot \rangle$ bezeichnet man den Erwartungswert. Das heißt, dass (siehe z. B. [34]) in (2) die Koeffizienten b_{ij} durch $b_{ij} = \sqrt{C_0 \varepsilon} \delta_{ij}$ definiert sind. Die „well-mixed condition“ ist in der folgenden Form geschrieben ([34]):

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

Die Funktion $p_E(u_1, u_2, u_3; \mathbf{x}, t)$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte der Euler'schen Geschwindigkeit im Punkt \mathbf{x} zur Zeit t . Es wird vorausgesetzt, dass diese Funktion gegeben ist, und in der Praxis nimmt man häufig an, dass sie gaußverteilt ist. Die Gleichung (3) ist ein System für die unbekannte Vektorfunktion $\phi = (\phi_1, \phi_2, \phi_3)$, die die Drift-Glieder ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 nicht eindeutig definiert. Tatsächlich können wir eine ganze Reihe von Lösungen durch Addieren von ϕ zu einer beliebigen Vektorfunktion, deren Divergenz im Geschwindigkeitsraum null ist, bekommen.

Es ist bekannt, dass die „well-mixed condition“ nur in Dimension eins das LS-Modell eindeutig definiert ([34]). Im mehrdimensionalen Raum besteht folgendes Problem, das *Eindeutigkeitsproblem* genannt wird: Gesucht sind zusätzliche mathematische Bedingungen, die auch physikalische Bedeutungen haben, die zusammen mit der „well-mixed condition“ eindeutig die Funktionen ϕ_u, ϕ_v, ϕ_w definieren. Das heißt, gesucht werden die Beschleunigungs-Koeffizienten a_u, a_v, a_w , die das LS-Modell eindeutig durch (3) definieren.

Es ist uns gelungen (siehe [6]), ein physikalisch-statistisches Prinzip einzuführen, das das *Eindeutigkeitsproblem* für „convective“ und „neutral stratified“ Schichten der Atmosphäre löst. In [10] haben wir eine Validierung von entwickelten stochastischen Modellen durchgeführt und mit DNS-Daten verglichen.

Simulation der Ultraschallausbreitung (Bearbeiter: P. Mathé, W. Metzner, J.-H. Zacharias-Langhans).

In diesem Projekt ging es darum, Ideen, die aus der Laser-Tomografie stammen, auf die Ultraschall-Tomografie zu übertragen. Ziel war es, die Auflösungsmöglichkeiten bei Ultraschalluntersuchungen in den Bereichen Medizin und Materialprüfung zu verbessern. Während herkömmliche Ultraschallverfahren lediglich reflektierende Grenzflächen auflösen können, soll

ein alternatives Verfahren zu einer Charakterisierung des von der Schallwelle durchlaufenen Mediums führen. Unmittelbare Anwendungsmöglichkeiten bieten sich in der Medizin, z. B. bei der Krebsdiagnose, sowie in der Materialprüfung, z. B. bei Asbest-Sanierungen.

Im Rahmen des Projekts wurden von R. Willenbrock und W. Metzner Messungen an verschiedenen Materialien durchgeführt mit dem Ziel, die hierbei auftretenden Signalveränderungen mit materialspezifischen Eigenschaften, wie der Streu- und Absorptionsfähigkeit, in Verbindung zu bringen. Weiterhin sollte überprüft werden, ob die Telegrafengleichung — als eine Zwischenstufe zwischen Wellen- und Diffusionsgleichung — geeignet ist, die Ausbreitung von Ultraschallwellen in stark streuenden Medien zu beschreiben. Wie sich im Laufe der Untersuchungen herausgestellt hat, sind die beobachteten Signalverformungen im Wesentlichen auf die verwendete Messapparatur zurückzuführen, und die Telegrafengleichung ist, zumindest im Bereich zeitaufgelöster Signale, mit einer gedämpften Wellengleichung äquivalent.

Andererseits haben numerische Experimente mit zufälligen frequenzbandbeschränkten Dichte- bzw. Geschwindigkeitsprofilen gezeigt, dass die Signale charakteristische Deformationen erfahren können, z. B. Pulsverbreiterung und Coda-Ausbildung. Wir sind der Ansicht, dass in diesem Bereich die gesuchte Analogie zur Lasertomografie gezogen werden kann. Um dies zu bestätigen, müssen erheblich aufwendigere Messungen durchgeführt werden. Die technischen Voraussetzungen hierzu wurden von der Firma G&W-Instruments erst teilweise realisiert.

Es wurde auch Software entwickelt, die dem Experimentator erlaubt, gemessene Signale schnell und bequem zu analysieren, z. B. um Korrekturen des experimentellen Aufbaus vorzunehmen. Das Programm wird grafisch gesteuert und bietet dem Benutzer die Möglichkeit, mehrere Signale gleichzeitig zu bearbeiten und zu vergleichen, Distanzen zu bestimmen, automatische Skalenanpassungen vorzunehmen usw. Außerdem enthält es verschiedene Werkzeuge zur Signalverarbeitung, wie Rauschfilter, Datenreduktion und Frequenzanalyse, Wavelettransformation und beliebige Interpolation, sowie einen Simulator für (eindimensionale) Wellenausbreitung, mit dem die Versuchsbedingungen nachgestellt werden können.

Die mathematischen Untersuchungen zur Lösung der Telegrafengleichung mit Monte-Carlo-Methoden ([4, 5]) führten zur Analyse von Prozessen auf Lie-Gruppen, die auf bestimmte Weise durch einen Poissonprozess gestört werden ([36]). Die Übertragung des Kac'schen Verfahrens auf höhere Raumdimensionen ist problematisch. Die von Orsingher vorgeschlagene Irrfahrt ([28]) in zwei Raumdimensionen führt nämlich nicht auf die Lösung der Telegrafengleichung, so dass nur die von Veselovskaya ([35]) analysierte Verallgemeinerung des Kac'schen Verfahrens als stochastisches Verfahren bleibt.

Die Arbeiten am Projekt endeten mit Auslaufen der Förderung durch das BMBF. Eine ausführliche Darstellung der Arbeit im Rahmen des Projekts findet sich in [15].

Wahrscheinlichkeitstheoretische Verfahren für die Lösung von Randwertproblemen. Numerische Analysis für Probleme der Stochastischen Dynamik. Wahrscheinlichkeitstheoretische Verfahren (Bearbeiter: G. N. Milstein).

In diesem Teilprojekt werden numerische Verfahren zur Lösung nichtlinearer parabolischer und elliptischer Gleichungen entwickelt und analysiert, siehe [19, 20]. Die Grundidee besteht in der Kombination von bekannten stochastischen Darstellungen von Lösungen linearer partieller Differentialgleichungen mit Techniken für schwache Lösungen stochastischer Differentialgleichungen. Eine Reihe neuer und effizienter Algorithmen, die sowohl ortsabhängige Koeffizienten, als auch Beziehungen zwischen Diffusion und Advektion berücksichtigen, wird vorgeschlagen. Ein weiterer Untersuchungsgegenstand waren Phänomene stochastischer Resonanz und des gerichteten Transports in derartigen Systemen ([21, 22]). Stabilitätseigenschaften stochastischer Systeme wurden in [18, 23] analysiert.

Dynamische Monte-Carlo-Verfahren (Bearbeiter: P. Mathé).
Viele physikalisch relevante Größen sind entweder Mittelwerte

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

oder aber deren Bestimmung erfordert als Teilaufgabe Mittelwerte (Integralgleichungen, Transportgleichungen, statistische Physik). Oftmals ist die unmittelbare Simulation der die Mittel bestimmenden Verteilung nicht möglich. Genannt seien hier Mittel bezüglich Gibbs'scher Maße. In derartigen Anwendungen ist die Erzeugung von Zufallszahlen als Markovketten, die asymptotisch die gegebene Verteilung realisieren, ein Ausweg, der historisch in [16] begründet wurde. Dies führt auf Integrationsverfahren mittels Markovketten, wobei obiges Mittel $I(f)$ approximativ bestimmt wird durch

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

mit X_1, X_2, \dots, X_N Realisierungen einer Markovkette. In konkreten Anwendungen gibt es viele Markovketten, die die gleiche asymptotische Verteilung realisieren. Dann kommt es darauf an, Eigenschaften und Parameter zu identifizieren, die die Konvergenzeigenschaften der Verfahren bestimmen.

Im Mittelpunkt der Untersuchungen stand die Frage der Robustheit, d. h. der Gleichmäßigkeit der Konvergenz auf Klassen von Integranden sowie der asymptotischen Varianz, des Monte-Carlo-Fehlers. Bisherige Ergebnisse konnten für den Fall *gleichmäßig ergodischer Markovketten* erzielt werden, siehe [11]. Es ist jedoch bekannt ([3]), dass auf nichtkompakten Zustandsräumen Markovketten im Allgemeinen nicht gleichmäßig ergodisch sein können. Vielmehr ist das für diesen Fall adäquate Konzept das der *V-gleichmäßig ergodischen Markovketten*, die in [17, Kapitel 16] eingeführt wurden. Im Rahmen des Teilprojekts wurde analysiert, auf welchen Klassen von Integranden gleichmäßige Fehlerabschätzungen bei der Integration mittels *V-gleichmäßig ergodischer Markovketten* möglich sind.

Eine weiterer Gegenstand war das Studium der Simulation von bedingten stochastischen Prozessen ([13]). Wenn die Anzahl der Bedingungen groß wird, kann eine Simulation nur dann schnell erfolgen, wenn für jeden gegebenen Zeitpunkt nur wenige benachbarte Zeitpunkte von Bedeutung sind. Es zeigt sich, dass dies nur für Markovprozesse der Fall ist. Für Gauß'sche Markovprozesse werden explizite Formeln der bedingten Erwartung und Varianz angegeben.

Literatur

1. S. N. DUBTSOV, A. I. LEVYKIN, K. K. SABELFELD, *Kinetics of aerosol formation during tungsten hexacarbonyl photolysis*, J. Aerosol Sci., **31** (2000), No. 5, pp. 509–518.
2. T. K. FLESCH, J. D. WILSON, *A two-dimensional trajectory-simulation model for non-Gaussian, inhomogeneous turbulence within plant canopies*, Boundary-Layer Meteorology, **61** (1992), pp. 349–374.
3. S. F. JARNER, E. HANSEN, *Geometric ergodicity of Metropolis algorithms*, Stochastic Process. Appl., **85** (2000), No. 2, pp. 341–361.
4. M. KAC, *A stochastic model related to the telegrapher's equation*, Rocky Mountains J. Math., **4** (1974), pp. 497–509.

5. J. KISYŃSKI, *On M. Kac's probabilistic formula for the solution of the telegraphist's equation*, Ann. Polon. Math., **XXIX** (1974), pp. 259–272.
6. O. A. KURBANMURADOV, K. K. SABELFELD, *Lagrangian stochastic models for turbulent dispersion in the atmospheric boundary layer*, Boundary-Layer Meteorology, **97** (2000), No. 2, pp. 191–218.
7. —, *Coagulation of aerosol particles in intermittent turbulent flows*, Monte Carlo Meth. Appl., **6** (2000), No. 3, pp. 211–253.
8. O. A. KURBANMURADOV, U. RANNIK, K. K. SABELFELD, T. VESALA, *Estimation of mean concentration and fluxes by stochastic Lagrangian models with application to footprint problem*, Math. Comput. Simulation, (2000) im Druck.
9. —, *Evaluation of mean concentration and fluxes in turbulent flows by Lagrangian stochastic models*, WIAS-Peprint No. 575, 2000.
10. O. A. KURBANMURADOV, S. A. ORSZAG, K. K. SABELFELD, P. K. YEUNG, *Analysis of relative dispersion of two particles by Lagrangian stochastic models and DNS methods*, erscheint 2001 in: J. Fluid Mech.
11. P. MATHÉ, *Numerical integration using Markov chains*, Monte Carlo Meth. Appl., **5** (1999), No. 4, pp. 325–343.
12. —, *Numerical integration using V -uniformly ergodic Markov chains*, Manuskript, 2000.
13. P. MATHÉ, B. SCHMIDT, *Interpolation of Gauss-Markov processes*, Preprint No. A/20, Freie Universität Berlin, 2000.
14. P. MATHÉ, H. ZACHARIAS-LANGHANS, *On scattering of ultrasonic waves*, Manuskript, 1999 eingereicht.
15. —, *Projektabschlussbericht*, wias-berlin.de/research/projects/ultra, 2000.
16. N. METROPOLIS, A. W. ROSENBLUTH, M. N. ROSENBLUTH, A. H. TELLER, E. TELLER, *Equations of state calculations by fast computing machines*, J. Chem. Phys., **21** (1953), pp. 1087–1092.
17. S. P. MEYN, R. L. TWEEDIE, *Markov chains and stochastic stability*, Springer, London, 1993.
18. G. N. MILSTEIN, *Orbital stability index for stochastic systems*, Stochastic Anal. Appl., **18** (2000), No. 5, pp. 777–809.
19. G. N. MILSTEIN, M. V. TRETYAKOV, *Numerical algorithms for semilinear parabolic equations with small parameter based on weak approximation of stochastic differential equations*, Math. Comp., **60** (2000), No. 229, pp. 237–267.
20. —, *Numerical solution of the Neumann problem for nonlinear parabolic equations by probability approach*, WIAS-Preprint No. 589, 2000.

21. —, *Numerical analysis of noise-induced regular oscillations*, Phys. D, **140** (2000), No. 3/4, pp. 244–256.
22. —, *Unidirectional transport in stochastic ratchets*, WIAS-Preprint No. 590, 2000.
23. G. N. MILSTEIN, A. Y. VERETENNIKOV, *On deterministic and stochastic sliding modes via small diffusion approximation*, Markov Proc. Related Fields, **6** (2000), No. 3, pp. 371–395.
24. A. S. MONIN, A. M. YAGLOM, *Statistical Fluid Mechanics*, M.I.T. Press, Cambridge, Massachusetts, No. 2, 1975.
25. A. ONISCHUK, A. LEVYKIN, V. STRUNIN, M. USHAKOVA, R. SAMOILOVA, K. K. SABELFELD, V. PANFILOV, *Aerosol formation under heterogeneous/homogeneous thermal decomposition of silane: Experiment and numerical modeling*, J. Aerosol Sci., **31** (2000), No. 8, pp. 879–906.
26. —, *Aggregate under homogeneous silane thermal decomposition*, J. Aerosol Sci., **31** (2000), No. 11, pp. 1263–1281.
27. A. ONISHUK, S. DI STASIO, A. LEVYKIN, V. STRUNIN, V. KARASEV, K. K. SABELFELD, V. PANFILOV, *The role of dipole interactions in coagulation of silicon agglomerates*, J. Aerosol Sci., **31** (2000), pp. 950–951.
28. E. ORSINGER, *A planar random motion governed by the two-dimensional telegraph equation*, J. Appl. Probab., **23** (1986), pp. 385–397.
29. S. B. POPE, *Lagrangian PDF methods for turbulent flows*, Annu. Rev. Fluid Mech., **26** (1994), pp. 23–63.
30. U. RANNIK, M. AUBINET, O. KURBANMURADOV, K. K. SABELFELD, T. MARKKANEN, T. VESALA, *Footprint analysis for measurements over a heterogeneous forest*, Boundary-Layer Meteorology, **97** (2000), No. 1, pp. 137–166.
31. K. K. SABELFELD, *Monte Carlo Methods in Boundary Value Problems*, Springer, New York, Heidelberg, Berlin, 1991, 283 S.
32. K. K. SABELFELD, I. A. SHALIMOVA, *Forward and backward Lagrangian stochastic models of turbulent transport*, WIAS-Preprint No. 609, 2000.
33. —, *Invertible stochastic Lagrangian models coupled through the well-mixed condition*, Math. Comput. Simulation, 2000, im Druck.
34. D. J. THOMSON, *Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows*, J. Fluid. Mech., **180** (1987), pp. 529–556.
35. A. Z. VESELOVSKAYA, *Solution of the Cauchy problem for some quasilinear hyperbolic equations by the Monte Carlo method*, Vestnik Leningrad. Univ. Math. Mekh. Astronom., **133** (1986), pp. 15–20.
36. J. H. ZACHARIAS-LANGHANS, *Group structure of radiation transport*, Manuskript, 2000.

4.7 Forschungsgruppe Kontinuumsmechanik

4.7.1 Zusammenfassung

Die Forschungsgruppe hatte im Berichtszeitraum zwei Hauptforschungsrichtungen

- Massenaustausch und Wellenausbreitung in porösen Medien,
- Mikro-Makro-Übergänge.

Das Projekt über nichtisotherme Massenaustauschprozesse in porösen Körpern wird in der Forschungsgruppe seit mehreren Jahren bearbeitet. Ergebnisse wurden bis jetzt für isotherme Prozesse (Adsorption) eingeschränkt. In diesem Jahr wurde gezeigt, dass das eigene Modell um Wärmeübertragung ergänzt werden kann. Damit wurden die Voraussetzungen für Beschreibungen von chemischen Reaktionen in mehrkomponentigen porösen Körpern geschaffen. Diese thermodynamische Untersuchung wurde durch ein Beispiel von strukturell instabilen Vorgängen in einem nichtlinearen Modell von granularen Stoffen ergänzt. Das Projekt ist in Zusammenarbeit mit Universitäten in Pisa (Italien) und Innsbruck (Österreich) durchgeführt worden.

Im Projekt Wellenausbreitung in porösen und granularen Stoffen wurden weiter Oberflächenwellen untersucht. Eine neue Ausbreitungsmodi auf einer Kontaktfläche zwischen zwei porösen Körpern wurde entdeckt. In Zusammenarbeit mit der Universität in Turin (Italien) und dem Studio Geotecnico Italiano (Mailand, Italien) wurden die ersten Vergleiche der Theorie mit *In-situ*-Experimenten gemacht. Diese Zusammenarbeit wird fortgesetzt. Auch die Untersuchung von nichtlinearen Wellen wurde fortgesetzt. Mit Hilfe der asymptotischen Analyse eines schwach nichtlinearen Modells wurde bewiesen, dass Differenzen zwischen porösen und granularen Stoffen erst in der zweiten Ordnung sichtbar werden. Diese Ordnung bestimmt die Entwicklung von Amplituden der Soliton-ähnlichen Wellen.

Die Aktivitäten der Forschungsgruppe Kontinuumsmechanik auf dem Gebiet der Mikro-Makro-Übergänge gliedern sich in die drei Unterprojekte

- Mehrskalenmodellierung thermomechanischer Körper, gefördert im DFG-Schwerpunktprogramm *Analysis, Modellbildung und Simulation von Mehrskalenproblemen*,
- Phasenübergänge, gefördert im BMBF-Förderprogramm *Mathematische Methoden in Industrie und Dienstleistungen*,
- Kinetische Behandlung von ausgewählten Anfangs- und Randwertproblemen für hyperbolische Systeme und kinetische Gleichungen, gefördert im DFG-Normalverfahren.

Darüber hinaus wurden im Berichtszeitraum zwei rein industrielle Anwendungen bearbeitet:

- Simulation eines zweiphasigen Kühlsystems, finanziert durch Motorola Advanced Interconnect Systems Laboratory, München,
- Spannungsanalyse einer einkristallinen Waferplatte aus Gallium-Arsenid, finanziert durch die Freiburger Compound Materials GmbH, Freiberg.

Das Projekt über Mehrskalenmodellierung ist ein Gemeinschaftsprojekt mit J. Sprekels und seiner Gruppe. Dieses Projekt schafft die mathematischen und physikalischen Grundlagen für eine erfolgreiche Modellierung auf mesoskopischer Ebene. Insbesondere werden hier wesentliche Fragen im Zusammenhang mit den von Dreyer/Sprekels behandelten Phasenfeldsystemen geklärt. Außerdem werden hier die Voraussetzungen für eine erfolgreiche Bearbeitung des Projekts

über Phasenübergänge geschaffen, wo zur Modellierung und Simulation der Entstehung des Wachstums und der Auflösung von Arsenausscheidungen in einkristallinem Gallium-Arsenid drei Mikroskalen simultan betrachtet werden müssen.

Die im Projekt über hyperbolische Anfangs- und Randwertprobleme entwickelten Lösungsmethoden basieren ebenfalls auf Mikro-Makro-Übergängen. Zurzeit werden im Wesentlichen die Boltzmann-Peierls-Gleichung und die zugeordneten hyperbolischen Systeme untersucht. Es konnte gezeigt werden, dass das Maximum-Entropie-Prinzip uneingeschränkt und erfolgreich angewendet werden kann. Dies ist ein wichtiges Resultat, denn im Berichtszeitraum wurde ebenfalls die Nichtanwendbarkeit dieses Prinzips auf die Momentensysteme der Fokker-Planck-Gleichung rigoros bewiesen.

4.7.2 Projekte

Kinetische Behandlung von ausgewählten Anfangs- und Randwertproblemen für hyperbolische Systeme

Bearbeiter: W. Dreyer, M. Herrmann, M. Kunik

Kooperation: M. Junk (Fachbereich Mathematik, Universität Kaiserslautern)

Förderung: DFG: „Kinetische Lösungen für ausgewählte hyperbolische Anfangs- und Randwertprobleme“

Für M Felder $u_A(t, x)$, $A \in \{1, 2, \dots, M\}$, untersuchen wir Anfangs- und Randwertprobleme für hyperbolische Systeme der folgenden Gestalt:

(i) Wir betrachten einen Normalbereich Ω in der Raumzeit mit positiv orientiertem Flächenelement des Randes $\partial\Omega$ und gehen von Bilanzgleichungen für die Felder u_A aus, die lauten

$$\oint_{\partial\Omega} (u_A, F_{Ak}) d\vec{o} = \int_{\Omega} P_A dt d^3x, \quad (1)$$

bzw. bei stetiger Differenzierbarkeit der Größen

$$\frac{\partial u_A}{\partial t} + \frac{\partial F_{Ak}}{\partial x_k} = P_A. \quad (2)$$

(ii) Die Flussdichten F_{Ak} und die Produktionsdichten P_A sind durch lokale Funktionen der Felder u_B gegeben, so dass die resultierenden Feldgleichungen hyperbolisch sind und darüber hinaus eine konkave Entropiedichte mit nichtnegativer Produktionsdichte implizieren.

(iii) Wir untersuchen ausschließlich Systeme der angegebenen Gestalt, die sich aus einer darunter liegenden kinetischen Theorie herleiten lassen und wo die Funktionen $F_{Ak}(u_1, \dots, u_M)$ aus dem *Maximum-Entropie-Prinzip (MEP)* folgen.

Im Berichtszeitraum haben wir folgende Systeme betrachtet:

- das Euler-System für ein einatomiges ideales Gas, mit der Krook-Version der Boltzmann-Gleichung als kinetischer Gleichung,
- das Momenten-System für Brown'sche Teilchen, mit der Fokker-Planck-Gleichung als kinetischer Gleichung,
- das 4-Feld-System für die Felder Energiedichte und Wärmefluss des Phonon-Bose-Gases, mit der Boltzmann-Peierls-Gleichung als kinetischer Gleichung.
- Erweiterungen des 4-Feld-Systems mit beliebig vielen Momenten der Phonon-Bose-Phasendichte.

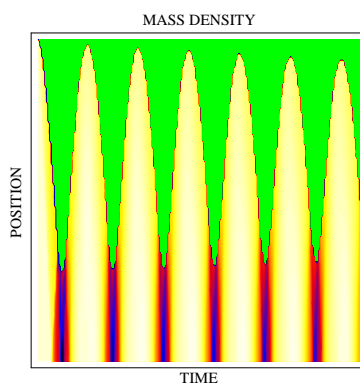
Wir haben folgende Fragestellungen untersucht:

- Existieren die über das *MEP* bestimmten Phasendichten und die hieraus gebildeten Momente?

Auf der Grundlage der von M. Junk gemachten Beobachtungen lautet die Antwort: Für das einatomige ideale Gas, welches durch Momentensysteme mit mehr als den ersten zehn Momenten beschrieben wird — dies sind vier Momente in $1D$ — hat das *MEP* keine Lösung. Dasselbe gilt für das Momentensystem, das auf der Fokker-Planck-Gleichung aufgebaut ist. Hier haben wir herausgefunden, dass das *MEP* sogar in Gleichgewichtsnähe singularär ist. Für das Phonon-Bose-Gas hat das *MEP* Lösungen, und die *MEP*-Phasendichte konvergiert sogar punktweise gegen eine gegebene Phasendichte, wenn genügend Momente berücksichtigt werden.

- Lassen sich makroskopische Randdaten über Randvorgaben der Phasendichte realisieren?

Die Wechselwirkung der kinetischen Teilchen mit dem Rand wird über eine Fortsetzungsvorschrift (extension law) ausgegeben, die die Phasendichte auf dem Rand vollständig festlegt.



Mit dieser neuen Methode konnten wir sogar instationäre Randwertaufgaben lösen, bei denen die Lage des Randes zunächst unbestimmt und selbst Bestandteil der Lösung ist. Die nebenstehende Abbildung zeigt beispielsweise die Evolution der Masendichte in einem Zylinder-Kolben-System, welches mit einem idealen Gas gefüllt ist. Die Bewegung des adiabaten Kolbens wird durch Schwerkraft und durch die Wechselwirkung zwischen Gasteilchen und Kolbenwand hervorgerufen. Die Farben repräsentieren das Dichtefeld entsprechend der Eulergleichungen, und wir beobachten, dass es aufgrund der Kolbenbewegung zu Stößen im Gas kommt.

- Wie lassen sich Lösungen von kinetischen Gleichungen vom Relaxationstyp direkt vergleichen mit Lösungen des zugehörigen hyperbolischen Momentensystems?

Die Lösung dieser Problemstellung basiert auf der folgenden Methode: Wir haben die von uns für Momentensysteme entwickelten kinetischen Schemata über das *MEP* derart verallgemeinert, dass hiermit die kinetische Gleichung selbst gelöst werden kann. Die Lösungen beider Problemklassen haben folglich die gleichen Darstellungen und können somit direkt verglichen werden.

Literatur

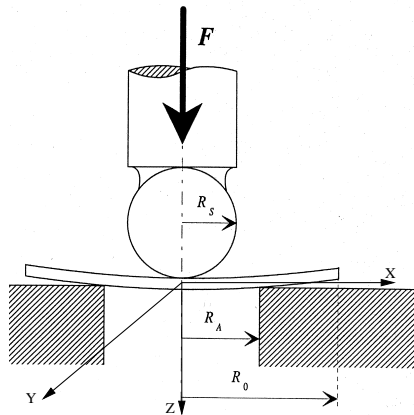
1. DFG-Projekt DR 401/2-2 *Kinetische Behandlung von ausgewählten hyperbolischen Anfangs- und Randwertproblemen*.
2. W. DREYER, M. JUNK, M. KUNIK, *On the approximation of kinetic equations by moment systems*, WIAS-Preprint No. 592, 2000, eingereicht.
3. W. DREYER, M. HERRMANN, M. KUNIK, *Kinetic schemes and initial boundary value problems for the Euler system*. WIAS-Preprint No. 607, 2000, eingereicht.

Spannungsanalyse einer einkristallinen Waferplatte aus Gallium-Arsenid

Bearbeiter: W. Dreyer, F. Duderstadt

Kooperation: S. Eichler (Freiberger Compound Materials GmbH, Freiberg)

Förderung: Freiberger Compound Materials GmbH (FCM) (Freiberg)



Gemäß der nebenstehenden Abbildung führt die FCM Bruchtests mit runden GaAs-Waferplatten durch. Im Test liegen die Platten konzentrisch auf einem Stützring. Die Last F wird durch einen kugelförmigen Stempel aufgebracht. Das WIAS berechnet für vorgegebene Last alle in der Waferplatte auftretenden Spannungsfelder sowie die Durchbiegung der Waferplatte. Hieraus werden die für die Bruchfestigkeit bedeutsamen maximalen Zugspannungen und die maximale Durchbiegung ermittelt.

Der Berechnung liegen die folgenden Annahmen zugrunde:

- Die GaAs-Platte wird als kubisch anisotropes elastisches Material behandelt. Die (001) Richtung fällt mit der Lastrichtung zusammen.
- Die Übertragung der Last F mittels der Kugel führt zu einer Kontaktfläche Kugel/Wafer, deren Größe mit der Theorie Hertz'scher Pressung für anisotrope Materialien berechnet wird. Diese Theorie liefert außerdem die Druckverteilung auf der Kontaktfläche.
- Der Stützring wird als starr angenommen.
- Die Verhältnisse an der Kontaktfläche Stützring/Wafer bei R_A werden derart modelliert, dass hier die Durchbiegung null sein soll und dass die Waferplatte hier kein Biegemoment aufnimmt.

Die Variablen sind die rechtwinklig kartesischen Komponenten u, v, w der Verschiebung sowie die Querkräfte q_α , $\alpha \in \{1, 2\}$. Die Verschiebungen haben für schubsteife dünne Platten in Lagrange'schen Koordinaten X, Y, Z die Darstellung

$$u = -\partial_X W(X, Y)Z + U(X, Y), \quad v = -\partial_Y W(X, Y)Z + V(X, Y), \quad w = W(X, Y). \quad (1)$$

Die Feldgleichungen für diese Variablen basieren auf den Gleichgewichtsbedingungen

$$\frac{\partial n_{\alpha\beta}}{\partial X_\beta} = 0, \quad \frac{\partial q_\beta}{\partial X_\beta} + \frac{\partial}{\partial X_\beta} \left(\frac{\partial W}{\partial X_\gamma} n_{\gamma\beta} \right) = -P(X, Y), \quad \frac{\partial m_{\alpha\beta}}{\partial X_\beta} - q_\alpha = 0, \quad (2)$$

wo die Funktion $P(X, Y)$ die an der Kontaktfläche zwischen Druckkugel und Platte entsprechend der Hertz'schen Theorie wirkende Flächenlast ist. Die Komponenten des Schnittkrafttensors

$n_{\alpha\beta}$ und des Schnittmomententensors $m_{\alpha\beta}$ lauten für ein einkristallines Material mit kubischer Kristallsymmetrie

$$\begin{aligned} n_{11} &= \frac{h}{2(s_{11}^2 - s_{12}^2)} \left(s_{11} \left(2\partial_X U + (\partial_X W)^2 \right) - s_{12} \left(2\partial_Y V + (\partial_Y W)^2 \right) \right), \\ n_{22} &= \frac{h}{2(s_{11}^2 - s_{12}^2)} \left(s_{11} \left(2\partial_Y V + (\partial_Y W)^2 \right) - s_{12} \left(2\partial_X U + (\partial_X W)^2 \right) \right), \\ n_{12} &= \frac{h}{4s_{44}} (\partial_Y U + \partial_X V + \partial_X W \partial_Y W) \end{aligned} \quad (3)$$

sowie

$$m_{\alpha\beta} = \frac{h^3}{12} \left(\frac{s_{12}}{s_{11}^2 - s_{12}^2} \frac{\partial^2 W}{\partial X_\gamma \partial X_\gamma} \delta_{\alpha\beta} - \frac{1}{2s_{44}} \frac{\partial^2 W}{\partial X_\alpha \partial X_\beta} - \left(\frac{1}{s_{11} - s_{12}} - \frac{1}{2s_{44}} \right) \delta_{\alpha\beta\gamma\delta} \frac{\partial^2 W}{\partial X_\gamma \partial X_\delta} \right). \quad (4)$$

Hier bezeichnet h die Dicke der Platte, und die Konstanten s_{11} , s_{12} und s_{44} sind die unabhängigen Komponenten der Nachgiebigkeitsmatrix.

Die Randbedingungen für dieses System sind

$$\left(U - \frac{h}{2} \frac{\partial W}{\partial X} \right) \Big|_{(X,Y)=\{(-R_A,0),(R_A,0),(0,-R_A),U(0,R_A)\}} = 0 \quad \text{oder } n_{\alpha\beta}|_A = 0 \quad \text{sonst.} \quad (5)$$

$$\left(V - \frac{h}{2} \frac{\partial W}{\partial Y} \right) \Big|_{(X,Y)=\{(-R_A,0),(R_A,0),(0,-R_A),U(0,R_A)\}} = 0$$

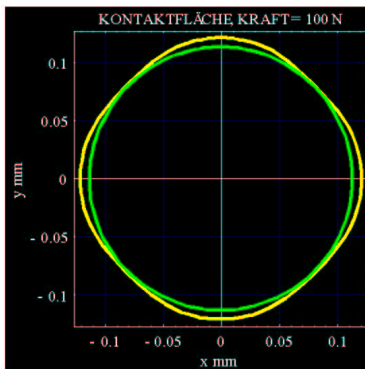
$$W \Big|_{(X,Y)=\{(-R_A,0),(R_A,0),(0,-R_A),U(0,R_A)\}} = 0 \quad \text{oder } q_N|_A = 0 \quad \text{sonst.} \quad (6)$$

$$m_{NN}|_A = 0. \quad (7)$$

Eine Kontrollrechnung mit diesen Randbedingungen, die eine 4-Punkt-Auflage mit drehbarer Lagerung simulieren, führte bei den vorliegenden Materialdaten zu dem Ergebnis $W > 0$, was aber durch den Auflagering verhindert wird. Somit ist

$$\left(U - \frac{h}{2} \frac{\partial W}{\partial X} \right) \Big|_A = 0, \quad \left(V - \frac{h}{2} \frac{\partial W}{\partial Y} \right) \Big|_A = 0, \quad W|_A = 0, \quad m_{NN}|_A = 0 \quad (8)$$

die natürliche Randbedingung, welche ausdrückt: Die Platte liegt vollständig drehbar auf dem Auflagering.



Die Berechnung der Flächenlast $P(X,Y)$ setzt die Lösung des Kontaktproblems Druckkugel/Waferplatte entsprechend der Hertz'schen Theorie voraus. Die nebenstehende Abbildung zeigt die entstehende Kontaktfläche, die eine Kugel aus isotropem Material auf einer einkristallinen Platte mit kubischer Symmetrie induziert. Der ebenfalls eingezeichnete Kreis entsteht durch Isotropisierung der drei elastischen Konstanten in der Voigt'schen Näherung.

Gelöst wird das beschriebene System mit finiten Elementen, wobei Dreieckselemente mit unterschiedlichen Ansätzen für das Problem (2)₁, (3) und für das Problem (2)_{2,3}, (5) auf einem Netz

verwendet werden müssen. Das erstere Problem wird mit C^2 -Hermite'schen Ansatzfunktionen gerechnet, während wir für das zweite Problem C^1 -Hermite'sche Ansatzfunktionen verwendet haben. Mit Simplexelementen ist das hier vorgestellte Plattenproblem auch in $3D$ nicht lösbar. Bis zum Redaktionsschluss waren die Arbeiten noch nicht abgeschlossen.

Simulation eines zweiphasigen Kühlsystems

Bearbeiter: W. Dreyer

Kooperation: F. Rehme, T. Hauck (Motorola Advanced Interconnect Systems Laboratory, München), W. H. Müller (Heriot-Watt University, Edinburgh, Großbritannien)

Förderung: Motorola Advanced Interconnect Systems Laboratory (München)

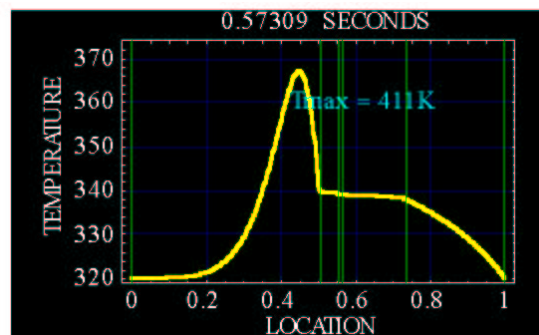
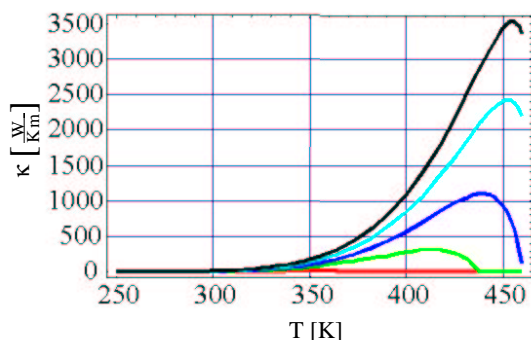
Dies ist eine Studie über die Möglichkeit, die Verdampfungswärme einer siedenden Flüssigkeit zur Kühlung eines Halbleiter-Power-Moduls einzusetzen. Hierzu wird das Powermodul über eine siedende Flüssigkeit mit einem konventionellen Kondensator in Kontakt gebracht.

Der Kühlprozess wird wie folgt modelliert: (i) An der Kontaktfläche zwischen dem Powermodul und der zweiphasigen Flüssigkeit entstehen kleine Dampfblasen. Die hierzu notwendige Energie wird dem Powermodul entzogen, und folglich sinkt dessen Temperatur. (ii) Die Dampfblasen bewegen sich diffusiv zum Kondensator, wo sie wieder in Flüssigkeit zurückverwandelt werden. Die lokale mittlere Geschwindigkeit dieser zweiphasigen Mischung soll null sein.

Das Ziel dieses Modells ist die Herleitung einer effektiven spezifischen Wärme c_{Co} und einer effektiven Wärmeleitfähigkeit κ_{Co} , die beide nur von der Temperatur T abhängen, so dass die Wärmeleitungsgleichung für die zweiphasige Mischung geschrieben werden kann gemäß

$$\rho_{Co}c_{Co}(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\kappa_{Co}(T) \frac{\partial T}{\partial x_k} \right). \quad (1)$$

Beispielsweise führt das beschriebene Modell zu der in der Abbildung aufgezeigten Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit. Der Parameter an den Kurven ist das spezifische Volumen der Kühlflüssigkeit $1/\rho_{Co}$, welches bei der Herstellung des Kühlaggregats eingestellt werden kann und während des gesamten Kühlprozesses konstant bleibt. Wir haben dem Hersteller somit mehrere entscheidende Fakten geliefert: 1. Die maximal erzielbare Wärmeleitfähigkeit steigt mit wachsendem $1/\rho_{Co}$. 2. Die Zweiphasenkühlung kann nur bei hinreichend hoher Temperatur optimal ausgenutzt werden, dann aber ist die Wärmeleitfähigkeit erheblich höher als beispielsweise die Wärmeleitfähigkeit von Kupfer, die $400 \text{ W}/(\text{Km})$ beträgt.



Die rechte Abbildung zeigt das Resultat einer eindimensionalen Simulation für ein schichtweise aufgebautes Kühlaggregat. Die Schichten stellen von links nach rechts die folgenden Materialien dar: 1. Epoxydharz, 2. Siliziumchip, hier wird die abzuführende Wärmeleistung erzeugt, 3. Lotmaterial, 4. Kupfer und schließlich 5. die Zweiphasenmischung, die in Kontakt mit einem Kondensator steht.

Anfänglich liegt hier eine homogene Temperatur von 320°K vor, die vom Kondensator während der gesamten Prozessdauer gehalten wird. Die im Chip 500 ms lang erzeugte Wärmeleistung beträgt 250 W , was kurzzeitig zu einer maximalen Chiptemperatur von 411°K führt.

Literatur

1. W. DREYER, W. H. MÜLLER, *Report on the ISAD heat conduction problem*, Berlin, Edinburgh, 2000.

Phasenübergänge

Bearbeiter: W. Dreyer, F. Duderstadt

Kooperation: W. H. Müller (Heriot-Watt University, Edinburgh, Großbritannien), P. Colli, G. Gilardi (Universität Pavia, Italien), S. Eichler (Freiberger Compound Materials GmbH, Freiberg), J. Sietsma (Laboratory of Materials Science, TU Delft, Niederlande), E. Radkevich (Staatliche Universität Moskau, Russland)

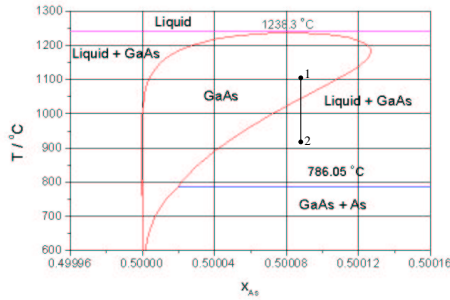
Im Jahr 1997 wurde in Dreyer/Müller ([1]) ein Phasenfeldmodell vom Cahn-Hilliard-Typ aufgestellt, welches die Entstehung und das Wachstum von Ausscheidungen in binären Legierungen unter Einfluss lokaler Eigenspannungsfelder und bei anisotropen Phasengrenzflächen beschreiben kann. Im Berichtszeitraum sind mit diesem Modell für Zinn-Blei-Lote die folgenden Untersuchungen durchgeführt worden:

1. In Zusammenarbeit mit W. H. Müller sind mit AMF-Technik die Bewegungen von Phasengrenzflächen verfolgt und mit Simulationen verglichen worden, [2].
2. Der mechanische Teil des Modells beinhaltet die Berechnung einer Neumann'schen Reihe. Hierzu wurde eine Konvergenzstudie in Abhängigkeit der unterschiedlichen elastischen Konstanten der beiden Phasen durchgeführt, [3].
3. In Zusammenarbeit mit E. Radkevich haben wir begonnen, den scharfen Grenzflächenlimes zu untersuchen. Ein erstes bedeutsames Resultat zeigt, dass die beiden Konzentrationen längs einer Phasengrenze nicht aus der klassischen Maxwell-Konstruktion gewonnen werden können. Stattdessen wurde eine Verallgemeinerung angegeben, welche zeigt, dass die Konzentrationen längs einer Phasengrenze von deren Normalenvektor abhängen. Dies ist auf die anisotropen Grenzflächenkoeffizienten zurückzuführen. Darüber hinaus gibt die verallgemeinerte Maxwell-Konstruktion Bedingungen an die Grenzflächenkoeffizienten an, so dass überhaupt Lösungen des Phasenfeldsystems existieren.

Im Rahmen eines geförderten Projekts beschäftigt sich zurzeit eine zweite Forschungsrichtung in Zusammenarbeit mit der Freiberger Compound Materials GmbH (FCM) mit einer neuen Problemstellung, wodurch erhebliche Erweiterungen des bisher verwendeten Phasenfeldmodells notwendig werden.

Die FCM führt mit gezüchtetem einkristallinen Gallium-Arsenid (GaAs) eine komplexe Wärmebehandlung durch, um eine hohe elektrische Homogenität des Einkristalls auf der mesoskopischen Skala zu erzielen. Hierbei kommt es zu unerwünschten Ausscheidungen von flüssigem Arsen (As). Hinweise und Maßnahmen zur Vermeidung dieses Vorgangs sollen aus einer vollständigen Simulation der Entstehung, des Wachstums und der Auflösung von Arsen-Ausscheidungen gewonnen werden. Hierzu sind im Jahr 2000 umfangreiche Voruntersuchungen gemacht worden, die in ein vom BMBF gefördertes Vorhaben einmünden.

Kristallines Gallium-Arsenid besteht in der stöchiometrischen Zusammensetzung aus zwei kubisch flächenzentrierten Untergittern, die längs der Raumdiagonalen gegeneinander ver-



schoben sind. Die nebenstehende Abbildung zeigt einen Ausschnitt in der Nähe der stöchiometrischen Zusammensetzung. Das umrandete Gebiet H kennzeichnet ein Homogenitätsgebiet, wo das überschüssige Arsen nicht in Form von Ausscheidungen vorliegt, die einer Behandlung mit dem vorhandenen Phasenfeldmodell zugänglich sind. Vielmehr ist das überschüssige Arsen hier homogen verteilt auf Zwischengitterplätzen und auf Leerstellen im Gallium-Gitter. In der ersten Simulationsphase betrachten wir Zustandsänderungen auf der

ingezeichneten Geraden, die die Homogenitätsgrenze schneidet und die beiden Zustände 1 und 2 verbindet.

Wenn wir im Zustand 1 starten und uns längs der Geraden der Homogenitätsgrenze nähern, dann beginnt mit wenigen Arsen-Atomen der Prozess der Keimbildung, den wir durch Ratengleichungen vom Typ

$$\frac{\partial Z_n}{\partial t} = \Gamma^{n-1 \rightarrow n} Z_{n-1} + \Gamma^{n+1 \rightarrow n} Z_{n+1} - \Gamma^{n \rightarrow n-1} Z_n - \Gamma^{n \rightarrow n+1} Z_n \quad (1)$$

beschreiben wollen. Hier gibt Z_n die Zahl von Arsen-Keimen mit n Arsen-Atomen an. Die Größen Γ sind Übergangsraten für vier mögliche Übergänge von Arsen-Atomen auf Fehlstellen in den beiden Untergittern und den bereits vorhandenen Keimen. Die Übergangsraten werden auf der atomaren Ebene modelliert.

Beim Durchschreiten der Homogenitätsgrenze wird das flüssige Arsen unmittelbar in Tropfenform vorliegen, und es kommt auf dem Weg zum Zustand 1 zur Ostwaldreifung. Dieser Prozess soll beschrieben werden durch eine kinetische Gleichung vom Fokker-Planck-Typ. Diese lautet

$$\frac{\partial f(t, r)}{\partial t} + \frac{\partial \dot{r}(r) f(t, r)}{\partial r} = P(t, r). \quad (2)$$

Die zentrale Größe ist hier die Phasendichte f , die zur Zeit t die Zahldichte von Arsen-Tropfen mit einem effektiven Radius r angibt. Die Größe \dot{r} ist die Wachstumsgeschwindigkeit des Tropfenrandes, und P ist die Produktionsdichte von Tropfen. Beide Größen gewinnen wir aus den Ratengleichungen durch Skalierung und Renormierung.

Wenn die Tropfen im Laufe der weiteren Entwicklung eine gewisse Größe erreicht haben, so dass sich benachbarte Tropfen spüren, dann treten mechanische Spannungsfelder auf, und wir ersetzen die kinetische Ebene der Beschreibung durch die mesoskopische Ebene des am WIAS entwickelten Phasenfeldmodells, welches an anderen Stellen bereits hinreichend beschrieben wurde.

Literatur

1. W. DREYER, W. H. MÜLLER, *A study of the coarsening in tin/lead solders*, Internat. J. Solids Structures, **37** (2000), No. 28, pp. 3841–3871.
2. —, *Modeling diffusional coarsening in microelectronic solders*, in: Electronic Packaging Technology Conference 2000, pp. 1433–1458.
3. —, *Discrete Fourier transforms and their application to stress-strain problems in composite mechanics: A convergence study*, eingereicht.

Nichtisotherme Massenaustauschprozesse in porösen Körpern

Bearbeiter: K. Wilmański, B. Albers

Kooperation: G. Capriz (Universität Pisa, Italien), P. Giovine (Universität Reggio di Calabria, Italien)

Für ein zweikomponentiges Modell für poröse Körper wurden im Jahr 2000 zwei Fragen untersucht:

1. Wie sind Wärmefluss und Entropiefluss miteinander gekoppelt, wenn thermische Vorgänge in dem System von einer gemeinsamen absoluten Temperatur Θ beschrieben werden?
2. Welche thermischen Eigenschaften besitzt eine durchlässige Trennfläche zwischen porösen Körpern?

Die Antwort wurde für beliebig große Verzerrungen des Skeletts aber für kleine Abweichungen vom thermodynamischen Gleichgewicht gefunden. Wenn \mathbf{G} den Temperaturgradienten, $\dot{\mathbf{X}}^F$ die Lagrange'sche relative Geschwindigkeit der Komponenten und $\Delta = n - n_E$ die Abweichung der Porosität n vom Gleichgewichtswert n_E bezeichnen, dann ist die Dissipation D im System durch die folgende Beziehung definiert

$$D := \frac{1}{\Theta} K_{\Theta} \mathbf{G} \cdot \mathbf{G} + \pi \mathbf{C}^S \cdot \dot{\mathbf{X}}^F \otimes \dot{\mathbf{X}}^F + \frac{\partial}{\partial \Delta} \left(\rho^S \psi^S + \rho^F \psi^F \right) \Big|_E \frac{1}{\tau} \Delta^2 + \\ + R \left(\psi^F + \frac{p^F}{\rho^F J^{S-1}} - \psi^S - \rho^S \frac{\partial \psi^S}{\partial \rho^S} \right)^2 \geq 0.$$

K_{Θ} ist die gemeinsame Wärmeleitfähigkeit der Komponenten, π bezeichnet die Permeabilität, τ ist die Porositäts-Relaxationszeit, und es sind R die Massenaustauschkonstante, ψ^S, ψ^F partielle Helmholtz'sche freie Energien, p^F der partielle Druck der Flüssigkeit, ρ^S, ρ^F partielle Massendichten, \mathbf{C}^S der Cauchy-Green-Deformationstensor und $J^S = \sqrt{\det \mathbf{C}^S}$. Der thermodynamische Gleichgewichtszustand ist durch die Beziehung $D = 0$ definiert.

Unter der Voraussetzung einer kleinen Abweichung vom Zustand $D = 0$ wurde bewiesen, dass die partiellen Flüsse der folgenden Beziehung genügen

$$\mathbf{H}^S + \mathbf{H}^F = \frac{1}{\Theta} \left(\mathbf{Q}^S + \mathbf{Q}^F \right) = \frac{K_{\Theta}}{\Theta} \mathbf{G},$$

wobei $\mathbf{H}^S, \mathbf{H}^F$ intrinsische partielle Entropieflüsse und $\mathbf{Q}^S, \mathbf{Q}^F$ intrinsische partielle Wärmeflüsse bezeichnen.

Der Porositätsfluss hat die Gestalt

$$\mathbf{J} = \varphi J^S \dot{\mathbf{X}}^F,$$

wobei φ nur von der Anfangsporosität abhängig ist.

Auch alle anderen Stoffgesetze wurden vollständig spezifiziert.

Auf den Trennflächen gilt die Kontinuität der absoluten Temperatur Θ , was bedeutet, dass die Temperatur eine messbare Größe ist. Dieses Ergebnis wurde für mehrkomponentige Systeme zum ersten Mal streng bewiesen. Es enthält Bedingungen, die erfüllt sein müssen, wenn man die klassische Wärmeleittheorie in Modellen für poröse Körper verwenden will.

Die Arbeit wurde auch teilweise dem Problem von Oberflächenkompatibilitätsbedingungen gewidmet. Auf diese Weise wurde die Anfangsrandwertaufgabe nun vollständig formuliert. Unter den oben genannten Bedingungen kann man Randwertprobleme für nichtisotherme Massenaustauschprozesse untersuchen. Diese Ergänzung von eigenen Arbeiten über Adsorptionsvorgänge ist Ziel der nachfolgenden Arbeit.

Literatur

1. K. WILMAŃSKI, *Mathematical theory of porous media — lecture notes*, WIAS-Preprint No. 602, 2000.
2. —, *Mass exchange, diffusion and large deformations of poroelastic materials*, WIAS-Preprint No. 628, 2000, erscheint in: *Mathematical Models in Soil Mechanics* (G. Capriz, P. Giovine, Hrsg.), Birkhäuser, 2001.

Strömungsinstabilitäten und Musterentstehung (Piping) in granularen Stoffen

Bearbeiter: K. Wilmański

Kooperation: T. Wilhelm (Universität Innsbruck, Österreich)

Es wurde ein Modell für die Beschreibung von Strömungsinstabilitäten durch rapide Änderung der Porosität in gesättigten Sandböden entwickelt. Solche Instabilitäten führen zur Musterentstehung (Piping) und dann zur Fluidisierung und lokalem Bruch. Diese Vorgänge wurden in Laborexperimenten und technischen Anwendungen beobachtet (siehe Abb. 1).

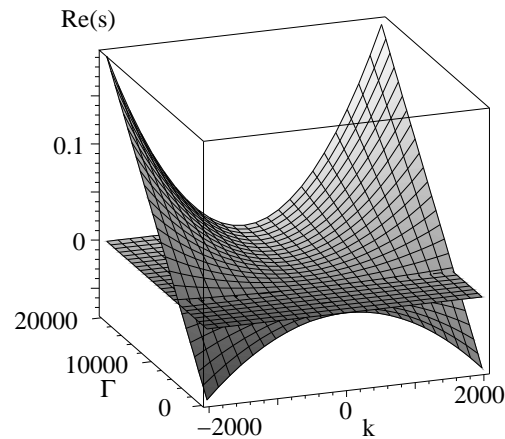
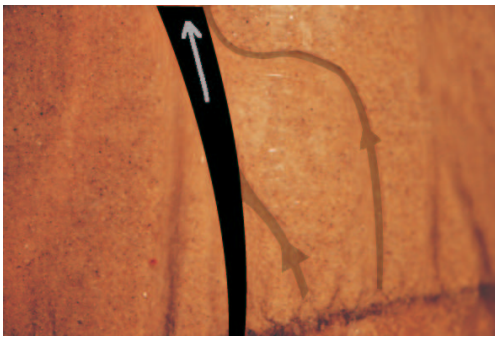


Abb. 1: Musterentstehung bei Durchströmung einer Sandprobe (T. Wilhelm).

Abb. 2: Exponent von Störungsamplituden im instabilen Bereich (inhomogene Porosität).

In Experimenten, die von Dr. Theo Wilhelm an der Universität Innsbruck durchgeführt wurden, wurden die wichtigsten Systemparameter identifiziert und vermessen. Basierend auf diesen Messungen wurde ein zweikomponentiges Modell entwickelt. Im Gegensatz zu klassischen Modellen von Strömungen in porösen und granularen Stoffen wurde angenommen, dass die Impulsquelle nichtlineare Beiträge enthält, die von Porositätsgradienten abhängig sind. Diese Beiträge werden durch Überschreitung einer Geschwindigkeitsschwelle aktiviert. In einem vereinfachten Modell, welches in numerischen Beispielen verwendet wurde, haben dann die Impulsbilanzgleichungen für die beiden Komponenten folgende Gestalt

$$\begin{aligned} \rho^S \left(\frac{\partial v_k^S}{\partial t} + v_l^S \frac{\partial v_k^S}{\partial x^l} \right) &= -(1-n) \frac{\partial p}{\partial x^k} + \frac{\partial}{\partial x^l} \left(\lambda^S e_{mm} \delta_{kl} + 2\mu^S e_{kl} \right) + \\ &\quad + \Pi w_k - \frac{\Gamma}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{W-Y}{|W-Y|} \right) \sqrt{W} \frac{\partial n}{\partial x^k}, \\ \rho^F \left(\frac{\partial v_k^F}{\partial t} + v_l^F \frac{\partial v_k^F}{\partial x^l} \right) &= -n \frac{\partial p}{\partial x^k} - \Pi w_k + \frac{\Gamma}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{W-Y}{|W-Y|} \right) \sqrt{W} \frac{\partial n}{\partial x^k}, \\ &\quad \lambda^S, \mu^S, \Pi, \Gamma, Y > 0. \end{aligned}$$

In diesen Gleichungen wurden folgende Bezeichnungen verwendet:

ρ^S, ρ^F — partielle Massendichten, v_k^S, v_k^F — kartesische Komponenten von partiellen Geschwindigkeiten, $w_k = v_k^F - v_k^S$, $W = \frac{1}{2} w_k w_k$, p — Porenwasserdruck, n — Porosität, $\lambda^S, \mu^S, \Pi, \Gamma, Y$ — Materialparameter.

Mit Hilfe einer linearen Stabilitätsanalyse wurde bewiesen, dass für große relative Geschwindigkeiten ($W > Y$) dieses Gleichungssystem instabil ist. Der Exponent der Amplitude der Störung ist in Abb. 2 als Funktion des Materialparameters Γ und der Wellenzahl k gezeigt. Für $\Gamma \gtrsim 6000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2\text{s}}$ erweist sich das System bezüglich der relativen Geschwindigkeit als instabil. Die Geschwindigkeitsschwelle $\sqrt{2Y}$ ist interpretiert als die minimale Geschwindigkeit der Fluidisierung. Sie wurde in Laborexperimenten gemessen. Das Modell wird nun in ingenieurrelevanten Aufgaben angewendet.

Literatur

1. T. WILHELM, K. WILMAŃSKI, *Flow instabilities in granular media due to porosity inhomogeneities*, WIAS-Preprint No. 632, 2001, erscheint in: Internat. J. Multiphase Flow.

Wellenausbreitung in porösen und granularen Stoffen

Bearbeiter: K. Wilmański

Kooperation: I. Edelman (Stipendiatin der Alexander von Humboldt-Stiftung, derzeit WIAS), E. Radkevich (Staatliche Universität Moskau, Russland), C. Lai (Studio Geotecnico Italiano, Milano, Italien), S. Foti, R. Lancellotta (Politecnico di Torino, Italien)

Ergebnisse für Oberflächenwellen auf der Grenze zwischen einem porösen Körper und einem Vakuum, bzw. zwischen einem porösen Körper und einer Flüssigkeit, die schon im letzten Jahr erzielt wurden, wurden mit einigen Resultaten für Wellen zwischen zwei porösen Körpern ergänzt. Es wurde bewiesen, dass unter der Voraussetzung der gleichen Ausbreitungsgeschwindigkeiten von P1-, P2- und S-Wellen aber verschiedenen Porositäten von benachbarten porösen Körpern folgende Ausbreitungsmoden von Oberflächenwellen existieren:

1. wahre Stoneley-Welle mit Phasengeschwindigkeit kleiner als die P2-Geschwindigkeit,
2. Pseudo-Stoneley-Welle mit Phasengeschwindigkeit größer als die P2-Geschwindigkeit,
3. „Leaky“-verallgemeinerte Rayleigh-Welle mit Phasengeschwindigkeit kleiner als die S-Geschwindigkeit,
4. „Leaky“-verallgemeinerte Rayleigh-Welle mit Phasengeschwindigkeit größer als die S-Geschwindigkeit. Diese Mode war bis jetzt unbekannt.

Die zweite Welle ist stark von dem Durchlässigkeitskoeffizienten α abhängig, der Bedingungen auf der durchlässigen Trennfläche bestimmt (siehe [1–3]).

Diese Ergebnisse wurden mit italienischen Partnern experimentell überprüft ([4]) und die praktische Anwendung in der Geophysik abgesprochen. Eine weitere Zusammenarbeit auf diesem Gebiet ist geplant.

Die Ergebnisse für Oberflächenwellen wurden mit Hilfe der asymptotischen Analyse für hohe Frequenzen hergeleitet.

Die Fortsetzung der Untersuchung von starken Singularitäten und Soliton-ähnlichen Wellen hat gezeigt, dass man in Abhängigkeit von der Beziehung zwischen zwei kleinen Parametern des schwach nichtlinearen Modells verschiedene Wellenstrukturen bekommt. Diese Parameter bestimmen Relaxationseigenschaften der Porosität und die Intensität der Kopplung zwischen Spannungen im Skelett und in der Flüssigkeit. Die Beziehung zwischen dimensionsloser Relaxationszeit τ und dimensionslosem Kopplungsparameter β : $\tau = \beta^\gamma, \beta \ll 1$, wurde für $\gamma = 1$ (poröse Materialien) und $\gamma = 2$ (granulare Stoffe) untersucht. In der Approximation erster Ordnung sind die Eigenschaften von starken Singularitäten für beide Fälle identisch. Sie unterscheiden sich wesentlich in der zweiten Ordnung, die die Entwicklung von Amplituden bestimmt.

Die Nichtlinearität des Modells, die in der zweiten Gruppe der Arbeiten berücksichtigt wurde, bezieht sich bis jetzt lediglich auf die Gleichgewichtsporosität n_E , die die folgenden Bedingungen erfüllen muss

$$n_E = n_E \left(\frac{\rho^F}{\rho^S} \right), \quad \frac{\partial n_E}{\partial \rho^F} > 0, \quad \frac{\partial n_E}{\partial \rho^S} < 0,$$

wo ρ^S, ρ^F die partiellen Massendichten der beiden Komponenten bezeichnen. Im nächsten Jahr werden diese Untersuchungen sowohl für nichtlineare Impulsquellen (Durchlässigkeitskoeffizienten) als auch für zweidimensionale Fälle weitergeführt.

Literatur

1. I. EDELMAN, K. WILMAŃSKI, *Surface waves at an interface separating two saturated porous media*, WIAS-Preprint No. 568, 2000, erscheint in: Wave Motion.
2. K. WILMAŃSKI, *Sound and shock waves in porous and granular materials*, WIAS-Preprint No. 563, 2000, erscheint in: WASCOM 99, Vulcano.
3. ———, *Multicomponent models in geophysics*, in: Earthquake Thermodynamics and Phase Transformations in the Earth's Interior (J. Majewski, R. Teisseyre, Hrsg.), Geophysics Series, **76**, Academic Press, San Diego, 2001, pp. 567–655.
4. S. FOTI, *Multistation Methods for Geotechnical Characterization using Surface Waves*, Dissertation, Politecnico di Torino, 2000.
5. E. RADKEVICH, K. WILMAŃSKI, *A Riemann problem for poroelastic materials with the balance equation for porosity. Part I*, WIAS-Preprint No. 593, 2000.
6. ———, *A Riemann problem for poroelastic materials with the balance equation for porosity. Part II*, WIAS-Preprint No. 594, 2000.

4.8 Gruppenübergreifende Projekte

4.8.1 Projekte

Optimale Steuerung der Sublimationszüchtung von SiC-Kristallen

Bearbeiter: O. Klein (FG 1), P. Philip (FG 1), J. Sprechels (FG 1), K. Wilmański (FG 7)

Kooperation: T. Müller, D. Schulz, D. Siche (Institut für Kristallzüchtung, Berlin)

Förderung: BMBF: „Optimale Steuerung der Sublimationszüchtung von SiC-Kristallen“ (03-SP7FV1-6)

SiC-Einkristalle werden zunehmend in elektronischen und optoelektronischen Bauteilen verwendet. Es ist allerdings immer noch ein großes Problem, Kristalle befriedigender Qualität und ausreichender Größe zu produzieren. In den letzten Jahren hat sich die so genannte *Lely-Methode* als die Erfolg versprechendste Methode erwiesen. In einem Behälter aus Graphit (siehe Abb. 1) wird polykristallines SiC-Pulver auf ca. 2500 K erhitzt, so dass dieses verdampft und ein mehrkomponentiges Gasgemisch in diesem Graphittiegel erzeugt. Im Tiegel befindet sich ein Keim, bestehend aus einem dünnen SiC-Einkristall. Durch Sublimation wächst dieser im Gasgemisch in den Tiegel hinein. In der Literatur finden sich unterschiedliche Züchtungskonfigurationen. Abgesehen von der in Abb. 1 dargestellten Geometrie, in welcher sich das Quellpulver und der Keim in verschiedenen, durch eine poröse Graphitwand getrennten, Kammern befinden, werden auch Aufbauten betrachtet, in denen sich Quelle und Keim in derselben Kammer befinden.

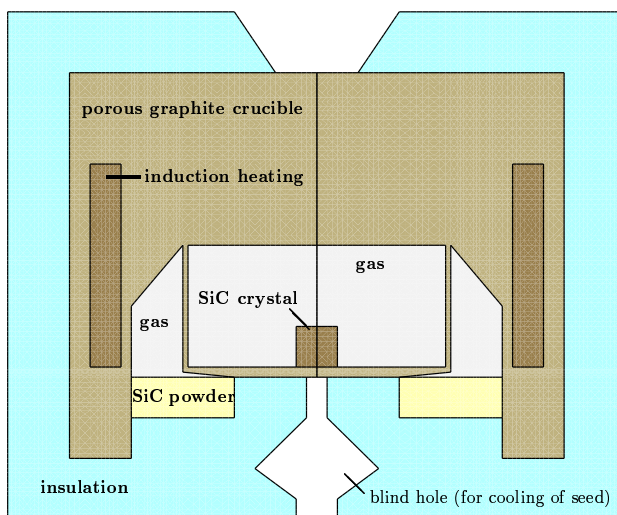


Abb. 1: Schematische Versuchsanordnung.

Aufgrund der hohen Temperaturen wird Graphit als Tiegelmateriale benutzt. Da dieser porös ist, erfolgt ein ständiger Gasaustausch zwischen der Reaktionskammer und den umgebenden Wänden. Dies und die chemischen Reaktionen auf der Oberfläche des SiC-Pulvers, an den Reaktorwänden, im Gasgemisch selbst und auf der wachsenden Kristalloberfläche ändern die Stöchiometrie des Systems ständig, was maßgeblichen Einfluss auf das Wachstum hat. Das Gasgemisch besteht hauptsächlich aus den Komponenten Ar (Inertgas), Si, Si₂C und SiC₂. Die innere Struktur des Reaktors ändert sich im Laufe der Zeit ständig, da mehrere freie Ränder existieren: der wachsende Kristall, die sich abbauenden Graphitwände, die sich ebenfalls abbauende sinternde SiC-Quelle und eine sich darauf aufbauende Graphitschicht.

Ziel ist es, den komplexen Züchtungsprozess mathematisch zu modellieren und numerisch zu simulieren, um die Produktionsmethode zu verbessern, da aufgrund der Gegebenheiten der Wachstumsprozess nicht beobachtet und nur unten und oben am Tiegel die Temperatur gemessen

werden kann, was die Temperaturverhältnisse im Tiegel nur grob wiedergibt. Kontrollmöglichkeiten bezüglich einer Optimierung des Kristallwachstums bieten der innere Aufbau des Tiegels, der großen Einfluss auf die Temperaturverteilung hat, die Heizung des Tiegels und der Druck des Inertgases.

Die Modellierung des Gasgemisches basiert auf kontinuierlicher Mischungstheorie und berücksichtigt alle Erhaltungsgleichungen für die verschiedenen Gaskomponenten, inklusive der Reaktions-Diffusions-Gleichungen. Vervollständigt wird das Modell durch Energiebilanzgleichungen für die Festkörperkomponenten der Züchtungsapparatur sowie Übergangs-, Rand- und Anfangsbedingungen ([1]).

Aufgrund der hohen Temperaturen während der Züchtungsphase ist die Berücksichtigung des Wärmetransportes durch Strahlung zwischen Hohlraumoberflächen in der Züchtungsapparatur unerlässlich. Für eine Beschreibung des hier verwendeten Modells sei auf [2] verwiesen. Die Semitransparenz des Einkristalls wird mit Hilfe des Bändermodells berücksichtigt. Für den Fall hoher Porosität konnte der Wärmetransport durch Konvektion einbezogen werden.

In Zusammenarbeit mit dem experimentellen Kooperationspartner, dem Institut für Kristallzüchtung (IKZ), Berlin, konnte ein Großteil der relevanten Materialdaten durch Messungen und Literaturrecherchen ermittelt werden. Eine Zusammenstellung findet sich in [2, Appendix A].

In der derzeitigen Entwicklungsstufe stellt das Simulationsprogramm ein effektives Werkzeug dar, mit dessen Hilfe sich die zeitliche Entwicklung der Temperaturverteilung in der Züchtungsapparatur in guter Übereinstimmung mit physikalischen Experimenten berechnen lässt. Es ist damit möglich, im „Trial-and-Error-Verfahren“ verschiedene Züchtungskonfigurationen auszutesten und auf Temperaturverteilungen hin zu optimieren, die für den Züchtungsprozess vorteilhaft sind.

Abbildung 2 zeigt numerisch simulierte Temperaturverteilungen in der Züchtungsapparatur für die in Abb. 1 dargestellte Konfiguration, links während und rechts am Ende der Aufheizphase. Im mit „induction heating“ bezeichneten Bereich wird konstant und gleichmäßig mit einer Leistung von 10 kW geheizt. Die Temperaturdifferenz zwischen benachbarten Isolinien in Abb. 2 beträgt 20 K. Die minimale Temperatur T_{\min} befindet sich auf der Außenseite der Isolationsschicht, während sich die maximale Temperatur T_{\max} innerhalb des Heizungsbereiches befindet.

Die mit dem IKZ gemeinsam erarbeitete Planung sieht vor, dass die am WIAS entwickelte Software am IKZ direkt genutzt werden soll. Im Hinblick auf dieses Ziel wurde damit begonnen, die am WIAS zunächst prototypisch entwickelte Software für den konkreten Einsatz beim Kooperationspartner zu optimieren.

Im Berichtszeitraum wurde weiterhin ein verbessertes Modell der Induktionsheizung entwickelt. Die Annahme der Zylindersymmetrie erlaubt es, in jedem Zeitschritt die induzierte Stromdichte (und damit die Wärmequellenverteilung) mit Hilfe eines Skalarpotentials aus einem elliptisch-parabolischen System von partiellen Differentialgleichungen zu bestimmen.

Außerdem wurden erste Modelle für das Kristallwachstum und die thermischen Spannungen im wachsenden Kristall entwickelt.

Die mathematischen Untersuchungen konzentrierten sich auf die Untersuchung der Lösbarkeit des bei Anwendung des Finite-Volumen-Verfahrens auf die Energiebilanz entstehenden diskreten Systems, mit dem Ziel, darauf aufbauend die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung des zugehörigen kontinuierlichen Problems sowie die Konvergenz des numerischen Verfahrens zu untersuchen.

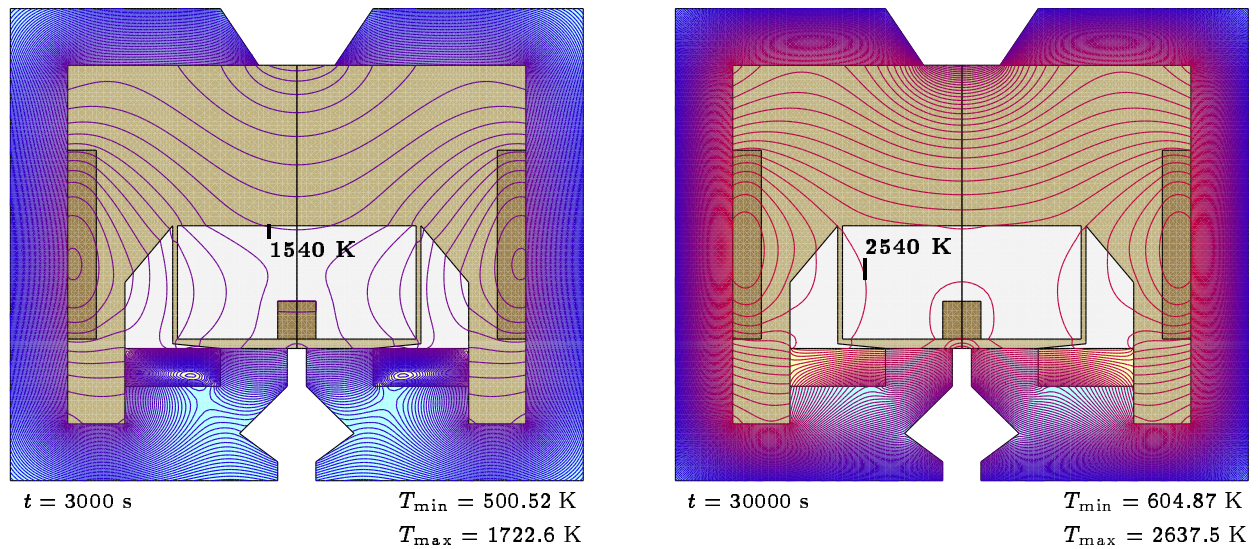


Abb. 2: Numerisch simulierte Temperaturverteilungen in der Züchtungsapparatur, links während und rechts am Ende der Aufheizphase.

Literatur

1. N. BUBNER, O. KLEIN, P. PHILIP, J. SPREKELS, K. WILMAŃSKI, *A transient model for the sublimation growth of silicon carbide single crystals*, J. Crystal Growth, **205** (1999), pp. 294–304.
2. O. KLEIN, P. PHILIP, J. SPREKELS, K. WILMAŃSKI, *Radiation- and convection-driven transient heat transfer during sublimation growth of silicon carbide single crystals*, erscheint in: J. Crystal Growth.

Langzeitverhalten von Reaktions-Diffusionsgleichungen

Bearbeiter: M. A. Efendiev (FG 2), M. Wolfrum (FG 2), J. Fuhrmann (FG 3)

Kooperation: S. Zelik (Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau), A. Miranville (Universität Poitiers, Frankreich)

Systeme von Reaktions-Diffusionsgleichungen der Form

$$\partial_t u = \Delta u + f(u, \nabla u, x) \quad (1)$$

treten bei der Beschreibung von vielen chemischen und physikalischen Prozessen auf (siehe z. B. [2]). Für das theoretische Verständnis und die numerische Simulation solcher Prozesse spielt die Tatsache eine entscheidende Rolle, dass sich das Langzeitverhalten oft durch eine endliche Anzahl von Freiheitsgraden beschreiben lässt, da alle Trajektorien des Systems gegen einen endlichdimensionalen Attraktor konvergieren (siehe z. B. [2]). Untersuchungen über die Existenz sowie qualitative und quantitative Eigenschaften solcher Attraktoren liefern daher grundlegende Informationen für das Verständnis der gesamten Dynamik des Systems (siehe [3]). Dort konnten auch für ein unbeschränktes Gebiet Abschätzungen der Dimension des Attraktors gefunden werden. Von besonderer Bedeutung sind im Hinblick auf numerische Rechnungen auch exponentielle Attraktoren und Inertialmannigfaltigkeiten, die jedoch nur unter restriktiveren Bedingungen gefunden werden können (siehe [3]).

In [5] konnte mit Hilfe von verallgemeinerten Monotonie-Prinzipien und Nullstelleneigenschaften ein Kriterium für die Existenz von heteroklinen Orbits in Attraktoren von skalaren Reaktions-Diffusionsgleichungen auf eindimensionalen Gebieten bewiesen werden.

Literatur

1. M. A. EFENDIEV, V. CHEPYZHOV, *Hausdorff dimension estimation for attractors of nonautonomous dynamical systems in an unbounded domain*, Comm. Pure Appl. Math., **53** (2000), pp. 647–665.
2. M. A. EFENDIEV, J. FUHRMANN, S. ZELIK, *The long-time behaviour of the thermoconvective flow in a porous media*, erscheint in: Math. Methods Appl. Sci.
3. M. A. EFENDIEV, A. MIRANVILLE, S. ZELIK, *Exponential attractors for a nonlinear reaction-diffusion system in R^3* , C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math., **330** (2000), pp. 713–718.
4. M. A. EFENDIEV, S. ZELIK, *Upper and lower bounds for the Kolmogorov entropy of the attractor for an RDE in an unbounded domain*, erscheint in: J. Dynamics Differential Equations.
5. M. WOLFRUM, *A sequence of order relations, encoding heteroclinic connections in scalar parabolic PDE*, WIAS-Preprint No. 599, 2000.

Mehrskalenmodellierung thermomechanischer Körper

Bearbeiter: W. Dreyer (FG 7), M. Kunik (FG 7), J. Sprekels (FG 1)

Förderung: DFG: Schwerpunktprogramm „Analysis, Modellierung und Simulation von Mehrskalenproblemen“

Dies ist ein gemeinsames Projekt der FG 7 und der FG 1. Das momentane Ziel der Untersuchungen ist die Durchführung rigoroser Mikro-Makro-Übergänge für die von Dreyer und Kunik an der atomaren Kette gemachten Beobachtungen.

Der Ausgangspunkt auf der Mikroskala sind die Newton'schen Bewegungsgleichungen für die atomare Kette bestehend aus N Teilchen mit Masse m , die zur Zeit t die Orte $x_\alpha(t)$, $\alpha \in \{1, 2, \dots, N\}$, haben und über Potentiale $\varphi : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ wechselwirken:

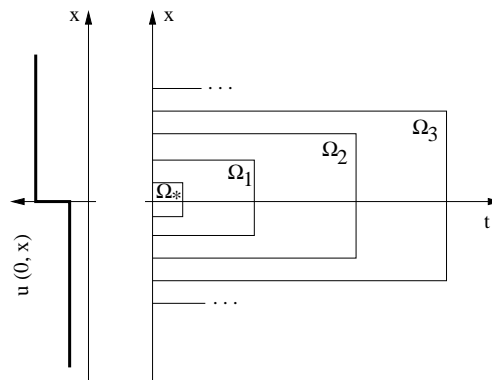
$$m\ddot{x}_\alpha(t) = \varphi'(x_{\alpha+1} - x_\alpha) - \varphi'(x_\alpha - x_{\alpha-1}), \quad \alpha \in \{1, 2, \dots, N\}. \quad (1)$$

Die Preparation der Anfangsdaten

$$x_\alpha(0) = x_\alpha^0, \quad \dot{x}_\alpha(0) = \dot{x}_\alpha^0 \quad (2)$$

geschieht entsprechend makroskopischer Vorgaben, die ausschließlich auf makroskopischen Riemann'schen Anfangswertproblemen beruhen, siehe hierzu [1].

Es können drei Klassen von mikroskopischen Bewegungen konstatiert werden: (i) kalte Bewegung, (ii) thermische Bewegung und (iii) Oszillatorbewegung. Für diese drei Bewegungen haben wir Mikro-Makro-Übergänge durchgeführt, und wir sind durch die Wahl von Anfangsdaten, die zu Wellenphänomenen führen, auf eine interessante Skalierungseigenschaft der resultierenden makroskopischen Felder gestoßen. Unsere Vorgehensweise erläutern wir mittels der folgenden Abbildung.



Für identische Anfangsdaten, wie im linken Teil der Abbildung für ein repräsentatives Makrofeld $u_0(x)$ gegeben, betrachten wir eine Folge von wachsenden Raum-Zeit-Gebieten $\{\Omega_i\}_{i \in \{1, 2, \dots\}} = \{\Omega_1 = \Omega_*, \Omega_2, \Omega_3, \dots\}$ und lösen hier die Newton'schen Bewegungsgleichungen. Mit den erhaltenen Lösungen konstruieren wir eine Folge makroskopischer Felder $u^{(i)}(t, x)$. Für $(\bar{t}, \bar{x}) \in \Omega_*$ und $(t = N^{\gamma/2}\bar{t}, x = N\bar{x}) \in \Omega_i$, $\gamma > 0$, transformieren wir die Felder $u^{(i)}(t, x)$, die auf Ω_i leben, auf das repräsentative Raum-Zeit-Gebiet Ω_* zurück:

$$u^{(i)}(t, x) = u^{(i)}(N^{\gamma/2}\bar{t}, N\bar{x}) = \tilde{u}^{(i)}(\bar{t}, \bar{x}). \quad (3)$$

Beispielsweise für $\gamma = 2$ und Anfangsdaten, die zu Wellenphänomenen führen, kann durch numerische Beobachtung konstatiert werden, dass der $\lim_{i \rightarrow \infty} \tilde{u}^{(i)}(\bar{t}, \bar{x})$ existiert und zu makroskopischen Grenzfunktionen führt, die Lösungen makroskopischer hyperbolischer Systeme sind.

Hieran anschließend versuchen wir einen Teil der numerischen Beobachtungen durch rigorose analytische Berechnungen zu ersetzen. Zurzeit geht dies aber nur, wenn wir uns auf der Mikroskala auf die kalte Bewegung beschränken, die keine thermischen Fluktuationen enthält. Für diesen Fall lassen sich ohne Verwendung der Methode der Fensterfunktion, siehe [1], analytische Mikro-Makro-Übergänge etablieren.

Dies erreichen wir durch Einführung einer Funktion $\hat{x}(t, \alpha)$, für $t \in R_0^+$, $\alpha \in R$, die für $\alpha \in Z$ identisch mit $x_\alpha(t)$ wird, also eine Lösung der Newton'schen Bewegungsgleichungen ist.

Wenn wir nun t und α mit $\varepsilon = 1/N$ skalieren gemäß $\bar{t} = \varepsilon t$, $\bar{\alpha} = \varepsilon \alpha$ und außerdem definieren

$$\hat{x}(t, \alpha) = \frac{1}{\varepsilon} \hat{x}^\varepsilon(\varepsilon t, \varepsilon \alpha), \quad (4)$$

dann können wir für $\varepsilon \rightarrow 0$ einen Mikro-Makro-Übergang für die Grenzfunktion $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \hat{x}^\varepsilon(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \hat{x}^0(\bar{t}, \bar{\alpha})$ etablieren und erhalten die nichtlineare Wellengleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial \bar{t}^2} \left(\frac{\partial \hat{x}^0(\bar{t}, \bar{\alpha})}{\partial \bar{\alpha}} \right) = \frac{\partial^2}{\partial \bar{\alpha}^2} \left(\varphi' \left(\frac{\partial \hat{x}^0(\bar{t}, \bar{\alpha})}{\partial \bar{\alpha}} \right) \right) \quad (5)$$

als makroskopische Grenzgleichung.

Wenn wir aber t und α skalieren gemäß $\bar{t} = \varepsilon^3 t$, $\bar{\alpha} = \varepsilon(\alpha - t)$ und außerdem definieren

$$\hat{x}(t, \alpha) = \alpha + \varepsilon \xi^\varepsilon(\varepsilon^3 t, \varepsilon(\alpha - t)), \quad (6)$$

dann können wir für $\varepsilon \rightarrow 0$ einen Kontinuum-Übergang für die Grenzfunktion $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \xi^\varepsilon(\bar{t}, \bar{\alpha}) = \xi^0(\bar{t}, \bar{\alpha})$ etablieren. Wir erhalten dann die Korteweg-deVries-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} \left(\frac{\partial \xi^0(\bar{t}, \bar{\alpha})}{\partial \bar{\alpha}} \right) + \frac{\varphi''(1)}{2} \left(\frac{\partial \xi^0(\bar{t}, \bar{\alpha})}{\partial \bar{\alpha}} \right) \frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} \left(\frac{\partial \xi^0(\bar{t}, \bar{\alpha})}{\partial \bar{\alpha}} \right) + \frac{\varphi'''(1)}{24} \frac{\partial^3}{\partial \bar{\alpha}^3} \left(\frac{\partial \xi^0(\bar{t}, \bar{\alpha})}{\partial \bar{\alpha}} \right) = 0 \quad (7)$$

als Grenzgleichung eines Übergangs von einem System gewöhnlicher Differentialgleichungen zu einer partiellen Differentialgleichung.

Allerdings haben wir gezeigt, dass dieser Kontinuum-Übergang aber kein Mikro-Makro-Übergang ist.

Literatur

1. W. DREYER, M. KUNIK, *Cold, thermal and oscillator closure of the atomic chain*, WIAS-Preprint No. 489, 1999, J. Phys. A, **33** (2000), pp. 2097–2129.

Simulation opto-elektronischer Charakteristika von Quantum-Well-Strukturen

Bearbeiter: U. Bandelow (FG 1), H.-Chr. Kaiser (FG 1), Th. Koprucki (FG 3), J. Rehberg (FG 1)

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

Förderung: BMBF: „Modellierung und Simulation verspannter Quantenschichten in Halbleiterlasern“ (03-KA7FV1-4)

Die $k \cdot p$ -Methode in der Enveloppenfunktionsapproximation dient zur Berechnung quantenmechanischer Zustände in nanostrukturierten Halbleiter-Heterostrukturen in der Nähe der Bandkanten. In der Physik sind dafür verschiedene Klassen von kp -Schrödinger-Operatoren etabliert, die im Falle hinreichend schwacher Interband-Kopplung akzeptable Ergebnisse liefern ([1], [2]). Die Eigenzustände der kp -Schrödinger-Operatoren gestatten die Beschreibung der elektronischen Zustände in Nanostrukturen, wie z. B. Quantum-Wells, insbesondere verspannte Multi-Quantum-Wells, vgl. [5]. Darüber hinaus gestattet die $k \cdot p$ -Methode die Berechnung der Impulsmatrixelemente der Inter- und Intrabandübergänge, mit denen opto-elektronische Eigenschaften der Nanostruktur, z. B. der optische Gewinn oder der Brechungsindex, berechnet werden können.

Die Eigenzustände der kp -Schrödinger-Operatoren sind reine Einteilchenzustände unter Berücksichtigung von Band-Band-Kopplung. Die damit beschriebenen Elektronen bzw. Löcher sind jedoch geladene Fermionen, die der Coulomb-Wechselwirkung unterliegen. Die daraus resultierenden Coulomb-Effekte werden u. a. im Hochdichtefall wichtig, welcher insbesondere in Halbleiterlasern erreicht wird. Zur Berücksichtigung ausgewählter Coulomb-Effekte wurde ein an den Dichtefunktionalformalismus angelehntes Meanfield-Modell implementiert ([1]). In diesem Modell werden die kp -Schrödinger-Operatoren über die quantenmechanische Ladungsdichte an die Poisson-Gleichung für das elektrostatische (Hartree-) Potential gekoppelt, was als verallgemeinertes Multiband-Schrödinger-Poisson-System verstanden werden kann. Im Unterschied zu reinen Schrödinger-Poisson-Systemen handelt es sich um ein sehr realistisches Bandstrukturmodell (nichtparabolisch, richtungsabhängig), welches überhaupt erst eine konsistente Berechnung der Impulsmatrixelemente für verschiedene optische Polarisationsrichtungen erlaubt. Der Fermi-Charakter der Ladungsträger kann im Modell z. T. mittels eines aus dem Dichtefunktionalformalismus adaptierten, dichteabhängigen Austausch-Korrelationspotentials berücksichtigt werden.

In Anlehnung an die Existenz- und Einzigkeitsbeweise für Kohn-Sham-Systeme mit skalaren Schrödinger-Operatoren ([3], [4]) wurde zur Lösung des kp -Schrödinger-Poisson-Systems eine gedämpfte Fixpunktiteration für das elektrostatische Potential und das Austausch-Korrelationspotential implementiert. Als Basis für die Berechnung der Dichten in jedem Iterationsschritt wurde die am WIAS entwickelte Toolbox KPLIB ([5]) verwendet.

Wir stellen im Folgenden exemplarisch Simulationsergebnisse für einen verspannten InGaAsP-Quantum-Well dar. Solche Quantum-Wells sind Bestandteil der aktiven Zone von langwelligen Multi-Quantum-Well-Lasern, vgl. Projekt SMQW-Laser (siehe S. 14). Die Einbeziehung des Hartree- und des Austausch-Korrelationspotentials wirkt sich zunächst auf das Lokalisationsverhalten aus, wie in Abb. 1 dargestellt. Externe Felder werden abgeschirmt (Flachband-Fall, Abb.

2) und die Tendenz zur Lokalisierung nimmt zu (siehe Löcher in Abb. 1), in der Regel bis zu einer bestimmten Dissoziationsgrenze.

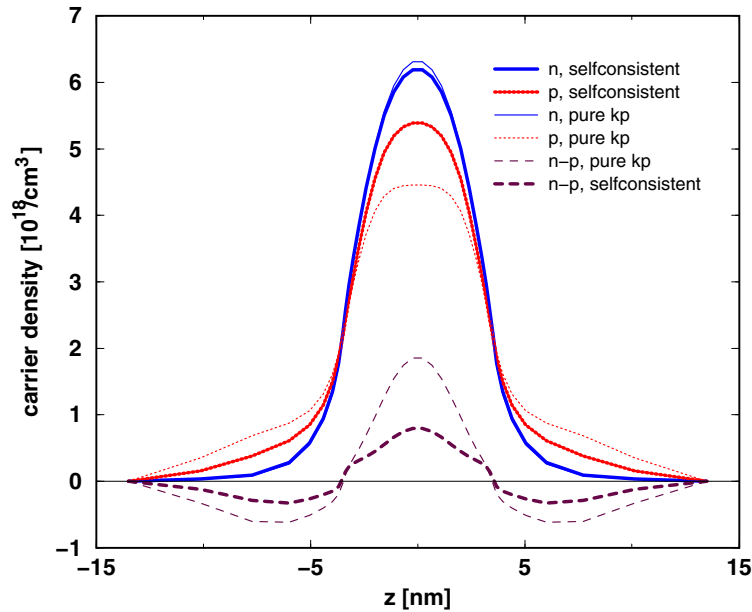


Abb. 1: Lokale Dichteverteilung in einem 7 nm dicken Quantum-Well, eingebettet zwischen zwei 10 nm dicken Barrieren, für eine Flächendichte von $4 \cdot 10^{12}/\text{cm}^2$; dünn: reine 8x8-kp-Rechnungen; dick: selbstkonsistentes 8x8-kp-Modell mit Hartree- und Austausch-Korrelationspotential.

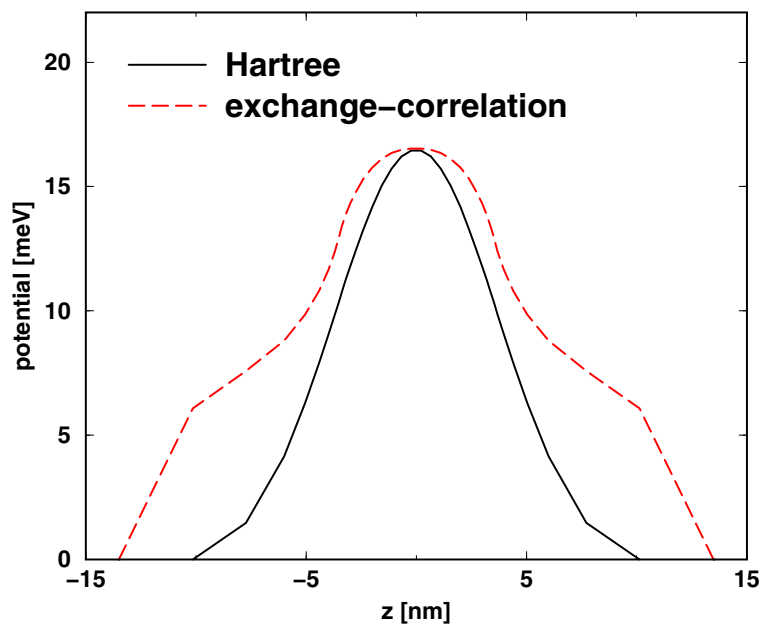


Abb. 2: Räumlicher Verlauf des Hartree- und Austausch-Korrelationspotentials in einem verspannten 7-nm-InGaAsP-Quantum-Well, selbstkonsistent berechnet für eine Flächendichte von $4 \cdot 10^{12}/\text{cm}^2$.

Die Einbeziehung des Austausch-Korrelationspotentials bewirkt insbesondere eine dichteabhängige Bandgap-Renormierung. Das ist ein wohlbekannter Coulomb-Effekt im Halbleiter, der insbesondere die Rotverschiebung des Emissionsspektrums in Halbleiterlasern zur Folge hat, wie in Abb. 3 anhand der Verschiebung des Maximums des optischen Materialgewinns illustriert wird.

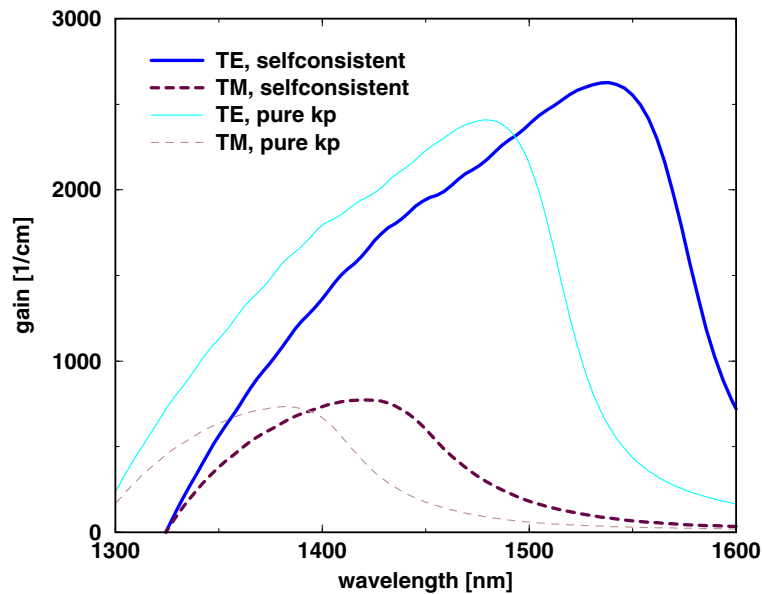


Abb. 3: Spektrum des Materialgewinns (Gain) für TE- und TM-Polarisation für das Beispiel aus Abb. 1 und 2; dick: selbstkonsistentes kp; dünn: reine kp-Rechnungen.

Literatur

1. U. BANDELOW, H.-CHR. KAISER, TH. KOPRUCKI, J. REHBERG, *Modeling and simulation of strained quantum wells in semiconductor lasers*, WIAS-Preprint No. 582, 2000, erscheint in: BMBF-Förderprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“, Springer.
2. —, *Spectral properties of $k \cdot p$ Schrödinger operators in one space dimension*, Numer. Funct. Anal. Optim., **21** (2000), No. 3–4, pp. 379–409.
3. H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, *About a one-dimensional stationary Schrödinger-Poisson system with Kohn-Sham potential*, Z. Angew. Math. Phys., **50** (1999), No. 3, pp. 423–458.
4. —, *About a stationary Schrödinger-Poisson system with Kohn-Sham potential in a bounded two- or three-dimensional domain*, Nonlinear Anal., **41** (2000), No. 1–2, pp. 33–72.
5. *Jahresforschungsbericht 1999*, WIAS, Berlin, 2000, pp. 141–144.

Modellierung, Analyse und Simulation des Widerstands-Impulsschweißens

Bearbeiter: W. Dreyer (FG 7), F. Duderstadt (FG 7), D. Hömberg (FG 1)

Kooperation: Impuls Schweisstechnik GmbH (Ellerbek)

Förderung: BMBF: „Modellierung, Analyse und Simulation des Widerstands-Impulsschweißens“ (03-HO7FV1-0)

Das Widerstands-Impulsschweißen beruht auf dem Prinzip der transformierten Kondensatorentladung. Im Gegensatz zum Standard-Widerstandsschweißen, dessen Anwendungsbereich und technische Durchführung in DIN-Normen beschrieben ist, fehlt diese Normung für das Impulsschweißen. Dementsprechend war es das Ziel dieses Projektes, durch Simulationsrechnungen für verschiedene Standardgeometrien und Metalllegierungen die notwendigen Schweißparameter zu bestimmen und den breiten Anwendungsbereich dieser Technologie unter Beweis zu stellen.

Das mathematische Modell, in dem mechanische, elektrische und thermische Effekte gekoppelt auftauchen, ist in [1] beschrieben. In [3] wird eine Modellerweiterung beschrieben, welche die elektrischen Eigenschaften der Schweißmaschine in Form eines zweimaschigen Schwingkreises berücksichtigt.

Vernachlässigt man die Temperaturabhängigkeit der Lamé-Koeffizienten $\mu_{1,2}$ und des Wärmeausdehnungskoeffizienten, ergibt sich folgendes System partieller Differentialgleichungen:

$$\begin{aligned} -\operatorname{div} \sigma &= 0, \\ \dot{\sigma} + KB(\sigma, T) &= K(\dot{\varepsilon} - \alpha \dot{T} I), \\ \rho c_V \dot{T} - \operatorname{div}(\lambda(T) \operatorname{grad} T) &= -\alpha(3\mu_1 + 2\mu_2)T \operatorname{div} v \\ &\quad + \eta_1(T)|S|^{\eta_2+1} + \gamma(T)|\operatorname{grad} \phi|^2, \\ -\operatorname{div}(\gamma(T) \operatorname{grad} \phi) &= 0. \end{aligned}$$

Die Kriechverzerrung ε^c , die interne Variable des Maxwellkörpers, ergibt sich aus einer Evolutionsgleichung ähnlich dem Norton'schen Kriechgesetz

$$\dot{\varepsilon}^c = B(T, \sigma) = \eta_1(T)|S|^{\eta_2-1}S,$$

mit dem Deviator $S = \sigma - \frac{1}{3}(\operatorname{tr} \sigma)I$.

Dazu kommen Anfangs- und Randbedingungen.

In [4] und [5] wurden verwandte elektro-thermomechanische Kontaktprobleme untersucht. Ein Existenzresultat für obiges System für den Fall eines linearen Kriechgesetzes ($\eta_2 = 1$) konnte in [6] bewiesen werden.

Eine Gesamtdarstellung des Problems einschließlich des Vergleichs von Modellrechnungen mit Experimenten, die beim Kooperationspartner durchgeführt wurden, findet sich in [2].

Literatur

1. W. DREYER, F. DUDERSTADT, D. HÖMBERG, *Finite-Element-Simulation des Kondensator-Impulsschweißens*, Technische Mechanik, **19** (1999), pp. 331–340.

2. F. DUDERSTADT, *Modellierung und Simulation des Kondensator-Impulsschweißens*, Dissertation, in Vorbereitung.
3. W. DREYER, F. DUDERSTADT, D. HÖMBERG, *Modeling and simulation of capacitor impulse welding*, erscheint in: BMBF-Förderprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“, Springer.
4. D. HÖMBERG, A. KHLUDNEV, J. SOKOŁOWSKI, *Quasistationary problem for a cracked body with electrothermoconductivity*, erscheint in: Interfaces and Free Boundaries.
5. D. HÖMBERG, A. KHLUDNEV, *An equilibrium problem for a thermoelectroconductive body with the Signorini condition on the boundary*, erscheint in: Math. Methods Appl. Sci.
6. ———, *A mathematical model for capacitor impulse welding*, WIAS-Preprint No. 638, 2001.

3D-Simulation von DEPMOS-Röntgendetektoren

Bearbeiter: H. Gajewski (FG 1), H.-Chr. Kaiser (FG 1), H. Langmach (FG 3), R. Nürnberg (FG 1)

Kooperation: KETEK GmbH Halbleiter- und Reinraumtechnik, R. Richter (MPI-Halbleiterlabor, München), L. Strüder (Max-Planck-Institut für Physik, München)

Förderung: BMBF: „3D-Simulation von Halbleiterdetektoren“ (03-GA7FV1-2)

Bei der Beobachtung von Röntgenstrahlung in der Astrophysik und in anderen Anwendungen spielen Halbleiterdetektoren eine rapide wachsende Rolle. Für die Entwicklung und Optimierung derartiger Halbleiterdetektoren sind mathematische Modellierung und numerische Simulation unabdingbar. Am MPI-Halbleiterlabor wird das Simulationsprogramm *WIAS-TeSCA* (*Two and three dimensional Semi-Conductor Analysis package*) zum Design von Detektoren und zur Voraussage ihres qualitativen und quantitativen Verhaltens eingesetzt.

In [2] haben wir das mathematische Modell für Halbleiterdetektoren dargelegt und die Hauptideen beschrieben, die unserem Code zur zuverlässigen und effizienten numerischen Lösung der Modellgleichungen unterliegen. Zur Beurteilung eines Detektordesigns dienen vor allem der räumliche Verlauf des elektrostatischen Potentials und der Elektronen- und Löcherdichte in bestimmten Betriebszuständen des Detektors. In [1] wurden erste Simulationen einer pn-CCD (*Charge Coupled Devices*)-Schieberegisterstruktur vorgestellt. Diese werden als Röntgen-Detektoren in den ESA-Satelliten *ABRIXAS* und *XMM (Xray Multi Mirror)* eingesetzt.

Devices wie der DEPFET (*DEPLETED Field Effect Transistor*), insbesondere der MOS-Typ-DEPFET (*DEPMOS*), vgl. Abb. 1, wie sie am MPI-Halbleiterlabor und den Max-Planck-Instituten für Physik und Extraterrestrische Physik entwickelt werden, bieten im Vergleich zu konventionellen Detektoren den wichtigen Vorteil, Detektor- und Verstärkereigenschaften auf einem Chip zu vereinen. Hohe Verstärkung und geringes Rauschen sind realisierbar und die generierte Ladung kann am Entstehungsort ausgelesen werden, so dass mit dem Ladungstransport zusammenhängende Probleme vermieden werden. Der jetzt erreichte Entwicklungsstand des 3D-Zweiges von *WIAS-TeSCA* erlaubt Simulationen solcher Bauelemente. Diese bestätigen für ein Prototyp-Design eines DEPFET schnelles und gutes Funktionieren des Bauelements.

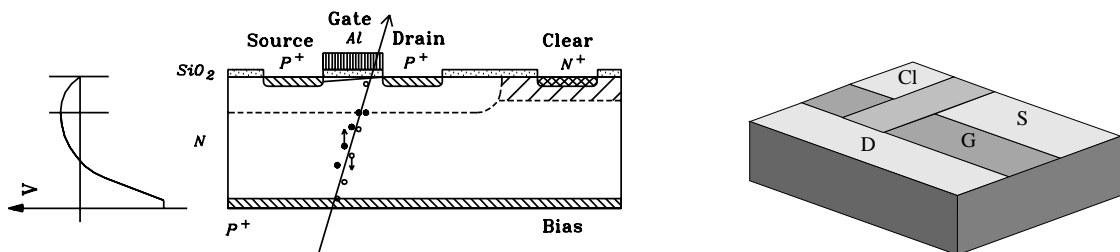


Abb.1: Links: MOS-DEPLETED Field Effect Transistor des MPI-Halbleiterlabors; rechts: Schema des 3D-Simulationsgebietes.

Wir präsentieren im Folgenden einige 3D-Simulationsergebnisse zu aktuell interessierenden Detektorstrukturen dieses Typs, deren Struktur und prinzipielle Arbeitsweise in Abb. 1 beschrieben werden. Die Pixelzelle hat die Abmessungen $18 \mu\text{m} \times 15 \mu\text{m} \times 280 \mu\text{m}$, wobei das Bauelement in den 3D-Abbildungen nur bis zu einer Tiefe von $12 \mu\text{m}$ dargestellt wird.

Das schwach n-dotierte Substrat bildet das Sensorgebiet des Detektors. Über dem Substrat befindet sich ein Feldeffekttransistor mit den Kontakten: Source (S), Drain (D) und Gate (G). Unter dem Gate befindet sich der Kanal.

Beim Einfall von Röntgenstrahlung werden im Substrat Paare von Elektronen und Löchern gebildet. Dabei wandern die Löcher vollständig zum unteren Rückkontakt, an den eine große negative Spannung angelegt wird. Die Elektronen werden dagegen unterhalb des Kanals des Feldeffekttransistors gesammelt. Durch eine geeignete Dotierung wird dort ein Potentialminimum für Elektronen geschaffen, in das die Elektronen wandern können, vgl. Abb. 1 und 2. Der Feldeffekttransistor ermöglicht eine Verstärkung des empfangenen Signals. Die gesammelte Ladung bildet ein so genanntes internes Gate und steuert den Strom im Feldeffekttransistor. Der Strom wird mit der gesammelten Ladung größer, bis durch Anlegen einer großen positiven Spannung (vgl. Abb. 4) am Clear-Kontakt (Cl) die Ladung aus dem internen Gate entfernt wird. Die Entfernung der Ladung aus dem internen Gate muss möglichst vollständig erfolgen, um auch geringste Strahlungsmengen bis hin zu einzelnen Photonen detektieren zu können.

Während der Phase des Sammelns von Elektronen ist der Clear-Kontakt gegenüber dem Sensorbereich durch eine Potentialbarriere abgeschirmt, um ein vorzeitiges Abfließen von Ladungen zu verhindern, vgl. Abb. 2 und 3. Insbesondere zeigt Abb. 2 die Herausbildung dieser Potentialbarriere in der p-dotierten Schicht unterhalb des n-dotierten Clear-Kontakts. Diese Schicht wird beim Löschvorgang vollständig von Löchern entleert, vgl. Abb. 5.

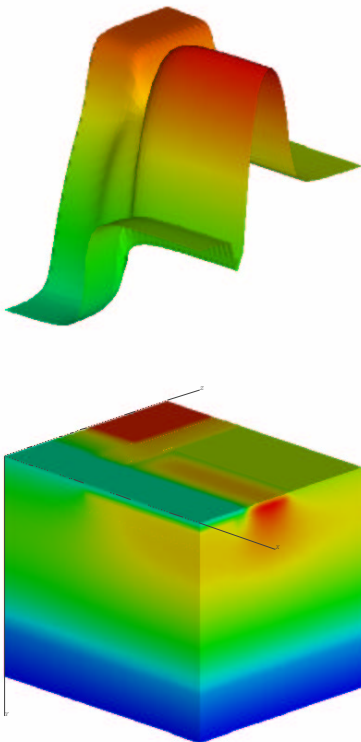


Abb. 2: Elektrostatisches Potential beim Einfangmodus; oben: Niveaufläche in einer Tiefe von 500 nm; unten: 3D-Darstellung.

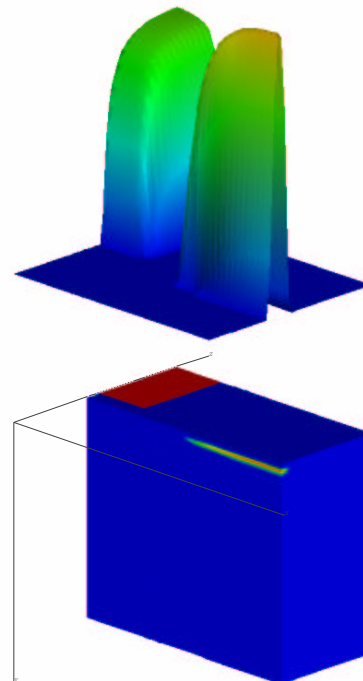


Abb. 3: Elektronendichte beim Einfangmodus; oben: Niveaufläche in einer Tiefe von 500 nm; unten: 3D-Darstellung.

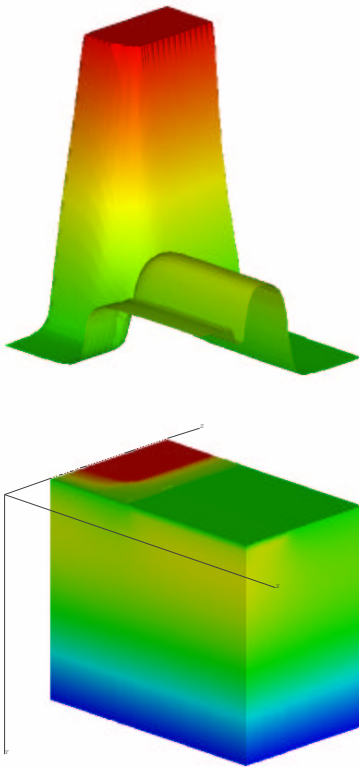


Abb. 4: Elektrostatisches Potential im Löschmodus; oben: Niveaulfläche in einer Tiefe von 200 nm; unten: 3D-Darstellung.

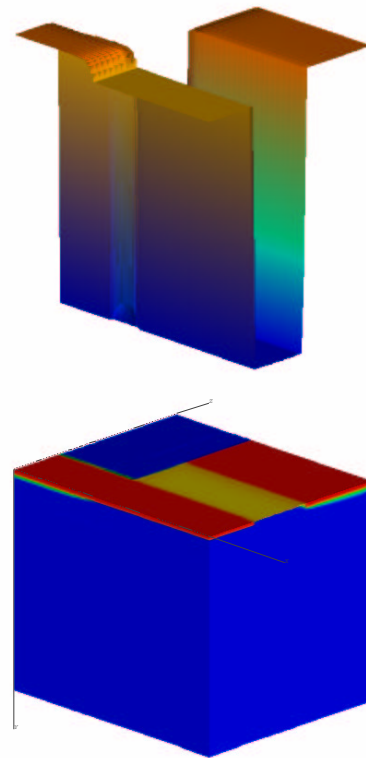


Abb. 5: Löcherdichte im Löschmodus; oben: Niveaulfläche in einer Tiefe von 200 nm; unten: 3D-Darstellung.

Literatur

1. *Jahresforschungsbericht 1999*, WIAS, Berlin, 2000, pp. 133–135.
2. H. GAJEWSKI, H.-CHR. KAISER, H. LANGMACH, R. NÜRNBERG, R. H. RICHTER, *Mathematical modeling and numerical simulation of semiconductor detectors*, erscheint in: BMBF-Förderprogramm „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“, Springer.
3. G. LUTZ, R. H. RICHTER, L. STRÜDER, *DEPMOS Arrays for x-ray imaging*, in: *X-Ray Optics, Instruments, and Missions III* (J. E. Truemper, B. Aschenbach, Hrsg.), Proceedings of SPIE, **4012**, SPIE, 2000, pp. 249–256.

5 Wissenschaftlich-technische Dienste

5.1 Bibliothek

Zusammenfassung

Die Bibliothek ist eine wissenschaftliche Spezialbibliothek auf Teilgebieten der Angewandten Mathematik für Mitarbeiter, Doktoranden und Gäste des Instituts sowie für eine regionale Fachöffentlichkeit. Das Literatur- und Informationsangebot orientiert sich an den wissenschaftlichen Zielsetzungen des Instituts und an den Erfordernissen der projektorientierten Forschung. In Auswahl wird Literatur aus mathematischen Teildisziplinen (vorrangig Analysis, Stochastik, Numerik) und Grenzgebieten der Mathematik sowie Literatur aus den hauptsächlichen Anwendungsfeldern (z. B. Mikro-, Nano- und Optoelektronik; Phasenübergänge; Strömungs- und Transportprobleme in Kontinuen; Stochastik in Natur- und Wirtschaftswissenschaften) benötigt. Es werden konventionelle und digitale Medien erworben bzw. lizenziert: Zeitschriften und Informationsmittel (gedruckt oder elektronisch als Volltext- bzw. bibliographische Online-Datenbanken oder CD-ROM), Buch- und Preprint/Report-Literatur.

Die Lizenznahme erfolgt derzeit durch eigene Abonnements oder im Rahmen von Konsortien. Was nicht beschafft werden kann, muss aus fremden Beständen ermittelt und entliehen werden.

Erwerbungen

- Bücher

Der Bucherwerb findet aufgrund der finanziellen Situation in unzureichendem, jährlich sinkenden Umfang statt.

- Zeitschriften

Die Ausgaben für Zeitschriften mussten 2000 durch Ab- bzw. Umbestellung von Abonnements (Jg. 2001) um rd. 72 TDM reduziert werden.

Zeitschriften der Verlage Springer, Elsevier und Kluwer konnte das Institut als Mitglied im Friedrich-Althoff-Konsortium (FAK) artikelweise online nutzen, soweit sie zum gemeinschaftlichen Abonnement des FAK gehören.

Zeitschriften des Verlags Academic Press (sechs Titel) haben wir 2000 wie in den Vorjahren erworben und als FAK-Mitglied online zu den Bedingungen des Konsortialvertrages genutzt (alle Titel). Neu bei Acad. Press ist die primär elektronische Lieferung beginnend mit dem Jahrgang 2001.

- Informationsmittel

Der Erwerbung bzw. Lizenzierung von „angereicherten“ bibliographischen oder bibliometrischen Informationsmitteln kommt eine permanent hervorragende Bedeutung zu.

Die mathematischen Datenbanken erwerben wir im Rahmen von Mitgliedschaften und längerfristigen Konsortialabkommen:

Zbl.-Konsortium (2000–2004); NRW-Konsortium (2001–2002).

Neu in 2000 ist der Konsortialvertrag zwischen dem Institute for Scientific Information (ISI) und dem FAK (mit Beteiligung der hessischen Bibliotheken).

Das Angebot umfasst seit Jahresende neben allen Datenbanken ab 2000, den Backfiles von 1994–1999, dem Inhaltsdienst Current Contents Connect (CCC) auch die Journal

Citation Reports (JCR) 1999 und 2000 (nach Erscheinen). Der Vertrag gilt zunächst bis Ende 2002.

Erwerbungsprobleme, Folgen und Konsequenzen

Die sich verschärfende Haushaltssituation und die ungünstige Währungsrelation sind gravierende Probleme: Unzureichende Erwerbung bedeutet zunächst Informationsdefizit und anstelle zukünftig inhouse nachnutzungsfähiger Bibliotheksbestände das fortgesetzte Entstehen von Kosten für Einwegmaterialien.

Hoffnungsvoll sind vereinzelte Ansätze einer gedämpften Preispolitik (Zusammenwirken von Fachgesellschaften, Herausgebern und Verlegern).

Um die noch nicht beendete Zeitschriftenkrise nicht auch zu einer Monographiekrise werden zu lassen, haben wir auf Kosten von Zeitschriften-Abonnements weiterhin Bücher im Umfang von rd. 16 % des Vermehrungsetats beschafft.

Die finanziellen Aufwendungen für die konsortiale Online-Nutzung elektronischer Produkte sind eine wichtige Maßnahme, um gemeinsam mit anderen (vorwiegend Universitäts-) Bibliotheken für den Zugang zu den benötigten publizierten wissenschaftlichen Informationen zu sorgen.

Teilnahme der Bibliothek an Konsortialverträgen

- Neben den fortbestehenden FAK-Verträgen mit Acad. Press, Springer und Elsevier ist die Testvereinbarung von 1999 mit Kluwer für 2000 und 2001 verlängert worden.
- Das wichtigste Ergebnis in 2000 ist der umfangreiche FAK-Vertragsabschluss mit dem ISI über die Nutzung von WoS, CCC und JCR mit der Datenhaltung in Darmstadt.
- Neben dem Zbl.MATH-Konsortium (2000–2004) gehört das WIAS seit Herbst 2000 mit Wirkung für 2001 und 2002 dem AMS-NRW-Konsortium für MathSciNet an.

Statistische Angaben

- **Erwerbung:** Medieneinheiten (ME) und laufende (lfde.) Zeitschriften
 - ME (verlegerische): 286; Buchbinderbände: 270; Preprints/Reports: 1.341.
 - Zugang: 1.897 ME; Bibliotheksbestand: 70.027 ME.
 - Aussonderung: 4.666 (vorw. Preprints); Bibliotheksbestand: 65.361 ME.
 - Lfde. Zeitschriften: 119.
- **Literaturbereitstellung** aus eigenen Beständen

Entleihbar sind nur Bücher und Preprints. Arbeitsplatzliteratur verbleibt in Dauerleihe. Benutzungen *in der Bibliothek* werden nicht gezählt.
Vorübergehende Entleihungen *aus der Bibliothek*: 2.688 ME.
Befristete Entleihungen an Fremde: 382 ME.
- **Literaturbeschaffung** aus fremden Beständen für Institutsmitarbeiter und -gäste

Aus gedruckten Quellen: 1.004 Vorgänge (614 Bücher, 390 Artikel).
Aus elektronischen Zeitschriften: Da der Zugang über IP-Kontrolle erfolgt, können die Artikel von den Wissenschaftlern online direkt genutzt werden.

5.2 Fachinformation

Die primäre Aufgabe der Fachinformation besteht darin, für die Forschungsgruppen des Instituts die erforderliche (Fach-)Informationsversorgung stabil zu gewährleisten. Dazu werden unterschiedliche Recherchemöglichkeiten in bibliographischen Informations-Datenbanken und in Volltext-Datenbanken für alle Mitarbeiter des WIAS angeboten:

- Im Vordergrund stehen die für die Mathematik wichtigsten Datenbanken „Zentralblatt MATH/Database“ und „MathSci“ (Mathematical Reviews).
- Zur Versorgung der anwendungs - und projektorientierten Forschung werden auch Zugangsmöglichkeiten zu natur- und ingenieurwissenschaftlichen Online-Datenbanken vorgehalten.
- Neben die bibliographischen Nachweis-Datenbanken treten zunehmend Volltext-Datenbanken im WWW (Beispiel: Zeitschriftenartikel).
Von der Fachinformation werden auf dem WIAS-Server in der Kollektion „Electronic journals“ Links zu den im WWW angebotenen elektronischen Versionen mathematischer Zeitschriften gesetzt (soweit diese für das WIAS relevant sind):
<http://www.wias-berlin.de/service/fachinf/mathworld/ejournals>
- Zusätzlich werden Offline-Recherchemöglichkeiten (kostenpflichtige CD-ROM-Datenbanken) an speziellen Recherche-PCs (u. a. in der Bibliothek) angeboten.

Die Nutzungsmöglichkeiten sind aufgabenorientiert variabel gestaltet, z. B. ist die

- institutsoffene Nutzung von „Zbl.MATH“ und von „MathSciNet“ (Math. Rev. on the Web) über das WWW für alle Rechnerplattformen realisiert, so dass von jedem Arbeitsplatz auf die Informationsressourcen zugegriffen werden kann (Dezentralisierung). Dagegen erfolgt die
- Durchführung von komplexeren Recherchen in den nichtmathematischen Datenbanken aus Effizienz- und Kostengründen zentral durch den Fachinformationsbeauftragten. Den Nutzungsschwerpunkt bilden hier die Datenbanken INSPEC (IEE) und SCISEARCH (ISI) über den Host STN/FIZ Karlsruhe.
- Die Nutzung des Science Citation Index konnte im Herbst durch die Beteiligung an einem Konsortialvertrag auf die Web-basierte (institutsoffene) Recherche übergehen: WoS (Web of Science) von ISI / Thomson Scientific (vgl. Ausführungen im Punkt Bibliothek).

Außer dem Datenbank-Retrieval gab es die folgenden Aktivitäten seitens der Fachinformation:

- Auf dem WIAS-Server werden die im Institut erstellten Preprints in den derzeit üblichen Formaten im WWW bereitgestellt: <http://www.wias-berlin.de/publications/preprints>. Ihre Abstracts (bibliographische Beschreibung plus Summary) werden metasprachlich mit dem Dublin Core indiziert. Damit wird erreicht, dass diese Web-Dokumente weltweit recherchierbar sind, z. B. mit MPRESS (Math. Preprint Search System).
- Das WIAS ist Mitglied des Math-Net und dort mit einer standardisierten „Secondary Homepage“ präsent: <http://www.wias-berlin.de/math-net>.
- Der Fachinformationsbeauftragte des WIAS arbeitet in der IuK-Kommission der Wissenschaftlichen Fachgesellschaften mit.

5.3 Rechentechnik

Die Gruppe Rechentechnik besteht aus fünf Mitarbeitern. Zwei Mitarbeiter sind für die technische Betreuung der Rechner und deren Verkabelung sowie für die Betreuung der Windows-Software zuständig. Außerdem betreuen sie die Klima- und Belüftungstechnik, die Multimedia-technik, die Telefonanlage des Instituts und betreuen und organisieren die von externen Firmen durchgeführten Installationsarbeiten. Zwei Mitarbeiter kümmern sich um die Softwarebetreuung der UNIX-Rechner sowie um das Management des gesamten Rechnersystems einschließlich der Ankopplung des hausinternen Netzes an das Weitverkehrsnetz. Ein Mitarbeiter unterstützt Anwendergruppen bei der Anwendung der installierten Software (z. B. Bibliotheksrecherche und mathematische Spezialsoftware) und betreut die Internet-Informationendienste (HyperWave, WWW, FTP).

Als Rechentechnik sind folgende Geräte installiert:

- 62 Windows-Server, PCs und Notebooks unter MS Windows und Linux,
- 60 Compaq/DEC Alpha unter Compaq Tru64 UNIX,
- 20 Silicon Graphics unter IRIX,
- 3 SUN unter SunOS bzw. Solaris.

Neben dem Einsatz immer leistungsfähigerer Workstations und PCs bestimmten folgende Projekte die Entwicklung der Rechentechnik des WIAS im Jahr 2000:

1. Umbau des Rechnerraums

Der gesamte Bereich zentrale Rechentechnik und graphischer Arbeitsraum wurde umgebaut. Dabei wurde der neue Rechnerraum völlig neu ausgebaut und eingerichtet. Er ist nun mit moderner Klimatechnik, leistungsfähiger Rauch- und Einbruchmeldetechnik sowie flexibler Strom- und Datenverkabelung ausgestattet. Die Arbeitsmöglichkeiten im graphischen Arbeitsraum haben sich wesentlich verbessert.

2. Corporate Network, GWIN

Es wurden wesentliche Vorarbeiten durchgeführt, um im Jahr 2001 den Betrieb des Corporate Networks des FVB aufnehmen zu können. Außerdem wurde der Anschluss des FVB an das neue Gigabit-WIN vorbereitet.

3. Einsatz der SUN Ray1

Die bisher genutzten und inzwischen veralteten X-Terminals wurden durch SUN Ray1 ersetzt. Dazu war die Installation eines SUN-Servers (E220R) sowie eines eigenen auf FastEthernet basierenden Datennetzes erforderlich. Es wurden insgesamt ca. 50 Arbeitsplätze mit SUN Ray1 ausgestattet. Die Verwendung alter Bildschirme erweist sich dabei teilweise als problematisch, so dass im Jahr 2001 neue Bildschirme beschafft werden sollten.

4. Windows2000-Server

Durch die Installation eines leistungsfähigen Servers mit Windows2000, Microsoft Terminalserver und Citrix Metaframe wurde für alle Mitarbeiter die Möglichkeit, Windows-Software an ihrem Arbeitsplatz zu nutzen, weiter verbessert.

5. Computeserver Compaq GS80

Es wurde ein Computeserver Compaq GS80 mit acht Prozessoren (Alpha 21264/733MHz) und acht GByte RAM unter Compaq Tru64 UNIX V5.1 in Betrieb genommen. Damit wurde die am WIAS installierte Rechenleistung wesentlich erhöht. Der Server steht im Multiuserbetrieb allen Mitarbeitern und Gästen des Instituts zur Verfügung.

6 Publikationen, wissenschaftliches Leben

6.1 Veröffentlichungen

Monographien

B. FIEDLER, K. GRÖGER, J. SPREKELS (HRSG.), *EQUADIFF 99: International Conference on Differential Equations, Berlin 1999*, **1**, World Scientific, Singapore [u. a.], 2000, 806 S.

—, *EQUADIFF 99: International Conference on Differential Equations, Berlin 1999*, **2**, World Scientific, Singapore [u. a.], 2000, 681 S.

V. SCHULZ (GUEST EDITOR), *Special Issue: SQP-based Direct Discretization Methods for Practical Optimal Control Problems*, *J. Comput. Appl. Math.*, **120** (2000), No. 1–2, 254 S.

V. SPOKOINY, A. SHIRYAEV, *Statistical Experiments and Decisions, Asymptotic Theory*, World Scientific, Adv. Ser. Stat. Sci. Appl. Prob., **8**, World Scientific, Singapore, 2000, 283 S.

Aufsätze in referierten Fachzeitschriften

B. ALBERS, *Coupling of adsorption and diffusion in porous and granular materials. A 1D-example of the boundary value problem*, *Arch. Appl. Mech.*, **70** (2000), pp. 519–531.

U. BANDELOW, H.-CHR. KAISER, TH. KOPRUCKI, J. REHBERG, *Spectral properties of $k \cdot p$ Schrödinger operators in one space dimension*, *Numer. Funct. Anal. Optim.*, **21** (2000), pp. 379–409.

E. BÄNSCH, B. HÖHN, *Numerical treatment of the Navier-Stokes equations with slip-boundary conditions*, *SIAM J. Sci. Comput.*, **21** (2000), pp. 2144–2162.

E. BÄNSCH, A. SCHMIDT, *Simulation of dendritic crystal growth with thermal convection*, *Interfaces and Free Boundaries*, **2** (2000), pp. 95–115.

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

A. BOVIER, M. ECKHOFF, V. GAYRARD, M. KLEIN, *Metastability and small eigenvalues in Markov chains*, *J. Phys. A*, **33** (2000), L447–L451.

—, *Metastability in stochastic dynamics of disordered mean-field models*, *Probab. Theory Related Fields*, **119** (2001), pp. 99–161 (Online-Publikation Dezember 2000 unter DOI 10.1007/s004400000104).

A. BOVIER, M. ZAHRADNÍK, *A simple inductive approach to the problem of convergence of cluster expansions of polymer models*, *J. Statist. Phys.*, **100** (2000), pp. 765–778.

G. BRUCKNER, J. CHENG, *Tikhonov regularization for an integral equation of the first kind with logarithmic kernel*, *J. Inverse Ill-Posed Problems*, **8** (2000), pp. 665–675.

G. BRUCKNER, M. YAMAMOTO, *On a noisy operator equation and the identification of point-sources in the 1-D wave equation*, *Z. Angew. Math. Mech.*, **80** (2000), pp. 377–388.

—, *Determination of point wave sources by pointwise observations: Stability and reconstruction*, Inverse Problems, **16** (2000), pp. 723–748.

W. DREYER, M. KUNIK, *Cold, thermal and oscillator closure of the atomic chain*, J. Phys. A, **33** (2000), pp. 2097–2129.

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

—, *Computer modeling of micromorphological change by phase field models: Applications to metals and ceramics*, J. Australasian Ceramic Soc., **36** (2000), pp. 83–94.

—, *Quantitative modeling of diffusional coarsening in eutectic tin/lead solders*, Internat. J. Solids Structures, **38** (2001), pp. 1433–1458 (erschienen 2000).

W. DREYER, W. H. MÜLLER, W. WEISS, *Tales of thermodynamics and obscure applications of the second law*, Contin. Mech. Thermodyn., **12** (2000), pp. 151–184.

M. A. EFENDIEV, V. CHEPYZHOV, *Hausdorff dimension estimation for attractors of nonautonomous dynamical systems in an unbounded domain*, Comm. Pure Appl. Math., **53** (2000), pp. 647–665.

M. A. EFENDIEV, A. MIRANVILLE, S. ZELIK, *Exponential attractors for a nonlinear reaction-diffusion system in R^3* , C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math., **330** (2000), pp. 713–718.

M. A. EFENDIEV, E. WEGERT, *Nonlinear RHP with Lipschitz boundary condition*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A, **130** (2000), pp. 793–800.

A. EIBECK, W. WAGNER, *An efficient stochastic algorithm for studying coagulation dynamics and gelation phenomena*, SIAM J. Sci. Comput., **22** (2000), pp. 802–821.

—, *Approximative solution of the coagulation-fragmentation equation by stochastic particle systems*, Stochastic Anal. Appl., **18** (2000), pp. 921–948.

J. ELSCHNER, I. G. GRAHAM, *Numerical methods for integral equations of Mellin type*, J. Comput. Appl. Math., **125** (2000), pp. 423–437.

J. ELSCHNER, R. HINDER, F. PENZEL, G. SCHMIDT, *Existence, uniqueness and regularity for solutions of the conical diffraction problem*, Math. Models Methods Appl. Sci., **10** (2000), pp. 317–341.

D. A. DAWSON, K. FLEISCHMANN, C. MUELLER, *Finite time extinction of superprocesses with catalysts*, Ann. Probab., **28** (2000), pp. 603–642.

P. DONNELLY, S. N. EVANS, K. FLEISCHMANN, T. G. KURTZ, X. ZHOU, *Continuum-sites stepping-stone models, coalescing exchangeable partitions, and random trees*, Ann. Probab., **28** (2000), pp. 1063–1110.

J. ENGLÄNDER, K. FLEISCHMANN, *Extinction properties of super-Brownian motions with additional spatially dependent mass production*, Stochastic Process Appl., **88** (2000), pp. 37–58.

K. FLEISCHMANN, V. A. VATUTIN, *An integral test for a critical multitype spatially homogeneous branching particle process and a related reaction-diffusion system*, *Probab. Theory Related Fields*, **116** (2000), pp. 545–572.

—, *Deviations from typical type proportions in critical multitype Galton-Watson processes* (in Russian), *Teor. Veroyatnost. i Primenen.*, **45** (2000), pp. 30–51.

O. SCHENK, K. GÄRTNER, W. FICHTNER, *Efficient sparse LU factorization with left-right looking strategy on shared memory multiprocessors*, *BIT.Numerical Mathematics*, **40** (2000), pp. 158–176.

A. GLITZKY, R. HÜNLICH, *Electro-reaction-diffusion systems including cluster reactions of higher order*, *Math. Nachr.*, **216** (2000), pp. 95–118.

G. HEBERMEHL, R. SCHLUNDT, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *The eigen mode problem for microwave transmission lines with absorbing boundary conditions*, *Z. Angew. Math. Mech.*, **80** (2000), Suppl. 3, pp. 837–838.

R. HENRION, *On global, local and stationary solutions in three-way data analysis*, *J. Chemometrics*, **14** (2000), pp. 261–274.

R. HINDER, E. MEISTER, S. NAZAROV, *Asymptotics of solutions to Joukovskii-Kutta-type problems at infinity*, *Appl. Anal.*, **76** (2000), pp. 153–166.

S. JASCHKE, R. STEHLE, S. WERNICKE, *Arbitrage und die Gültigkeit des Barwertprinzips im Markt für Bundeswertpapiere*, *Schmalenbachs Zeitschrift für betriebswirtschaftliche Forschung / Schmalenbach Business Review*, **52** (2000), pp. 440–468.

H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, *About a stationary Schrödinger-Poisson system with Kohn-Sham potential in a bounded two- or three-dimensional domain*, *Nonlinear Anal. TMA*, **41** (2000), pp. 33–72.

TH. KOPRUCKI, H.-J. WAGNER, *New exact ground states for one-dimensional quantum many-body systems*, *J. Statist. Phys.*, **100** (2000), pp. 779–790.

G. GILARDI, P. KREJČÍ, J. SPREKELS, *Hysteresis in phase-field models with thermal memory*, *Math. Methods Appl. Sci.*, **23** (2000), pp. 909–922.

P. KREJČÍ, *Resonance in Preisach systems*, *Appl. Math.*, **45** (2000), pp. 439–468.

—, *Forced oscillations in Preisach systems*, *Phys. B*, **276** (2000), pp. 81–86.

P. KREJČÍ, J. SPREKELS, *A hysteresis approach to phase-field models*, *Nonlinear Anal. TMA*, **39** (2000), pp. 569–586.

—, *Phase-field models with hysteresis*, *J. Math. Anal. Appl.*, **252** (2000), pp. 198–219.

C. KÜLSKE, *Weakly Gibbsian representations for joint measures of quenched lattice spin models*, *Probab. Theory Related Fields*, **119** (2001), pp. 1–30 (Online-Publikation November 2000 unter DOI 10.1007/s004400000097).

C. KÜLSKE, A. C. D. VAN ENTER, C. MAES, *Comment on critical behavior of the randomly spin diluted 2D Ising model: A grand ensemble approach*, *Phys. Rev. Lett.*, **84** (2000), p. 6134.

V. ARNĂUTU, H. LANGMACH, J. SPREKELS, D. TIBA, *On the approximation and the optimization of plates*, Numer. Funct. Anal. Optim., **21** (2000), pp. 337–354.

F. ALBRECHT, L. BREHMER, A. LIEMANT, J. STEPHAN, *Interplay of polaronic and disorder effects on electronic charge transport*, Synthetic Metals, **109** (2000), pp. 327–331.

G. N. MILSTEIN, *Orbital stability index for stochastic systems*, Stochastic Anal. Appl., **18** (2000), pp. 777–809.

G. N. MILSTEIN, M. TRETYAKOV, *Numerical algorithms for semilinear parabolic equations with small parameter based on weak approximation of stochastic differential equations*, Math. Comp., **69** (2000), No. 229, pp. 237–267.

—, *Numerical analysis of noise-induced regular oscillations*, Phys. D, **140** (2000), pp. 244–256.

G. N. MILSTEIN, A. VERETENNIKOV, *On deterministic and stochastic sliding modes via small diffusion approximation*, Markov Proc. Related Fields, **6** (2000), pp. 371–395.

V. M. ADAMYAN, H. NEIDHARDT, *On the absolutely continuous subspace for non-selfadjoint operators*, Math. Nachr., **210** (2000), pp. 5–42.

J. POLZEHL, V. SPOKOINY, *Adaptive Weights Smoothing with applications to image restoration*, J. Roy. Statist. Soc. Ser. B, **62** (2000), pp. 335–354.

M. RADZIUNAS, H.-J. WÜNSCHE, B. SARTORIUS, O. BROX, D. HOFFMANN, K. R. SCHNEIDER, D. MARCENAC, *Modeling self-pulsating DFB-lasers with an integrated phase tuning section*, IEEE J. Quantum Electronics, **36** (2000), pp. 1026–1034.

A. RATHSFELD, *Quadrature methods for 2D and 3D problems*, J. Comput. Appl. Math., **125** (2000), pp. 439–460.

M. AUBINET, T. MARKKANEN, O. KURBANMURADOV, U. RANNIK, K. K. SABELFELD, T. VESALA, *Footprint analysis for measurements over a heterogeneous forest*, Boundary-Layer Meteorology, **97** (2000), pp. 137–166.

S. DI STASIO, V. V. KARASOV, A. LEVYKIN, A. ONISCHUK, V. PANFILOV, K. K. SABELFELD, V. STRUNIN, *The role of dipole interactions in coagulation of silicon agglomerates*, J. Aerosol Sci., **31** (2000), pp. 950–951.

S. N. DUBTSOV, A. LEVYKIN, K. K. SABELFELD, *Kinetics of aerosol formation during tungsten hexacarbonyl photolysis*, J. Aerosol Sci., **31** (2000), pp. 509–518.

O. KURBANMURADOV, K. K. SABELFELD, *Lagrangian stochastic models for turbulent dispersion in the atmospheric boundary layer*, Boundary-Layer Meteorology, **97** (2000), pp. 191–218.

—, *Coagulation of aerosol particles in intermittent turbulent flows*, Monte Carlo Methods Appl., **6** (2000), pp. 211–253.

A. LEVYKIN, A. ONISCHUK, V. PANFILOV, K. K. SABELFELD, R. SAMOILOVA, V. STRUNIN, M. USHAKOVA, *Aerosol formation under heterogeneous/homogeneous thermal decomposition of silane: Experiment and numerical modeling*, J. Aerosol Sci., **31** (2000), pp. 879–906.

—, *Aggregate under homogeneous silane thermal decomposition*, J. Aerosol Sci., **31** (2000), pp. 1263–1281.

V. F. BUTUZOV, N. N. NEFEDOV, K. R. SCHNEIDER, *Singularly perturbed reaction-diffusion systems in cases of exchange of stabilities*, Natur. Resource Modeling, **13** (2000), pp. 247–269.

K. R. SCHNEIDER, T. WILHELM, *Model reduction by extended quasi-steady-state approximation*, J. Math. Biol., **40** (2000), pp. 443–450.

TH. DREYER, B. MAAR, V. SCHULZ, *Multigrid optimization in applications*, J. Comput. Appl. Math., **120** (2000), No. 1–2 (Special Issue), pp. 67–84.

B. MAAR, V. SCHULZ, *Interior point multigrid methods for topology optimization*, Struct. Multidisc. Optim., **19** (2000), pp. 214–224.

M. VON SCHWERIN, O. DEUTSCHMANN, V. SCHULZ, *Process optimization of reactive systems by partially reduced SQP methods*, Computers and Chemical Engineering, **24** (2000), pp. 89–97.

V. TRONCIU, H.-J. WÜNSCHE, J. SIEBER, K. R. SCHNEIDER, *Dynamics of single mode semiconductor lasers with passive dispersive reflectors*, Optics Communications, **182** (2000), pp. 221–228.

V. SPOKOINY, *Adaptive drift estimation for nonparametric diffusion model*, Ann. Statist., **28** (2000), pp. 815–836.

V. SPOKOINY, R. LIPTSER, *Deviation probability bound for martingales with applications to statistical estimation*, Statist. Probab. Lett., **46** (2000), pp. 347–357.

J. SPREKELS, D. TIBA, *Sur les arches lipschitziennes*, C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math., **331** (2000), pp. 179–184.

D. TIBA, W. LIU, P. NEITTAANMÄKI, *Sur les problèmes d'optimisation structurelle*, C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math., **331** (2000), pp. 101–106.

C. H. TSENG, K. L. TEO, A. CANTONI, Z. ZANG, *Envelope-constrained filters: Adaptive algorithms*, IEEE Transactions on Signal Processing, **48** (2000), pp. 1597–1608.

—, *Design of robust envelope-constrained filter with orthonormal bases*, IEEE Transactions on Signal Processing, **48** (2000), pp. 2881–2891.

—, *Gradient flow approach to discrete-time envelope-constrained filter design via orthonormal filters*, IEE Proceedings — Vision, Image and Signal Processing, **147** (2000), pp. 79–88.

A. L. GARCIA, W. WAGNER, *Time step truncation error in direct simulation Monte Carlo*, Phys. Fluids, **12** (2000), pp. 2621–2633.

—, *The limiting kinetic equation of the Consistent Boltzmann Algorithm for dense gases*, J. Statist. Phys., **101** (2000), pp. 1065–1086.

S. RJASANOW, W. WAGNER, *A temperature time counter scheme for the Boltzmann equation*, SIAM J. Numer. Anal., **37** (2000), pp. 1800–1819.

H. STRUCHTRUP, W. WEISS, *Temperature jump and velocity slip in the moment method*, Contin. Mech. Thermodyn., **12** (2000), pp. 1–18.

K. WILMAŃSKI, *Note on the notion of incompressibility in theories of porous and granular materials*, Z. Angew. Math. Mech., **81** (2001), pp. 37–42 (erschienen 2000).

—, *On a homogeneous adsorption in porous materials*, Z. Angew. Math. Mech., **81** (2001), pp. 119–124 (erschienen 2000).

Beiträge in Sammelwerken

B. ALBERS, *On adsorption and diffusion in porous media*, in: Contributions to Continuum Theories. Anniversary Volume for Krzysztof Wilmański (B. Albers, Hrsg.), WIAS-Report No. 18, Berlin, 2000, pp. 1–9.

—, *Pollution transport as example for adsorption/diffusion processes in porous materials*, in: Symposium on Trends in the Application of Mathematics to Mechanics 2000 (P. E. O’Donoghue, J. N. Flavin, Hrsg.), Elsevier, Paris, Amsterdam [u. a.], 2000, pp. 27–34.

U. BANDELOW, H. GAJEWSKI, H.-CHR. KAISER, *Modeling combined effects of carrier injection, photon dynamics and heating in Strained Multi-Quantum-Well Laser*, in: „Physics and Simulation of Optoelectronic Devices VIII“ (R. H. Binder, P. Blood, M. Osinski, Hrsg.), Proceedings of SPIE, **3944**, SPIE, Bellingham, WA, 2000, pp. 301–310.

U. BANDELOW, M. RADZIUNAS, V. TRONCIU, H.-J. WÜNSCHE, F. HENNEBERGER, *Tailoring the dynamics of diode lasers by passive dispersive reflectors*, in: „Physics and Simulation of Optoelectronic Devices VIII“ (R. H. Binder, P. Blood, M. Osinski, Hrsg.), Proceedings of SPIE, **3944**, SPIE, Bellingham, WA, 2000, pp. 536–545.

E. BÄNSCH, CH. EGBERS, O. MEINCKE, N. SCURTU, *Taylor-Couette system with asymmetric boundary conditions*, in: Physics of Rotating Fluids, Selected Topics of the 11th International Couette-Taylor Workshop (C. Egbers, G. Pfister, Hrsg.), Lecture Notes in Phys., **549**, Springer, Berlin [u. a.], 2000, pp. 22–35.

J. BORCHARDT, *Parallel numerical methods for large-scale DAE systems*, in: Proceedings of AspenWorld 2000, Orlando, FL, February 6–11, 2000, Aspen Technology, Inc., 2000, pp. 1–20.

W. DREYER, *On the austenite \rightarrow ferrite phase transition in steel*, in: Contributions to Continuum Theories. Anniversary Volume for Krzysztof Wilmański (B. Albers, Hrsg.), WIAS-Report No. 18, Berlin, 2000, pp. 52–59.

W. DREYER, W. H. MÜLLER, *Phase field models and prediction of micro-morphological changes in alloys I–II*, in: ICIAM ’99. Proceedings of the Fourth International Congress on Industrial and Applied Mathematics, Edinburgh 5–9 July 1999 (J. M. Ball, J. C. R. Hunt, Hrsg.), Oxford University Press, Oxford, New York, 2000, p. 311.

—, *Quantitative modeling of diffusional coarsening in eutectic tin/lead solders*, in: Electronic Packaging Technology Conference 2000, IEEE, Piscataway, NJ, USA, pp. 117–123.

D. A. DAWSON, K. FLEISCHMANN, *Catalytic and mutually catalytic branching*, in: Infinite Dimensional Stochastic Analysis, Royal Netherlands Academy of Arts and Sciences, 2000, pp. 145–170.

K. FLEISCHMANN, C. MUELLER, *Finite time extinction of catalytic branching processes*, in: Stochastic Models (L. Gorostiza, B. G. Ivanoff, Hrsg.), Canadian Mathematical Society, Conference Proceedings, **26**, Amer. Math. Soc., Providence, 2000, pp. 125–139.

H. GAJEWSKI, K. ZACHARIAS, *On a reaction-diffusion system modelling chemotaxis*, in: EQUADIFF 99: International Conference on Differential Equations, Berlin 1999 (B. Fiedler, K. Gröger, J. Sprekels, Hrsg.), **2**, World Scientific, Singapore [u. a.], 2000, pp. 1098–1103.

O. SCHENK, K. GÄRTNER, *Scalable parallel sparse LU factorization with a dynamical supernode pivoting approach in semiconductor device simulation*, in: Proceedings of 16th IMACS World Congress 2000, Lausanne, August 21–25 (M. Deville, R. Owens, Hrsg.), Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne, 2000, pp. 1–6 (nur in elektronischer Form: <http://imacs2000.epfl.ch/Documents/Sessions/120-4.pdf>).

F. GRUND, J. BORCHARDT, K. EHRHARDT, D. HORN, *Divide and conquer strategies in large scale dynamic process simulation*, in: Chemical Engineering and Reaction Technology ..., Abstracts of the Lecture Groups/International Meeting on Chemical Engineering, Environmental Protection and Biotechnology,ACHEMA 2000, DECHEMA, Frankfurt, Main, 2000, pp. 204–206.

F. GRUND, S. RYLL, *Empirische Kapitalverflechtungsrechnungen und -analysen*, in: Politik und Ökonomie, Problemsicht aus klassischer, neo- und neuklassischer Perspektive, Metropolis-Verlag Marburg, 2000, pp. 189–209.

G. HEBERMEHL, F.-K. HÜBNER, R. SCHLUNDT, TH. TISCHLER, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, *On the simulation of microwave transmission lines with PML*, in: Proceedings of the Fifth International Conference on Mathematical and Numerical Aspects of Wave Propagation, July 10–14, 2000, Santiago de Compostela, Spain (A. Bermúdez, D. Gómez, Ch. Hazard, P. Joly, J. E. Roberts, Hrsg.), Proceedings in Applied Mathematics, **102**, SIAM, Philadelphia, 2000, pp. 906–910.

R. HENRION, *Qualitative stability of convex programs with probabilistic constraints*, in: Optimization (V. H. Nguyen, J.-J. Strodiot, P. Tossings, Hrsg.), Lecture Notes in Econom. and Math. Systems, **481**, Springer, Berlin [u. a.], 2000, pp. 164–180.

—, *Einführung in Methoden der stochastischen Optimierung*, in: Kurshandbuch zum DECHEMA-Weiterbildungskurs „Optimierung verfahrenstechnischer Prozesse“, Technische Universität Berlin, 4.–6. September 2000 (G. Wozny, Hrsg.), pp. 8–1 bis 8–49.

R. HENRION, W. RÖMISCH, *Stability of solutions to chance constrained stochastic programs*, in: Parametric Optimization and Related Topics V (J. Guddat, R. Hirabayashi, H. Th. Jongen, F. Twilt, Hrsg.), Peter Lang, Frankfurt a. M., 2000, pp. 95–114.

H.-CHR. KAISER, J. REHBERG, *About some mathematical questions concerning the embedding of Schrödinger-Poisson systems into the drift-diffusion model of semiconductor devices*, in: EQUADIFF 99: International Conference on Differential Equations, Berlin 1999 (B. Fiedler, K. Gröger, J. Sprekels, Hrsg.), **2**, World Scientific, Singapore [u. a.], 2000, pp. 1328–1333.

J. FRANCŮ, P. KREJČÍ, *Homogenization of scalar wave equation with hysteresis operator*, in: EQUADIFF 99: International Conference on Differential Equations, Berlin 1999 (B. Fiedler, K. Gröger, J. Sprekels, Hrsg.), **1**, World Scientific, Singapore [u. a.], 2000, pp. 363–368.

P. KREJČÍ, J. SPREKELS, *Phase-field systems and vector hysteresis operators*, in: Free Boundary Problems: Theory and Applications II (N. Kenmochi, Hrsg.), Gakuto Int. Series Math. Sci. & Appl., **14**, Gakkōtoshō, Tokyo, 2000, pp. 295–310.

—, *A thermodynamically consistent hysteresis model of thermovisco-elastoplasticity*, in: Contributions to Continuum Theories: Anniversary Volume for Krzysztof Wilmański (B. Albers, Hrsg.), WIAS-Report No. 18, 2000, pp. 138–145.

P. KREJČÍ, J. SPREKELS, S. ZHENG, *Existence and asymptotic behaviour in phase-field models with hysteresis*, in: Lectures on Applied Mathematics: Proceedings of the Symposium Organized by the Sonderforschungsbereich 438 on the Occasion of Karl-Heinz Hoffmann's 60th Birthday, Munich, June 30 – July 1, 1999 (H.-J. Bungartz, R. H. W. Hoppe, C. Zenger, Hrsg.), Springer, Berlin/Heidelberg, 2000, pp. 77–88.

M. KUNIK, *The scaling of time and space in micro-macro transitions*, in: Contributions to Continuum Theories. Anniversary Volume for Krzysztof Wilmański (B. Albers, Hrsg.), WIAS-Report No. 18, Berlin, 2000, pp. 146–154.

H.-G. BARTEL, J. DOLATA, H.-J. MUCHA, *Klassifikation gestempelter römischer Ziegel aus Obergermanien*, Tagung des AK „Archäometrie und Denkmalpflege“ der DMG (in Gemeinschaft mit anderen), 29.3.–1.4.2000, Dresden, in: Archäometrie und Denkmalpflege — Kurzberichte 2000 (G. Schulze, I. Horn, Hrsg.), Mensch-und-Buch-Verlag, Berlin, 2000, pp. 86–88.

H.-J. MUCHA, *Entscheidungshilfe zur Metrik- und Methodenwahl in der Clusteranalyse*, in: Hamburger Beiträge zur Modellierung und Simulation (C. Hennig, D. Pfeifer, Hrsg.), Universität Hamburg, Fachbereich Mathematik, **13** (2000), pp. 53–66.

—, *Intelligent cluster analysis*, in: Proc. International Conference on Measurement and Multivariate Analysis, May 11–14, 2000, Banff, Alberta, Canada, Vol. **1** (S. Nishisato, Hrsg.), ICMMA, Banff, Alberta, Canada, 2000, pp. 66–68.

H.-J. MUCHA, H. SOFYAN, *Cluster analysis*, in: XploRe Application Guide (W. Härdle, Z. Hlavka, S. Klinke, Hrsg.), Springer, Berlin, 2000, pp. 239–280.

J. F. BRASCHE, M. M. MALAMUD, H. NEIDHARDT, *Weyl functions and singular continuous spectra of self-adjoint extensions*, in: Canadian Mathematical Society, Conference Proceedings Amer. Math. Soc., **29**, Providence, 2000, pp. 75–84.

G. SCHWARZ, E. SCHÖLL, R. NÜRNBERG, H. GAJEWSKI, *Simulation of current filamentation in an extended drift-diffusion model*, in: EQUADIFF 99: International Conference on Differential Equations, Berlin 1999 (B. Fiedler, K. Gröger, J. Sprekels, Hrsg.), **2**, World Scientific, Singapore [u. a.], 2000, pp. 1334–1336.

P. PHILIP, *Axiomatische Mengenlehre*, in: Lexikon der Mathematik, Bd. **1**, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 2000, pp. 147–150.

I. SCHMELZER, *General ether theory*, in: Proceedings of the XXIIth International Workshop on the fundamental problems of High Energy Physics and Field Theory, Institute for High Energy Physics, 23–25 June 1999 (I. V. Filimonova, V. A. Petrov, Hrsg.), Protvino, Russia, 2000, pp. 178–185.

—, *Grid generation and geometry description with COG*, in: Proceedings of contributed papers and posters, „ALGORITMY 2000, 15th Conference on Scientific Computing“, Vysoké Tatry-Podbanské, Slovakia, Sept. 10–15, 2000, pp. 399–405.

K. R. SCHNEIDER, *Vibrational control of singularly perturbed systems*, in: Nonlinear Control in the Year 2000, Vol. 2 (A. Isidori, F. Lamnabhi-Lagarrigue, W. Respondek, Hrsg.), Lecture Notes in Control and Inform. Sci., **259**, Springer, London [u. a.], 2000, pp. 397–408.

D. TIBA, P. NEITTAANMÄKI, *Shape optimization in free boundary systems*, in: Free Boundary Problems: Theory and Applications II (N. Kenmochi, Hrsg.), Gakuto Int. Series Math. Sci. & Appl., **14**, Gakkōtoshō, Tokyo, 2000, pp. 334–343.

C. H. TSENG, K. L. TEO, A. CANTONI, *Adaptive envelope-constrained filter design*, in: Emerging technologies for the 21st century: Proceedings, May 28–31, 2000, ISCAS 2000 Geneva, the 2000 IEEE International Symposium on Circuits and Systems, Vol. **4**, Piscataway, NJ, IEEE Service Center, 2000, pp. IV85–IV88.

M. SHASHKOV, D. TURAEV, *A proof of Shilnikov’s theorem for C^1 -smooth dynamical systems*, in: Methods of qualitative theory of differential equations and related topics (L. Lerman, G. Polotovskii, L. Shilnikov, Hrsg.), AMS Transl. Series II, **200**, AMS, Providence, RI, 2000, pp. 149–163.

L. SHILNIKOV, D. TURAEV, *A new simple bifurcation of a periodic orbit of blue sky catastrophe type*, in: Methods of qualitative theory of differential equations and related topics (L. Lerman, G. Polotovskii, L. Shilnikov, Hrsg.), AMS Transl. Series II, **200**, AMS, Providence, RI, 2000, pp. 165–188.

J. AU, W. WEISS, *Shock waves in grad’s 13-moment theory revisited — A view from extended thermodynamics*, in: Contributions to Continuum Theories: Anniversary Volume for Krzysztof Wilmański (B. Albers, Hrsg.), WIAS-Report No. 18, 2000, pp. 10–24.

K. WILMAŃSKI, *Thermodynamics of multicomponent continua*, in: Earthquake Thermodynamics and Phase Transformations in the Earth’s Interior (R. Teisseyre, E. Majewski, Hrsg.), International Geophysics Series, **76**, Academic Press, San Diego, 2001, pp. 567–656 (erschienen 2000).

6.2 Preprints, Reports

6.2.1 WIAS-Preprint-Serie

Preprints 2000¹

- [545] Thomas Koprucki, Heinz-Jürgen Wagner: New exact ground states for one-dimensional quantum many-body systems.
- [546] Donald A. Dawson, Klaus Fleischmann: Catalytic and mutually catalytic super-Brownian motions.
- [547] Messoud Efendiev, Jürgen Fuhrmann, Sergei V. Zelik: The long-time behaviour of the thermoconvective flow in a porous medium.
- [548] Peter Mathé, Sergei V. Pereverzev: Optimal discretization of inverse problems in Hilbert scales. Regularization and self-regularization of projection methods.
- [549] Ilja Schmelzer: General ether theory.
- [550] Jürgen Sprekels, Dan Tiba: Sur les arches lipschitziennes.
- [551] Wolfgang Härdle, Stefan Sperlich, Vladimir Spokoiny: Structural tests in additive regression.
- [552] Olaf Klein, Peter Philip, Jürgen Sprekels, Krzysztof Wilmański: Radiation- and convection-driven transient heat transfer during sublimation growth of silicon carbide single crystals.
- [553] René Henrion, Jiří Outrata: A subdifferential criterion for calmness of multifunctions.
- [554] Thomas Dreyer, Bernd Maar, Volker Schulz: Multigrid optimization in applications.
- [555] Alexander Vladimirov: Duality principle for discrete linear inclusions.
- [556] Sergey V. Gonchenko, Vladimir S. Gonchenko: On Andronov-Hopf bifurcations of two-dimensional diffeomorphisms with homoclinic tangencies.
- [557] Mikhail Shashkov, Dmitry Turaev: A proof of a Shilnikov theorem for C^1 -smooth dynamical systems.
- [558] Jürgen Borchardt: Parallel numerical methods for large-scale DAE systems.
- [559] Dmitry Turaev: Multi-pulse homoclinic loops in systems with a smooth first integral.
- [560] Leonid Shilnikov, Dmitry Turaev: A new simple bifurcation of a periodic orbit of “blue sky catastrophe” type.
- [561] Vadim V. Strygin: Hybrid method and vibrational stability for nonlinear singularly perturbed system under parametric excitations.

¹<http://www.wias-berlin.de/publications/preprints/preprintlist.pl?2000:545:626>

- [562] Alejandro L. Garcia, Wolfgang Wagner: A new kinetic equation for dense gases.
- [563] Krzysztof Wilmański: Sound and shock waves in porous and granular materials.
- [564] János Engländer, Dmitry Turaev: A scaling limit theorem for a class of superdiffusion.
- [565] Martin Petzoldt: Regularity results for interface problems in 2D.
- [566] Pavel Krejčí, Alexander A. Vladimirov: Lipschitz continuity of polyhedral Skorokhod maps.
- [567] Rainer Hinder, Erhard Meister, Serguei A. Nazarov: Asymptotics of solutions to Joukovskii-Kutta-type problems at infinity.
- [568] Inna Edelman, Krzysztof Wilmański: Surface waves at an interface separating two saturated porous media.
- [569] Marian Hristache, Anatoli Juditsky, Jörg Polzehl, Vladimir Spokoiny: Structure adaptive approach for dimension reduction.
- [570] Markus Kraft, Wolfgang Wagner: Numerical study of a stochastic particle method for homogeneous gas phase reactions.
- [571] Leonid Shilnikov: Homoclinic orbits: Since Poincaré till today.
- [572] Valentin F. Butuzov, Nikolai N. Nefedov, Klaus R. Schneider: Singularly perturbed partly dissipative reaction-diffusion systems in case of exchange of stabilities.
- [573] Günter Albinus, Herbert Gajewski, Rolf Hünlich: Thermodynamic design of energy models of semiconductor devices.
- [574] Dietmar Hömberg, Aleksander M. Khludnev: An equilibrium problem for a thermoelectroconductive body with the Signorini condition on the boundary.
- [575] Orazgeldi Kurbanmuradov, Üllar Rannik, Karl K. Sabelfeld, Timo Vesala: Evaluation of mean concentration and fluxes in turbulent flows by Lagrangian stochastic models.
- [576] Friedrich Grund, Klaus Ehrhardt, Jürgen Borchardt, Dietmar Horn: Heterogeneous dynamic process flowsheet simulation of chemical plants.
- [577] Lev M. Lerman: Dynamical phenomena near homo- or heteroclinic connections involving saddle-foci in a Hamiltonian system.
- [578] Rolf Hünlich, Günter Albinus, Herbert Gajewski, Annegret Glitzky, Wilfried Röpke, Jürgen Knopke: Modelling and simulation of power devices for high-voltage integrated circuits.
- [579] Krzysztof Wilmański, Bettina Albers: Two notes on continuous modelling of porous media.
- [580] Jens André Griepentrog, Konrad Gröger, Hans-Christoph Kaiser, Joachim Rehberg: Interpolation for function spaces related to mixed boundary value problems.

- [581] Anca Ignat, Jürgen Sprekels, Dan Tiba: Analysis and optimization of nonsmooth mechanical structures.
- [582] Uwe Bandelow, Hans-Christoph Kaiser, Thomas Koprucki, Joachim Rehberg: Modeling and simulation of strained quantum wells in semiconductor lasers.
- [583] Danilo Mercurio, Vladimir Spokoiny: Statistical inference for time-inhomogeneous volatility models.
- [584] Oliver Reiß, Uwe Wystup: Efficient computation of option price sensitivities using homogeneity and other tricks.
- [585] Andreas Eibeck, Wolfgang Wagner: Stochastic particle approximations for Smoluchowski's coagulation equation.
- [586] Johannes Elschner, Gunther Schmidt: Conical diffraction by periodic structures: Variation of interfaces and gradient formulas.
- [587] Annegret Glitzky, Rolf Hünlich: Global properties of pair diffusion models.
- [588] Johannes Elschner, Rainer Hinder, Gunther Schmidt: Direct and inverse problems for diffractive structures – optimization of binary gratings.
- [589] Grigori N. Milstein, Michael V. Tretyakov: Numerical solution of the Neumann problem for nonlinear parabolic equations by probability approach.
- [590] Grigori N. Milstein, Michael V. Tretyakov: Unidirectional transport in stochastic ratchets.
- [591] Michael Pantelyat, Manfred Uhle: Thermo-mechanical problems in induction heating of steel.
- [592] Wolfgang Dreyer, Michael Junk, Matthias Kunik: On the approximation of kinetic equations by moment systems.
- [593] Evgeniy V. Radkevich, Krzysztof Wilmański: A Riemann problem for poroelastic materials with the balance equation for porosity. Part I.
- [594] Evgeniy V. Radkevich, Krzysztof Wilmański: A Riemann problem for poroelastic materials with the balance equation for porosity. Part II.
- [595] Anton Bovier, Irina Kurkova, Matthias Löwe: Fluctuations of the free energy in the REM and the p -spin SK models.
- [596] Grigori N. Milstein, Michael Nussbaum: Maximum likelihood estimate for nonparametric signal in white noise by optimal control.
- [597] Uwe Bandelow, Mindaugas Radziunas, Jan Sieber, Matthias Wolfrum: Impact of gain dispersion on the spatio-temporal dynamics of multisection lasers.
- [598] Adriana Bohé: Exponentially sensitive internal layer solutions of one-side and their asymptotic expansions.

- [599] Matthias Wolfrum: A sequence of order relations, encoding heteroclinic connections in scalar parabolic PDE.
- [600] Anton Bovier, Michael Eckhoff, Véronique Gayraud, Markus Klein: Metastability and small eigenvalues in Markov chains.
- [601] Anton Bovier, Michael Eckhoff, Véronique Gayraud, Markus Klein: Metastability and low lying spectra in reversible Markov chains.
- [602] Krzysztof Wilmański: Mathematical Theory of Porous Media – Lecture Notes. XXV Summer School on Mathematical Physics, Ravello, September 2000.
- [603] Olaf Klein: Existence and approximation of solutions to an anisotropic phase field system of Penrose–Fife type.
- [604] Nils Berglund, Barbara Gentz: Pathwise description of dynamic pitchfork bifurcations with additive noise.
- [605] Gottfried Bruckner, Jin Cheng, Masahiro Yamamoto: Uniqueness of determining a periodic structure from discrete far field observations.
- [606] Christof Külske: On the Gibbsian nature of the random field Kac model under block-averaging.
- [607] Wolfgang Dreyer, Michael Herrmann, Matthias Kunik: Kinetic schemes and initial boundary value problems for the Euler system.
- [608] Pavel Krejčí, Philippe Laurençot: Hysteresis filtering in the space of bounded measurable functions.
- [609] Karl Sabelfeld, Irina Shalimova: Forward and backward Lagrangian stochastic models of turbulent transport.
- [610] Jürgen Sprekels, Dan Tiba: Control variational methods for differential equations.
- [611] John Schoenmakers, Brian Coffey: Stable implied calibration of a multi-factor LIBOR model via a semi-parametric correlation structure.
- [612] Georg Hebermehl, Friedrich-Karl Hübner, Rainer Schlundt, Thorsten Tischler, Horst Zscheile, Wolfgang Heinrich: Numerical simulation for lossy microwave transmission lines including PML.
- [613] Anca Ignat, Jürgen Sprekels, Dan Tiba: A model of a general elastic curved rod.
- [614] Markus Kraft, Wolfgang Wagner: An improved stochastic algorithm for temperature-dependent homogeneous gas phase reactions.
- [615] Donald A. Dawson, Alison M. Etheridge, Klaus Fleischmann, Leonid Mytnik, Edwin A. Perkins, Jie Xiong: Mutually catalytic branching in the plane: Finite measure states.
- [616] Jens André Griepentrog: Linear elliptic boundary value problems with non-smooth data: Campanato spaces of functionals.

- [617] Joel L. Horowitz, Vladimir G. Spokoiny: An adaptive, rate-optimal test of linearity for median regression models.
- [618] Bettina Albers: Dependence of adsorption/diffusion processes in porous media on bulk and surface permeabilities.
- [619] Klaus Fleischmann, Vladimir A. Vatutin, Anton Wakolbinger: Branching systems with long living particles at the critical dimension.
- [620] Georg Hebermehl, Friedrich-Karl Hübner, Rainer Schlundt, Horst Zscheile, Wolfgang Heinrich: Iterative solution of systems of linear equations in microwave circuits using a block quasi-minimal residual algorithm.
- [621] Hans Georg Bock, Wolfgang Egartner, Wolfgang Kappis, Volker Schulz: Practical shape optimization for turbine and compressor blades.
- [622] Klaus R. Schneider, Henri Schurz: Waveform relaxation methods for stochastic differential equations.
- [623] Gennadi A. Leonov: The Brockett problem in the theory of nonstationary stabilization of linear differential equations.
- [624] Klaus R. Schneider, Emilia Fridman: Geometric approach to vibrational control of singularly perturbed systems.
- [625] Peter Junghanns, Andreas Rathsfeld: On polynomial collocation for Cauchy singular integral equations with fixed singularities.
- [626] Orazgeldi Kurbanmuradov, Steven A. Orszag, Karl K. Sabelfeld, P. K. Yeung: Analysis of relative dispersion of two particles by Lagrangian stochastic models and DNS methods.

6.2.2 WIAS-Report-Serie

Reports 2000²

- [18] (Collected by) Bettina Albers: Contributions to Continuum Theories, Anniversary Volume for Krzysztof Wilmański.
- [19] Annegret Glitzky, Rolf Hünlich: Electro-reaction-diffusion systems in heterostructures.

²<http://www.wias-berlin.de/publications/reports/reportlist.pl?2000:18:19:Report>

6.2.3 Preprints/Reports an anderen Einrichtungen

S. BOSCHERT, A. SCHMIDT, K. G. SIEBERT, E. BÄNSCH, K.-W. BENZ, G. DZIUK, T. KAISER, *Simulation of industrial crystal growth by the vertical Bridgman method*, Preprint No. 00–11, Universität Bremen, 2000.

M. WOLFF, E. BÄNSCH, M. BÖHM, D. DAVIS, *Modellierung der Abkühlung von Stahlbrammen*, Preprint No. 00–07, Universität Bremen, 2000.

M. BALABANE, A. BOVIER, J.-L. RICHARD, *Approche statistique des évaluations des accidents APRP*, Rapport Science & Tec, Paris, Frankreich, 2000.

M. A. EFENDIEV, W. L. WENDLAND, *On boundary-layer type solutions of nonlinear Riemann-Hilbert problems and related geometric structures*, Preprint No. 36 (1999/2000), Institut Mittag-Leffler, Djursholm/Sweden, 2000.

—, *Nonlinear Riemann-Hilbert problems for doubly connected domains and closed boundary data*, Preprint No. 2000/06, SFB 404, Universität Stuttgart, 2000.

M. A. EFENDIEV, S. ZELIK, *Attractors of the reaction-diffusion systems with rapidly oscillating coefficients and their homogenization*, Preprint No. 26/00, DFG-Schwerpunktprogramm: „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“, 2000.

W. MERZ, A. GLITZKY, *Single dopant diffusion in semiconductor technology*, Preprint SFB–438–0011, 2000.

R. HENRION, *A note on the connectedness of chance constraints*, Preprint No. 21, Stochastic Programming Eprint Series (SPEPS), 2000.

—, *Structure and stability of probabilistic storage level constraints*, Preprint No. 23, Stochastic Programming Eprint Series (SPEPS), 2000.

R. HENRION, A. MÖLLER, *Optimization of a continuous distillation process under random inflow rate*, Preprint No. 00-4, DFG-Schwerpunktprogramm „Echtzeit-Optimierung großer Systeme“, Berlin, 2000.

R. HINDER, E. MEISTER, S. NAZAROV, *Asymptotics of solutions to Joukovskii-Kutta-type problems at infinity*, Preprint No. 2079, Technische Universität Darmstadt, 2000.

P. MATHÉ, B. SCHMIDT, *Interpolation of Gauss-Markov processes*, Preprint No. A/20, Freie Universität Berlin, 2000.

H.-J. MUCHA, H. SOFYAN, *Cluster analysis*, Discussion Paper No. 49, SFB 373, Humboldt-Universität zu Berlin, 2000.

J. F. BRASCHE, M. M. MALAMUD, H. NEIDHARDT, *Weyl function and spectral properties of self-adjoint extensions*, Preprint No. 472, SFB 288, Technische Universität Berlin, 2000.

V. CACHIA, H. NEIDHARDT, V. A. ZAGREBNOV, *Accretive perturbations and error estimates for the Trotter product formula*, Preprint CPT-2000/P.3961, Centre Physique Théorique, Marseille, Frankreich, 2000.

P. JUNGHANNS, A. RATHSFELD, *A polynomial collocation method for Cauchy singular integral equations over the interval*, Preprint No. 2000-12, Fakultät für Math., Technische Universität Chemnitz, 2000.

A. RATHSFELD, R. SCHNEIDER, *On a quadrature algorithm for the piecewise linear wavelet collocation applied to boundary integral equations*, Preprint No. 00-15, SFB 393, Technische Universität Chemnitz, 2000.

S. HANDROCK-MEYER, L. V. KALACHEV, K. R. SCHNEIDER, *A method to determine the dimension of long-time dynamics in multi-scale systems*, Preprint No. 2000-7, Technische Universität Chemnitz, Fakultät für Mathematik, 2000.

K. R. SCHNEIDER, H. SCHURZ, *Waveform relaxation methods for stochastic differential equations*, Preprint No. 1733, IMA Preprint Series, Minneapolis, USA, 2000.

R. H. W. HOPPE, S. I. PETROVA, V. SCHULZ, *A primal-dual Newton-type interior-point method for topology optimization*, Report No. 424, Universität Augsburg, 2000.

6.3 Mitherausgabe von Zeitschriften

A. BOVIER, Editorial Board, *Markov Processes and Related Fields*, Polymat, Moskau.

H. GAJEWSKI, Advisory Board, *Mathematische Nachrichten*, Wiley-VCH Verlag GmbH, Berlin.

—, Editorial Board, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Wiley-VCH Verlag GmbH, Berlin.

—, Herausgeber, *Teubner-Texte zur Mathematik*, B. G. Teubner Verlagsgesellschaft mbH, Leipzig.

R. HENRION, Editorial Board, *Journal of Chemometrics*, Wiley, New York.

P. KREJČÍ, Editorial Board, *Applications of Mathematics*, Akademie der Wissenschaften, Prag, Tschechische Republik.

P. MATHÉ, Editorial Board, *Monte Carlo Methods and Applications*, VSP, Zeist.

K. K. SABELFELD, Editor, *Monte Carlo Methods and Applications*, VSP, Zeist.

—, Editorial Board, *Mathematics and Computers in Simulation*, Verlag Elsevier/North Holland, Niederlande.

J. SPREKELS, Editorial Board, *Advances in Mathematical Sciences and Applications*, Gakkōtoshō, Tokio, Japan.

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

6.4 Vorträge und Gastaufenthalte von Mitarbeitern

B. ALBERS, *Geophysikalische Prozesse — auf verschiedenen Ebenen kontinuumsthermodynamisch betrachtet*, Museum für Naturkunde der Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Mineralogie, 9. Mai.

—, *Pollution transport as example for adsorption/diffusion processes in porous materials*, Symposium on Trends in Applications of Mathematics to Mechanics 2000, Galway, Irland, 10. Juli.

—, *Adsorption/diffusion processes in porous materials*, 33rd Solid Mechanics Conference, Zakopane, Polen, 8. September.

—, *Adsorption and diffusion in porous materials*, XXV Scuola Estiva Di Fisica Matematica, Ravello, Italien, 14. September.

—, *An example for adsorption/diffusion processes in porous materials*, Symposium on Mathematical Models in Soil Mechanics, Scilla (Reggio di Calabria), Italien, 11. September.

G. ALBINUS, *Energiemodelle mit allgemeinen Dispersionsrelationen*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 19. Januar.

U. BANDELOW, *Modeling combined effects of carrier injection, photon dynamics and heating in Strained Multi-Quantum Well Lasers*, Photonics West (SPIE), San Jose, Kalifornien, USA, 26. Januar.

—, *Tailoring the dynamics of diode lasers by dispersive reflectors*, Photonics West (SPIE), San Jose, Kalifornien, USA, 27. Januar.

—, *Zur Kompetenz des WIAS im TOB*, Terabit-Optics-Berlin Meeting, Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin GmbH, Berlin, 16. Februar.

—, *Modellierung und Simulation von Halbleiterlasern*, WIAS-Kolloquium, Berlin, 21. Februar.

—, *Modellierung von 1,55 μm MQW-Kantenemittern (I)*, gemeinsames Seminar zu photonischen Kristallen des Heinrich-Hertz-Instituts für Nachrichtentechnik Berlin GmbH und des Paul-Drude-Instituts für Festkörperelektronik, Berlin, 2. März.

—, *Modellierung von 1,55 μm MQW-Kantenemittern (II)*, gemeinsames Seminar zu photonischen Kristallen des Heinrich-Hertz-Instituts für Nachrichtentechnik Berlin GmbH und des Paul-Drude-Instituts für Festkörperelektronik, Berlin, 7. März.

—, *Modeling of active optoelectronic components*, Optics Division, Intel, Santa Clara, Kalifornien, USA, 25. März.

—, *Calculation of electronic states in quantum structures*, European Semiconductor Laser Workshop, Berlin, 1. September.

—, *Einbeziehung von Quantisierungseffekten in WIAS-TeSCA*, Seminar „Halbleiterlaser“, WIAS, 16. November.

E. BÄNSCH, *A phase transition problem related to steel production*, Symposium „Trends in Nonlinear Analysis“, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 10. Oktober.

N. BERGLUND, *The slow passage through a bifurcation with double zero eigenvalue*, WIAS-Workshop „Singular gestörte Systeme“, Berlin, 13. April.

—, *Effect of noise and open-loop control on dynamic bifurcations*, Workshop „Nonlinear Control in the Year 2000“, CNRS Paris, Frankreich, 5. Juni.

—, *The effect of additive noise on dynamic pitchfork bifurcations*, Universität Augsburg, 4. September.

J. BORCHARDT, *Parallel numerical methods for large-scale DAE systems*, AspenWorld 2000 Conference „Optimizing the Manufacturing Enterprise“, Orlando, USA, 8. Februar.

A. BOVIER, *Systèmes désordonnés, fonctions aléatoires, mesures de Gibbs*, Colloque de probabilités et de statistique, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Schweiz, 25. Januar.

—, *Fluctuations and extremes in disordered systems*, 5th World Congress of the Bernoulli Society and 23rd Annual meeting of the IMS, Guanajuato, Mexiko, 17. Mai.

—, *Aging in the random energy model*, Tagung „Self interacting random processes“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 26. Mai.

—, *Aging in the random energy model*, Physikalisches Institut, Technische Universität Chemnitz, 21. Juni.

—, *Stochastische Dynamik komplexer und ungeordneter Systeme*, Symposium des SFB 555, Berlin, 30. Juni.

—, *Metastability and low-lying spectra in mean field dynamics*, STATMECH2000, The Satellite Meeting of the IAMP Congress on Mathematical Physics, Cambridge, Großbritannien, 8. August.

—, *Aging in the random energy model*, Jahrestagung der DMV, Dresden, 20. September.

D. DAVIS, *Calculation of rotationally symmetric flows in liquid*, ALGORITMY 2000, Conference on Scientific Computing, Podbanské, Slowakei, 14. September.

W. DREYER, *Morphologieänderungen in Sn-Pb-Loten*, Thermodynamisches Seminar, WIAS, Berlin, 19. April.

—, *Singuläre Flächen versus Phasenfildtheorie*, Thermodynamisches Seminar, Technische Universität Berlin, 26. April.

—, *Phase field models versus singular surfaces*, Technical University of Delft, Niederlande, 25. Mai.

—, *Multiscale modeling of thermomechanical bodies*, DFG-Kolloquium „Multiscale Problems“, Stuttgart, 6. Juni.

—, *On singular limit problems of phase field models*, Mathematisches Kolloquium, Universität Pavia, Italien, 6. September.

—, *Phase field models versus singular surface models for the description of moving interface boundaries*, Numerical Methods for Free Boundary Problems (Interphase 2000), Freie Universität Berlin, 5. Oktober.

—, *Cooling by phase transition*, Motorola Advanced Interconnect Systems Laboratory, München, 16. November.

—, *Über die Bewegung von Phasengrenzen*, Workshop „Composite-Forschung in der Mechanik“, Paderborn, 5. Dezember.

—, *Kühlung durch Phasenübergang*, Thermodynamisches Seminar, WIAS, Berlin, 13. Dezember.

—, *Multiscale modeling of thermomechanical bodies*, Tagung „Thermodynamische Materialtheorien“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 19. Dezember.

K. EHRHARDT, *Distributed dynamic process simulation*, GAMM-Jahrestagung 2000, Göttingen, 6. April.

A. EIBECK, *Coagulation and stochastic particle systems*, Stochastik-Kolloquium, Johann Wolfgang von Goethe-Universität Frankfurt, 17. Februar.

J. ELSCHNER, *Zur Analysis und Numerik der Diffraktion an optischen Gittern*, Universität Göttingen, 16. Mai.

—, *Conical diffraction by periodic structures: Variation of interfaces and gradient formulas*, Conference „Boundary Integral Methods: Theory and Applications“, University of Bath, Großbritannien, 16. September.

K. FLEISCHMANN, *Catalytic, mutually catalytic, and cyclically catalytic branching*, Winter-
schule des Graduiertenkollegs „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Groß-
Dölln, 8. März.

—, *Catalytic, mutually catalytic, and cyclically catalytic branching*, Tagung „Mathematische
Stochastik“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 14. März.

—, *Katalytische und gegenseitig katalysierende Verzweigungsprozesse*, WIAS-Kolloquium,
Berlin, 20. März.

—, *Catalytic, mutually catalytic, and cyclically catalytic branching*, Centre de Recherche
Mathématique, Université de Montréal, Kanada, 19. April.

—, *Catalytic, mutually catalytic, and cyclically catalytic branching*, Baltic Meeting II, Kiel,
29. April.

J. FUHRMANN, *Finite volume methods for systems of viscous nonlinear conservation laws with
applications to porous media flow*, Tagung „Poröse Medien“, Oberwolfach, 28. Januar.

—, *Finite volume methods for systems of viscous conservation laws: Numerical analysis and
software*, Sixth Copper Mountain 2000 Conference on Iterative Methods, Copper Mountain,
Colorado, USA, 3. April.

—, *Pdelib/sysconlaw: ein Löser für Systeme viskoser Erhaltungsgleichungen*, WIAS-Kolloquium, Berlin, 19. Juni.

—, *Finite volume methods for coupled transport phenomena in porous media*, ALGORITMY 2000, Conference on Scientific Computing Podbanské, Slowakei, 14. September.

H. GAJEWSKI, *On an energy transport model for semiconductor devices*, TMR Workshop „Advances in Mathematical Semiconductor Modeling“, Pavia, Italien, 22. September.

—, *On an energy transport model for semiconductor devices*, 11th Conference of the European Consortium for Mathematics for Industry (ECMI 2000), Palermo, Italien, 27. September.

K. GÄRTNER, *Über Neutronentransporttheorie*, Thermodynamisches Seminar, Technische Universität Berlin, 19. Januar.

—, *Scalable parallel sparse LU factorization with a dynamical supernode pivoting approach in semiconductor device simulation*, 16th IMACS World Congress 2000, Lausanne, Schweiz, 22. August.

—, *Numerische Simulation von Direkt-Methanol-Brennstoffzellen (DMFC)*, Forschungszentrum Jülich, 22. November.

B. GENTZ, *The effect of additive noise on a dynamic pitchfork bifurcation*, STATMECH2000, The Satellite Meeting of the IAMP Congress on Mathematical Physics, Cambridge, Großbritannien, 10. August.

—, *Dynamic pitchfork bifurcations with additive noise*, Jahrestagung der DMV, Dresden, 19. September.

—, *Dynamic pitchfork bifurcations with additive noise*, Interdisciplinary Seminar: Irreversible Processes and Selforganization, Institut für Physik, Humboldt-Universität zu Berlin, 31. Oktober.

—, *Pathwise description of dynamic pitchfork bifurcations with additive noise*, Fachbereich Mathematik, Technische Universität Berlin, 9. November.

A. GLITZKY, *Global properties of pair diffusion models*, Seminar „Oxidations- und Dotierungsprobleme in der Halbleitertechnologie“, Hirscheegg/Kleinwalsertal, 7. März.

—, *On energy estimates for electro-reaction-diffusion systems involving fast reactions*, Konferenz „Trends in Nonlinear Analysis — Theory, Modelling and Computation“, Heidelberg, 9. Oktober.

K. GRÖGER, *Gemischte Randwertprobleme und Kapazitäten*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 28. Juni.

F. GRUND, *Chemische Prozess-Simulation auf Parallelrechnern*, Mathematisches Kolloquium, Brandenburgische Technische Universität Cottbus, 9. Mai.

—, *Divide and conquer strategies in large scale dynamic process simulation*,ACHEMA 2000, Frankfurt am Main, 24. Mai.

—, *Numerical simulation of chemical plants*, SIAM-Konferenz „Computational Science and Engineering“, Washington, DC, USA, 21. September.

G. HEBERMEHL, *On the simulation of microwave transmission lines with PML*, Konferenz WAVES'2000, Santiago de Compostela, Spanien, 11. Juli.

—, *Numerical simulation of lossy microwave transmission lines including PML*, Scientific Computing in Electrical Engineering (SCEE 2000), Warnemünde, 23. August.

—, *Simulation of lossy microwave circuits including PML*, SIAM-Konferenz „Computational Science and Engineering“, Washington, DC, USA, 22. September.

R. HENRION, *Solution stability in optimization problems with uncertain constraints*, 10. Workshop der GOR-Arbeitsgruppe „Entscheidungstheorie und -praxis“, Seeheim, 17. März.

—, *Optimization problems with random inequalities*, WIAS-Workshop „Fast solution of discretized optimization problems“, Berlin, 11. Mai.

—, *Stability, structure and applications of chance constraints*, Seminar „Stochastic Programming and Stochastic Approximation“, Karls-Universität Prag, Tschechische Republik, 18. Mai.

—, *Optimierungsprobleme mit stochastischen Parametern in den Restriktionen*, Technische Universität Berlin, 26. Mai.

—, *Probabilistic feed tank constraints in continuous distillation: Numerics, structure and stability*, 4th GAMM/IFIP Workshop „Stochastic Optimization“, Bundeswehrhochschule München, 27. Juni.

—, *A subdifferential criterion for calmness of multifunctions*, Third World Congress of Nonlinear Analysts (WCNA 2000), Catania, Italien, 20. Juli.

—, *All-data stability of convex programs with probabilistic constraints*, 17th International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2000), Atlanta, USA, 10. August.

—, *Einführung in Methoden der Stochastischen Optimierung*, DECHEMA-Weiterbildungskurs „Optimierung verfahrenstechnischer Prozesse“, Technische Universität Berlin, 6. September.

—, *Subdifferenzielle Bedingungen für die „calmness“ von Restriktionsabbildungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 15. November.

—, *Zur Stabilität und Struktur stochastischer Optimierungsprobleme mit Wahrscheinlichkeitsrestriktionen*, Universität Halle, 30. November.

R. HENRION (Koautor: A. Möller), *Berücksichtigung unsicherer Zuflussraten bei kontinuierlicher Destillation*, DFG-Workshop „Optimierungsprobleme bei unsicheren Daten“, WIAS Berlin, 28. Januar.

—, *Optimierung eines Destillationsprozesses unter Wahrscheinlichkeitsrestriktionen*, 10. Workshop der GOR-Arbeitsgruppe „Entscheidungstheorie und -praxis“, Seeheim, 17. März.

M. HERRMANN, *Kinetic solutions of the Boltzmann-Peiersl equation*, Tagung „Thermodynamische Materialtheorien“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 21. Dezember.

R. HINDER, *Diffraction optics — Analysis and numerics*, DFG-Abschlussworkshop „New results on dynamic problems in continuum physics“, Darmstadt, 18. April.

D. HÖMBERG, *Optimal shape design of inductor coils*, Seminar „Optimale Steuerung komplexer dynamischer Strukturen“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 7. Juni.

—, *New developments in the simulation of surface heat treatments*, Conference on Finite Element Methods for Three-dimensional Problems (FEM3D), Jyväskylä, Finnland, 29. Juni.

—, *Berechnung optimaler Parameter für die Laseroberflächenbehandlung von kompliziert geformten Bauteilen*, 47. Sitzung des Fachausschusses Randschichthärten und Kurzzeitaustenitierung, Wiesbaden, 4. Oktober.

—, *Optimal design of tubes for surface hardening*, VIIIth Workshop on Numerical Methods for Free Boundary Problems (Interphase 2000), Freie Universität Berlin, 7. Oktober.

—, *Optimales Design von Induktoren*, Karl-Franzens-Universität Graz, Österreich, 13. Dezember.

S. JASCHKE, *Coherent risk measures and good deal bounds*, Seminarvortrag, Eurandom, Eindhoven, Niederlande, 7. Februar.

—, *Coherent risk measures and good deal bounds*, 7th Annual Global Finance Conference, Chicago, USA, 20. April.

—, *Coherent risk measures and good deal bounds*, 1st World Congress of the Bachelier Finance Society, Paris, Frankreich, 30. Juni.

—, *Risk measurement in financial institutions*, Dynstoch Meeting (European network), Padua, Italien, 20. September.

—, *Coherent risk measures and good deal bounds*, 7th Annual Meeting of the German Finance Association and Conference on Intertemporal Finance, Konstanz, 7. Oktober.

—, *Risk measurement in financial institutions*, Workshop „Mathematical Finance for Young Researchers“, Berlin, 1. Dezember.

H.-CHR. KAISER, *Three dimensional semiconductor device simulation — algorithms and software design*, ALGORITMY 2000, Conference on Scientific Computing, Podbanské, Slowakei, 11. September.

TH. KOPRUCKI, *Efficient simulation of electronic states in semiconductor quantum wells*, 16. GAMM-Tagung „Numerical techniques for Schrödinger equations“, Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig, 4. Februar.

—, *Modeling and simulation of electronic states in quantum wells*, 12th III-V Semiconductor Device Simulation Workshop, Universität Duisburg, 11. Oktober.

P. KREJČÍ, *Hysteresis operators and homogenization of elastoplastic oscillations*, Oberseminar „Nichtlineare Dynamik“, Freie Universität Berlin, 25. Januar.

—, *Well-posedness of polyhedral Skorokhod problems with oblique reflections*, Colloquium on evolution equations, Prag, Tschechische Republik, 10. März.

—, *Problems of discretization and homogenization in mathematical models for elastoplastic wave propagation*, Technische Universität Dresden, 20. April.

—, *Memory with aftereffect and fatigue (of materials)*, Mathematisches Institut, Tschechische Akademie der Wissenschaften, Prag, 9. Juni.

—, *A Preisach model with aftereffect*, International Workshop on Hysteresis, Metastability and Aftereffect (HMA-2000), Chicago, USA, 29. August.

—, *The Skorokhod problem: Hysteresis operators in queuing theory*, University of Wisconsin-Milwaukee, Milwaukee, USA, 1. September.

—, *Constitutive laws of plasticity, queuing theory, and hysteresis operators*, Seminar zur Kontinuumsmechanik, Karls-Universität Prag, Tschechische Republik, 23. Oktober.

—, *Hysteresis operators and rate-independent memory*, Bexbach Colloquium on Science, Bexbach, 29. Oktober.

—, *Long time behaviour of solutions to a hysteresis model of phase transitions*, Workshop Prag – Heidelberg, Heidelberg, 2. Dezember.

C. KÜLSKE, *(Non-) Gibbsianness and joint measures of quenched lattice spin models*, Universität Hamburg, Hamburger Stochastik-Tage 2000, 22. März.

—, *(Non-) Gibbsianness and joint measures of quenched lattice spin models*, STAT-MECH2000, The Satellite Meeting of the IAMP Congress on Mathematical Physics, Cambridge, Großbritannien, 10. August.

—, *Gibbsmaße ungeordneter Systeme und Entwicklungsmethoden*, Workshop „Ungeordnete Systeme“, Universität Bochum, 4. Oktober.

M. KUNIK, *Ersetzung von kinetischen Gleichungen durch Momentensysteme*, Thermodynamisches Seminar, WIAS, Berlin, 7. Juni.

—, *Momentensysteme der Fokker-Planck-Gleichung*, Universität Stuttgart, 29. Juni.

—, *Moment systems of the Fokker-Planck equation*, Workshop „Analysis und Numerik von hyperbolischen Erhaltungsgleichungen“, Hirschegg/Kleinwalsertal, 16. September.

P. MATHÉ, *Information complexity of ill-posed problems in Hilbert scales*, SIAM-AMS Summer School, Mt. Holyoke, USA, 18. Juli.

G. MILSTEIN, *The simplest random walk for a general Dirichlet problem*, Seminar „Stochastic Analysis“, Wayne State University, Detroit, USA, 23. Oktober.

—, *Regular oscillations in systems with stochastic resonance*, Seminar „Stochastic Dynamics“, Humboldt-Universität zu Berlin, 5. Dezember.

A. MÖLLER, *Optimization of continuous distillation with stochastic inflow*, Symposium on Operations Research, Dresden, 10. September.

H.-J. MUCHA, *Data Mining mit Methoden der automatischen Klassifikation*, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), Neustrelitz, 27. Januar.

—, *Validierung von Clusteranalysen*, Jahrestagung der Gesellschaft für Klassifikation (GfKI), Passau, 16. März.

—, *Intelligent cluster analysis*, International Conference on Measurement and Multivariate Analysis (ICMMA), Banff, Kanada, 12. Mai.

—, *Exploring Roman brick and tile by intelligent cluster analysis*, 7th Conference of the International Federation of Classification Societies (IFCS-2000), Namur, Belgien, 12. Juli.

—, *ScoreCutter — eine neue Clusteranalyse-Technik*, Herbsttagung der Arbeitsgruppe Datenanalyse und Numerische Klassifikation (DANK), Aachen, 16. September.

H. NEIDHARDT, *Über die Kopplung von van Roosbroeck- und Schrödinger-Poisson-Systemen*, Universität Potsdam, 4. Januar.

—, *On open Schrödinger-Poisson systems*, TMR Workshop „Advances in Mathematical Semiconductor Modeling“, Pavia, Italien, 22. September.

—, *On non-selfadjoint Schrödinger-Poisson systems*, Centre Physique Théorique, Marseille, Frankreich, 17. November.

M. PETZOLDT, *A posteriori error estimators for elliptic equations with discontinuous diffusion coefficients*, GAMM-Workshop „Adaptive methods and error estimators“, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, 21. Januar.

—, *Regularität und Fehlerschätzer für elliptische Gleichungen mit unstetigen Diffusionskoeffizienten*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 26. Januar.

—, *Singularitäten bei Interfaceproblemen und ihre Behandlung mit a posteriori-Fehlerschätzern*, Fakultät für Mathematik, Technische Universität Chemnitz, 28. April.

—, *Singularitäten und ihre Behandlung mit a posteriori-Fehlerschätzern*, Technische Universität Kaiserslautern, 23. Mai.

—, *Singularities of interface problems and their treatment with a posteriori error estimators*, Conference on Finite Element Methods for Three-dimensional Problems (FEM3D), Jyväskylä, Finnland, 28. Juni.

—, *Singularities in interface problems and their treatment with a posteriori error estimators*, ALGORITMY 2000, Conference on Scientific Computing, Podbanské, Slowakei, 14. September.

—, *Regularität von Interfaceproblemen*, Universität Stuttgart, 17. Oktober.

P. PHILIP, *Transient numerical simulation of sublimation growth of SiC single crystals*, Workshop „Phase Transitions and Interfaces in Evolution Equations: Analysis, Control and Approximation“, Santa Margherita Ligure, Italien, 9. Februar.

—, *Zeitabhängige Modellierung der Sublimationszüchtung von SiC-Einkristallen*, WIAS-Kolloquium, Berlin, 17. April.

—, *Transient numerical simulation of sublimation growth of SiC single crystals*, Seminar „Optimale Steuerung komplexer dynamischer Strukturen“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 5. Juni.

—, *Nonlinear heat transport including diffusion and convection: Discrete existence and uniqueness for a finite volume scheme*, Universität Pavia, Italien, 6. September.

J. POLZEHL, *Adaptive weights smoothing and applications in imaging*, Universität Hamburg, Hamburger Stochastik-Tage 2000, 23. März.

—, *Spatially adaptive procedures for signal detection in fMRI*, Tagung „Controlling Complexity for Strong Stochastic Dependencies“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 11. September.

—, *Statistical issues in functional Magnet Resonance Imaging*, Seminar Paris-Berlin, Garchy, Frankreich, 25. September.

—, *Adaptive weights smoothing with applications to image denoising and signal detection*, Seminarvortrag, Institut de Statistique, Université Catholique de Louvain-la-Neuve, Belgien, 29. September.

—, *Adaptive weights smoothing with applications in imaging*, Seminarvortrag, Fachbereich Mathematik, Universität Essen, SFB 475, 6. November.

—, *Functional and dynamic Magnet Resonance Imaging using adaptive weights smoothing*, Workshop „Mathematical Methods in Brain Mapping“, Centre de Recherches Mathématiques, Université de Montréal, Kanada, 11. Dezember.

—, *Adaptive weights smoothing: What next?*, Bereich Stochastik, Humboldt-Universität zu Berlin, 19. Dezember.

M. RADZIUNAS, *Mode beating type of self-pulsations in multisection DFB lasers*, Seminar „Halbleiterlaser“, Humboldt-Universität zu Berlin, 25. Mai.

—, *Mechanism of mode beating type of self-pulsations*, Seminar „Halbleiterlaser“, Humboldt-Universität zu Berlin, 15. Juni.

—, *Modeling of multisection semiconductor lasers*, Third International Conference „Finite difference schemes“, Palanga, Litauen, 3. September.

—, *Modelling of multisection semiconductor lasers*, International Colloquium „Applications of Mathematics“, Hamburg, 29. September.

—, *Self-pulsations in DFB lasers with one active section: Two mode approach. Part 1*, Seminar „Halbleiterlaser“, WIAS, 9. November.

—, *Self-pulsations in DFB lasers with one active section: Two mode approach. Part 2*, Seminar „Halbleiterlaser“, WIAS, 23. November.

A. RATHSFELD, *Quadrature algorithms for fast wavelet methods in BEM*, Tagung „Sparse Approximation of Non-Local Operators“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 28. März.

—, *Waveletalgorithmen für Integralgleichungen, Quadratur und ein Beispiel aus der Geodäsie*, Mathematisches Colloquium, Technische Universität Chemnitz, 27. April.

—, *Quadrature methods for wavelet boundary element methods*, Conference „Boundary Integral Methods: Theory and Applications“, University of Bath, Großbritannien, 13. September.

—, *Mellin operators I–III*, Workshop „Integral Equations and Numerical Quadrature“, Potenza, Italien, 17., 18. und 20. September.

—, *Quadrature methods for wavelet boundary element methods*, Conference „Functional Analysis and Approximation Theory“, Maratea, Italien, 22. September.

—, *Quadraturformelalgorithmen für Waveletversionen von Randelementmethoden*, Institut für Biomathematik und Biometrie, GSF, Neuherberg, 13. Dezember.

—, *Einführung in die Theorie der Wavelets*, Carl Zeiss, Oberkochen, 15. Dezember.

J. REHBERG, *Interpolation durch Würfel-Drehen*, Seminar „Funktionalanalytische Methoden“ (Langenbach-Seminar), WIAS, Berlin, 5. Januar.

—, *Results on differential operators including mixed boundary conditions*, Universität Potsdam, 26. Januar.

—, *On a class of non-selfadjoint Schrödinger operators with boundary conditions induced by a macroscopic potential flow*, GAMM-Jahrestagung 2000, Göttingen, 8. April.

—, *Results on the Kohn-Sham system*, Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig, 11. April.

—, *Estimates for differential operators including general boundary conditions*, Konferenz „Partial Differential Equations“, Technische Universität Clausthal, 25. Juli.

—, *Coupling between the drift diffusion model and Kohn-Sham systems*, TMR Workshop „Advances in Mathematical Semiconductor Modeling“, Pavia, Italien, 22. September.

W. RÖPKE, *Randbedingungen bei Paardiffusionsmodellen*, Seminar „Oxidations- und Dotierungsprobleme in der Halbleitertechnologie“, Hirschegg/Kleinwalsertal, 8. März.

K. K. SABELFELD, *Forward and backward stochastic Lagrangian models in turbulent transport and mathematical finance related through the well-mixed condition*, International Conference on Monte Carlo and probabilistic methods for partial differential equations, Monte Carlo, Monaco, 3. Juli.

—, *Stochastic Lagrangian models for the coagulation-fragmentation process with diffusion*, International Conference on Monte Carlo and probabilistic methods for partial differential equations, Monte Carlo, Monaco, 5. Juli.

—, *Lagrangian stochastic models for turbulent dispersion in the atmospheric boundary layer*, WIAS-Workshop „Stochastic models for turbulent transport processes“, Berlin, 24. Oktober.

J. SCHEFTER, *Diskretisierung der Maxwell'schen Gleichungen auf Tetraedergittern*, Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik, Berlin, 13. März.

I. SCHMELZER, *3D-Geometriebeschreibung und Gittergenerierung mit COG*, Technische Universität München, 22. Mai.

—, *Grid generation and geometry description with COG*, ALGORITMY 2000, Conference on Scientific Computing, Podbanské, Slowakei, 15. September.

G. SCHMIDT, *On some applications of Gaussian functions in numerical methods*, Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig, 3. Februar.

—, *On the optimal design of diffractive gratings*, Michigan State University, East Lansing, USA, 28. April.

—, *Cubature of integral operators*, Michigan State University, East Lansing, USA, 3. Mai.

K. R. SCHNEIDER, *Exchange of stabilities in singularly perturbed systems*, Université de Paris-Sud, Frankreich, 6. Januar.

—, *Exchange of stabilities in partial differential equations*, Technische Universität Dresden, 1. Februar.

—, *Exchange of stabilities in singularly perturbed systems of ordinary differential equations*, Ben Gurion University, Beer Sheva, Israel, 10. Februar.

—, *Stabilitätswechsel in singular gestörten Systemen*, WIAS-Kolloquium, Berlin, 3. April.

—, *Exchange of stabilities in singularly perturbed systems*, University of Minnesota, Minneapolis, USA, 27. April

—, *Recent developments in the theory in singularly perturbed systems*, University of Montana, Missoula, USA, 4. Mai.

—, *Exchange of stabilities in elliptic problems*, University of Montana, Missoula, USA, 5. Mai.

—, *Vibrational control of singularly perturbed systems*, Workshop „Nonlinear Control in the Year 2000“, CNRS Paris, Frankreich, 5. Juni.

—, *Forced canards in ODEs and PDEs*, International Congress „Qualitative Theory of Differential Equations“, Certosa di Pontignano, Italien, 19. September.

—, *Excitability of lasers*, International Colloquium „Applications of Mathematics“, Hamburg, 29. September.

—, *Erregbarkeit von DFB-Lasern*, GAMM-Fachausschuss-Sitzung, Technische Universität Dresden, 6. Oktober.

J. SCHOENMAKERS, *HJM term structure dynamics from a multi asset market; finite factor models*, Universität Hamburg, Hamburger Stochastik-Tage 2000, 21. März.

—, *HJM term structure dynamics from a multi asset market; finite factor models*, WIAS-Kolloquium, Berlin, 15. Mai.

—, *Log-normal approximation and robust calibration of a multi-factor LIBOR market model*, Statistik-Seminar, Universität Heidelberg, 1. Juni.

—, *Relative pricing of complex structured products in a multi-factor LIBOR model*, Jahrestagung der DMV, Dresden, 21. September.

—, *Stable implied calibration of multi-factor LIBOR models by semi-parametric correlation structure*, Risk Conference Mathweek 2000, New York, USA, 15. November.

—, *Stable calibration of multi-factor LIBOR market models via a semi-parametric correlation structure*, „ICBI 2000 Conference“, Genf, Schweiz, 7. Dezember.

V. SCHULZ, *Inverse Modellierung bei Grundwasserströmungen*, Universität Braunschweig, 2. Februar.

—, *Partiell reduzierte SQP-Methoden für strukturierte Optimierungsprobleme*, Universität Augsburg, 16. März.

—, *Multigrid methods for optimal control problems*, Tagung „Optimale Steuerung komplexer dynamischer Systeme“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 9. Juni.

—, *Multigrid methods for optimization and inverse problems*, SFB Conference on Inverse Problems, Strobl, Österreich, 27. Juni.

—, *Multigrid methods for optimization problems*, Institute for Computational and Applied Mathematics, Virginia Tech, Blacksburg, USA, 19. September.

—, *Shape optimization for turbine and compressor blades*, 1st SIAM Conference on Computational Science & Engineering, Washington, DC, USA, 22. September.

—, *Multigrid methods for saddle point problems*, Universität Trier, 17. November.

—, *Multigrid methods for optimization problems*, Humboldt-Universität zu Berlin, 7. Dezember.

J. SIEBER, *Dynamik von Gleichungen für Halbleiterlaser*, Forschungsseminar „Algebroid-Differentialgleichungen“, Humboldt-Universität zu Berlin, 19. Januar.

—, *Dynamics of multi-section-DFB-lasers*, University College Cork, Irland, 18. Februar.

—, *Dynamik eines zweimodigen Lasersmodells*, Seminar „Halbleiterlaser“, WIAS, 6. April.

—, *Dynamics of multi-section-DFB lasers*, International Spring School „Fundamental Issues of Nonlinear Laser Dynamics“, Texel, Niederlande, 18. April.

—, *Langzeitverhalten von Lösungen eines Zweimodenmodells*, Seminar „Halbleiterlaser“, Humboldt-Universität zu Berlin, 18. Mai.

—, *Rechtfertigung der Moden-Approximationen mit singulärer Störungstheorie*, Seminar „Halbleiterlaser“, WIAS, 7. Dezember.

V. SPOKOINY, *Statistical inference for time inhomogeneous volatility models*, Seminarvortrag, Chinese University of Hong Kong, China, 17. Mai.

—, *Structure adaptive methods in dimension reduction*, Tagung „Controlling Complexity for Strong Stochastic Dependencies“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 11. September.

—, *Struktur-adaptive nichtparametrische Methoden und ihre Anwendungen auf Bildverarbeitung und Volatilitätsmodellierung*, Seminarvortrag, Universität Bern, Schweiz, 27. Oktober.

—, *Struktur-adaptive nichtparametrische Glättungsmethoden mit Anwendungen auf Magnet-Resonanz-Aufnahmen*, Kolloquiumsvortrag, Universität Marburg, 27. November.

—, *Local versus global adaptive estimation of time series with applications to volatility modelling*, Tagung „Rencontres de statistiques mathématiques“, Luminy, Frankreich, 14. Dezember.

J. SPREKELS, *Phase-field systems and vector hysteresis operators*, Workshop „Phase Transitions and Interfaces in Evolution Equations: Analysis, Control and Approximation“, Santa Margherita Ligure, Italien, 11. Februar.

—, *Phase transitions and hysteresis operators*, Festkolloquium anlässlich des 60. Geburtstages von Herrn Prof. Dr. Krzysztof Wilmański, WIAS, Berlin, 28. Februar.

—, *Hysteresis in the multi-scale modelling of non-isothermal phase transitions*, DFG-Antragskolloquium für das Schwerpunktprogramm „Analysis, Modellbildung und Simulation von Mehrskalenproblemen“, Stuttgart, 6. Juni.

—, *Phase-field systems with hysteresis*, Konferenz „Evolution Equations 2000“, Levico, Italien, 30. Oktober.

H. STEPHAN, *Modellierung und Simulation von Bauelementen für Schaltkreise der Leistungselektronik*, Elektrotechnisches Institut, Universität Karlsruhe, 4. Oktober.

D. TIBA, *Existence for shape optimization problems with the segment property*, 5th French-Russian-Finnish Workshop on Experimentation, Mathematical Modeling and Computation in Engineering Sciences, Jyväskylä, Finnland, 27. Juni.

—, *On the Lipschitzian arches*, Conference on Finite Element Methods for Three-dimensional Problems (FEM3D), Jyväskylä, Finnland, 29. Juni.

J. TSENG, *Adaptive envelope-constrained filter design*, IEEE International Symposium on Circuits and Systems (ISCAS), Genf, Schweiz, 31. Mai.

D. TURAEV, *The Hamiltonian orbit-flip bifurcation*, WIAS-Workshop „Homoclinic orbits in Hamiltonian and dissipative systems“, Berlin, 24. Februar.

—, *Blue-sky catastrophe in slow-fast systems*, WIAS-Workshop „Singulär gestörte Systeme“, Berlin, 13. April.

—, *Elliptic periodic orbits in dispersive billiard-potentials*, Humboldt-Universität zu Berlin, 25. April.

—, *On wild strange attractors*, Conference „Dynamical Systems“, Porto, Portugal, 10. Mai.

—, *Homoclinic bifurcations*, Workshop „Dynamical Systems — 2000“, ICMS, Edinburgh, Großbritannien, 4. Juni.

—, *On dimension of non-local bifurcational problems*, Tagung „Globale invariante Mannigfaltigkeiten“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 12. Dezember.

W. WAGNER, *Simulation of rare events by the stochastic weighted particle method*, Karlstad University, Schweden, 14. März.

—, *Deterministic and stochastic models for coagulation-fragmentation processes*, Conference „New applications of kinetic theory“, Göteborg, Schweden, 19. Juni.

—, *Stochastic algorithms for studying coagulation dynamics and gelation phenomena*, International Conference on Monte Carlo and probabilistic methods for partial differential equations, Monte Carlo, Monaco, 5. Juli.

—, *A new kinetic equation for dense gases*, 22nd International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Sydney, Australien, 11. Juli.

—, *Stochastic algorithms for kinetic equations*, 11th Conference of the European Consortium for Mathematics for Industry (ECMI 2000), Palermo, Italien, 28. September.

—, *Stochastic simulation of coagulation and fragmentation processes*, WIAS-Workshop „Stochastic models for turbulent transport processes“, Berlin, 25. Oktober.

—, *Monte Carlo algorithms for coagulation processes*, 4th International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods, Hongkong, China, 28. November.

—, *Stochastische Modelle für Koagulationsprozesse*, DFG-Schwerpunktkolloquium „Interagierende Stochastische Systeme von hoher Komplexität“, WIAS, Berlin, 12. Dezember.

W. WEISS, *Die Momentenmethode in der kinetischen Gastheorie*, Mathematisches Kolloquium, Bayerische Julius-Maximilians-Universität Würzburg, 3. Mai.

—, *Boundary conditions and entropy production of sound waves in rarefied gases*, ANumE-Workshop on Boltzmann and Transport Equations, Blaubeuren, 31. August.

—, *Determination of boundary conditions for plane harmonic waves*, Tagung „Thermodynamische Materialtheorien“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 22. Dezember.

K. WILMAŃSKI, *Surface waves*, Thermodynamisches Seminar, Technische Universität Berlin, 5. Juli.

—, *Propagation of weak and strong discontinuities in poroelastic materials*, ICTAM, Chicago, USA, 29. August.

—, *Extended thermodynamics of porous and granular materials*, 33rd Solid Mechanics Conference, Zakopane, Polen, 7. September.

—, *Mathematical theory of porous media*, sechs Vorträge, XXV Scuola Estiva Di Fisica Matematica, Ravello, Italien, 11. – 15. September.

—, *Mass exchange in diffusion processes in porous materials*, Symposium on Mathematical Models in Soil Mechanics, Scilla (Reggio di Calabria), Italien, 20. September.

—, *Nondestructive testing of porous materials*, sechs Vorträge, EU-Kurs „Structural Problems and Control Methods for Conservation of Cultural and Environmental Heritage“, CNR di Pisa Sa Cataldo, Italien, 10. – 12. Oktober.

—, *Trennflächen in porösen Materialien*, Thermodynamisches Seminar, WIAS, Berlin, 22. November.

M. WOLFRUM, *A sequence of order relation, encoding heteroclinic orbits in scalar parabolic PDE*, Freie Universität Berlin, 25. Mai.

—, *Lasermodule mit verzögerter Rückkopplung*, Humboldt-Universität zu Berlin, 6. Juli.

Poster

B. ALBERS, *An example for adsorption/diffusion processes in porous materials*, Symposium on Mathematical Models in Soil Mechanics, Scilla (Reggio di Calabria), Italien, 19. – 22. September.

U. BANDELOW, H. GAJEWSKI, H.-CHR. KAISER, TH. KOPRUCKI, J. REHBERG, *Modeling and simulation of strained quantum wells in semiconductor lasers*, Statusseminar zum BMBF-Fördergebiet „Ausgewählte Gebiete der Mathematik“, Frankfurt am Main, 11. – 12. Dezember.

W. DREYER, F. DUDERSTADT, *Mathematische Modellierung und Simulation der Entstehung, des Wachstums und der Auflösung von Arsenausscheidungen in einkristallinem Galliumarsenid*, Statusseminar zum BMBF-Fördergebiet „Ausgewählte Gebiete der Mathematik“, Frankfurt am Main, 11. – 12. Dezember.

W. DREYER, F. DUDERSTADT, D. HÖMBERG, *Modellierung, Analyse und Simulation des Widerstands-Impulsschweißens*, Statusseminar zum BMBF-Fördergebiet „Ausgewählte Gebiete der Mathematik“, Frankfurt am Main, 11. – 12. Dezember.

A. EIBECK, *Coagulation and stochastic particle systems*, Schloessmann Seminar on Mathematical Models in Biology, Chemistry and Physics, Bad Lausick, 19. – 22. Mai.

J. ELSCHNER, R. HINDER, G. SCHMIDT, *Direkte und inverse Probleme bei diffraktiven Strukturen — Optimierung binärer Gitter*, Statusseminar zum BMBF-Fördergebiet „Ausgewählte Gebiete der Mathematik“, Frankfurt am Main, 11. – 12. Dezember.

J. ELSCHNER, A. RATHSFELD, G. SCHMIDT, *Modellierung und Optimierung mikrooptischer Oberflächenstrukturen*, Statusseminar zum BMBF-Fördergebiet „Ausgewählte Gebiete der Mathematik“, Frankfurt am Main, 11. – 12. Dezember.

J. ELSCHNER, G. SCHMIDT, V. SCHULZ, *Simulation and optimization in diffractive optics*, 1st SIAM Conference on Computational Science & Engineering, Washington, DC, USA, 21. – 24. September.

J. FUHRMANN, M. PETZOLDT, *Adaptive Verfahren für unterirdische Strömungs- und Transportprozesse*, Statusseminar zum BMBF-Fördergebiet „Ausgewählte Gebiete der Mathematik“, Frankfurt am Main, 11. – 12. Dezember.

H. GAJEWSKI, H.-CHR. KAISER, H. LANGMACH, R. NÜRNBERG, *3d-simulation of semiconductor detectors*, Statusseminar zum BMBF-Fördergebiet „Ausgewählte Gebiete der Mathematik“, Frankfurt am Main, 11. – 12. Dezember.

H. GAJEWSKI, R. NÜRNBERG, G. SCHMIDT, *Optoelektronische Sensoren*, Statusseminar zum BMBF-Fördergebiet „Ausgewählte Gebiete der Mathematik“, Frankfurt am Main, 11. – 12. Dezember.

F. GRUND, K. EHRHARDT, J. BORCHARDT, D. HORN, *Dynamic process simulation for chemical plants*, Statusseminar zum BMBF-Fördergebiet „Ausgewählte Gebiete der Mathematik“, Frankfurt am Main, 11. – 12. Dezember.

R. HÜNLICH, G. ALBINUS, H. GAJEWSKI, A. GLITZKY, J. A. GRIEPENTROG, W. RÖPKE, *Modelling and simulation of power devices for high-voltage integrated circuits*, Statusseminar zum BMBF-Fördergebiet „Ausgewählte Gebiete der Mathematik“, Frankfurt am Main, 11. – 12. Dezember.

H.-CHR. KAISER, H. LANGMACH, *Three dimensional semiconductor device simulation — 3D effects in X-ray detectors*, ALGORITMY 2000, Conference on Scientific Computing, Podbanské, Slowakei, 10. – 15. September.

O. KLEIN, P. PHILIP, J. SPREKELS, K. WILMAŃSKI, *Numerical simulations and control of SiC bulk single crystal growth*, Statusseminar zum BMBF-Fördergebiet „Ausgewählte Gebiete der Mathematik“, Frankfurt am Main, 11. – 12. Dezember.

TH. KOPRUCKI, *On eigenvalue problems arising from the modeling of semiconductor nanostructures*, 3rd International Workshop on Accurate Solution of Eigenvalue Problems, ACC, Hagen, 3. – 6. Juli.

P. MATHÉ, J.-H. ZACHARIAS-LANGHANS, *Ultraschall und Diffusion*, Statusseminar zum BMBF-Fördergebiet „Ausgewählte Gebiete der Mathematik“, Frankfurt am Main, 11. – 12. Dezember.

H.-G. BARTEL, H.-J. MUCHA, J. DOLATA, *Chemometrische Untersuchung der chemischen Zusammensetzung gestempelter römischer Ziegel aus Obergermanien*, Tag der Chemie — Wissenschaft trifft Industrie, Wissenschaftspark Golm der Universität Potsdam, 8. November.

J. POLZEHL, *Räumlich adaptive Glättungsverfahren zur Signalerkennung in funktionellen und dynamischen MRI*, Medica Research 2000, Berlin, 11. Mai.

—, *Spatially adaptive smoothing techniques for signal detection in functional and dynamic Magnet Resonance Imaging*, Human Brain Mapping 2000, San Antonio, Texas, USA, 12. – 16. Juni.

—, *Spatially adaptive smoothing techniques for signal detection in functional and dynamic Magnet Resonance Imaging*, MEDICA 2000, Düsseldorf, 22. – 25. November.

R. RADZIUNAS, K. R. SCHNEIDER, *Tayloring of semiconductor lasers for optical communicator networks*, 3rd International Symposium „Investigation of Nonlinear Dynamic Effects in Production Systems“, Brandenburgische Technische Universität Cottbus, 26. – 27. September.

O. REISS, J.-H. ZACHARIAS-LANGHANS, *Bestimmung von Risikomaßen*, Statusseminar zum BMBF-Fördergebiet „Ausgewählte Gebiete der Mathematik“, Frankfurt am Main, 11. – 12. Dezember.

R. SCHLUNDT, *Iterative solution of systems of linear equations in microwave circuits using a block quasi-minimal residual algorithm*, Scientific Computing in Electrical Engineering (SCEE 2000), Warnemünde, 20. – 23. August.

G. WITTUM, V. SCHULZ, B. MAAR, D. LOGASHENKO, *Numerische Verfahren zur Parameterschätzung bei Pasten und zur Formoptimierung*, Statusseminar zum BMBF-Fördergebiet „Ausgewählte Gebiete der Mathematik“, Frankfurt am Main, 11. – 12. Dezember.

Präsentationen auf Messen

F. GRUND, *Chemische Prozess-Simulation*, Aussteller, ACHEMA 2000, Frankfurt am Main, 22. – 24. Mai.

D. HÖMBERG, W. DREYER, F. DUDERSTADT, *WIAS-WELDSYM — Neue Wege in der Schweißtechnik*, Aussteller, Hannover Messe 2000, 19. – 25. März.

D. HORN, *Chemische Prozess-Simulation*, Aussteller, ACHEMA 2000, Frankfurt am Main, 24. – 27. Mai.

J. POLZEHL, *Spatially adaptive smoothing techniques for signal detection in functional and dynamic Magnet Resonance Imaging*, Aussteller, MEDICA 2000, Düsseldorf, 22. – 25. November.

6.5 Arbeitsaufenthalte von Mitarbeitern

A. BOVIER, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Département de Mathématiques, Lausanne, Schweiz, 26. März – 30. April und 3. – 20. September.

—, Karls-Universität Prag, Fachbereich Mathematik, Tschechische Republik, 21. – 27. August.

W. DREYER, Heriot-Watt University Edinburgh, Department of Mechanical and Chemical Engineering, Großbritannien, 17. – 23. August.

F. DUDERSTADT, GKSS — Forschungszentrum Geesthacht GmbH, Geesthacht, 27. – 29. Juni.

M. A. EFENDIEV, Universität Stuttgart, Mathematisches Institut A, 3. – 28. Februar.

A. EIBECK, Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt, Fachbereich Mathematik, 14. – 18. Februar.

K. FLEISCHMANN, The Fields Institute Toronto, Kanada, 25. März – 17. April.

—, Centre de Recherche de Mathématique, Montréal, Kanada, 17. – 21. April.

B. GENTZ, Georgia Institute of Technology, Atlanta, USA, 3. – 22. Februar.

R. HENRION, Karls-Universität Prag, Fachbereich für Wahrscheinlichkeitstheorie und Mathematische Statistik, Tschechische Republik, 15. – 19. Mai.

—, Université de Bourgogne, Département de Mathématiques, Dijon, Frankreich, 8. – 15. Juni und 15. September – 6. Oktober.

D. HÖMBERG, Université de Nancy I, Institut Elie Cartan, Frankreich, 20. – 26. November.

—, Karl-Franzens-Universität Graz, Institut für Mathematik, Österreich, 12. – 16. Dezember.

P. KREJČÍ, Université de Nancy I, Institut Elie Cartan, Frankreich, 1. – 31. Mai.

G. MILSTEIN, Wayne State University, Department of Mathematics, Detroit, USA, 24. Oktober – 7. November.

H.-J. MUCHA, Universität Salzburg, Projekt Statistik-Software, 2. – 6. Juli.

H. NEIDHARDT, Gastprofessur an der Université de la Méditerranée, Aix-Marseille II, Frankreich, 9. – 18. November.

P. PHILIP, University of Madeira, Funchal, Portugal, 3. – 9. Juli.

J. POLZEHL, University of Minnesota, School of Statistics, Minneapolis, USA, 27. Mai – 20. Juni.

—, Katholische Universität Louvain-la-Neuve, Fachbereich Statistik, Belgien, 27. September – 1. Oktober.

K. SABELFELD, Universität Brüssel, Zusammenarbeit am Copernicus-Projekt, 17. – 20. April.

—, Universität Helsinki, Institut für Numerische Mathematik, Finnland, 11. Juli – 12. September.

—, Yale University, Department of Mathematics, New Haven, USA, 14. – 30. September.

G. SCHMIDT, Michigan State University, East Lansing, USA, 17. April – 6. Mai.

—, Universität Linköping, Mathematisches Institut, Schweden, 11. – 18. Dezember.

K. R. SCHNEIDER, Universität Paris-Süd, Fachbereich Mathematik, Frankreich, 3. – 8. Januar.

—, Universität Tel Aviv und Bersheba, Israel, 9. – 20. Februar.

—, University of Minnesota, School of Mathematics, Minneapolis, und University of Montana, Department of Mathematical Sciences, Missoula, USA, 26. April – 7. Mai.

V. SCHULZ, Universität Augsburg, Institut für Mathematik, 14. – 17. März.

—, Virginia Tech, Institute for Computational and Applied Mathematics, Blacksburg, USA, 17. – 21. September.

J. SIEBER, University College Cork, Institute for Nonlinear Science, Irland, 15. – 20. Februar.

V. SPOKOINY, Hong Kong University, Department of Statistics, China, 11. – 23. Juni.

D. TURAEV, Technische Universität Lissabon, Fachbereich Mathematik, Portugal, 14. Mai – 11. Juni.

W. WAGNER, Karlstad University, Department of Mathematics, Schweden, 8. – 24. März.

—, Université de Savoie, Chambéry, Frankreich, 7. – 14. Juli.

W. WEISS, University of Bologna, Research Centre of Applied Mathematics, Bologna, Italien, 3. – 30. September.

K. WILMAŃSKI, Universität Pisa, Italien, 25. September – 20. Oktober.

6.6 Vorlesungen und Seminare

A. BOVIER, Vorlesung *Statistische Mechanik ungeordneter Systeme*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000.

—, Vorlesung *Extrema stochastischer Folgen und Prozesse*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 2000/2001.

I. BREMER, Übung *Grundlagen der elektronischen Datenverarbeitung*, Technische Fachhochschule Berlin, 4 SWS, Wintersemester 2000/2001.

W. DREYER, K. WILMAŃSKI, Vorlesung *Mikro- und makroskopische Modellierung in der Kontinuumsmechanik*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Sommersemester 2000 und Wintersemester 2000/2001.

M. A. EFENDIEV, Vorlesung *Neue Entwicklungen in der Theorie von nichtlinearen Riemann-Hilbert-Problemen*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000.

H. GAJEWSKI, Vorlesung *Nichtlineare partielle Differentialgleichungen*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000.

—, Vorlesung *Nichtlineare partielle Differentialgleichungen — Analysis und Numerik*, Freie Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 2000/2001.

A. GLITZKY, Vorlesung *Reaktions-Diffusionssysteme*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000.

—, Seminar *Modellierung mit gewöhnlichen Differentialgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Sommersemester 2000.

—, Vorlesung *Analytische Behandlung von Reaktions-Diffusionsgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 2000/2001.

R. HENRION, Vorlesung *Stochastische Optimierung I*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Sommersemester 2000.

—, Vorlesung *Stochastische Optimierung II*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 2000/2001.

R. HENRION, Forschungsseminar *Numerik stochastischer Modelle* (gemeinsam mit W. Römisch, Humboldt-Universität), Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000, Sommersemester 2000 und Wintersemester 2000/2001.

D. HÖMBERG, Vorlesung *Numerik partieller Differentialgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1999/2000.

S. JASCHKE, Vorlesung *Angewandte Finanzmathematik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 2000/2001.

C. KÜLSKE, Vorlesung *Stochastik für Informatiker*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Sommersemester 2000 und Wintersemester 2000/2001.

M. KUNIK, Vorlesung *Lösungsmethoden für hyperbolische Erhaltungsgleichungen in Physik und Technik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000, Sommersemester 2000, Wintersemester 2000/2001.

H. NEIDHARDT, Vorlesung *Spurklassenstörungen und Streutheorie*, Universität Potsdam, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000.

—, Vorlesung *Analysis*, Hasso-Plattner-Institut für Softwaresystemtechnik, Potsdam, 4 SWS, Sommersemester 2000.

J. POLZEHL, Seminar *Mathematische Statistik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000.

K. R. SCHNEIDER, Seminar *Nichtlineare Dynamik* (gemeinsam mit B. Fiedler, Freie Universität Berlin), 2 SWS, Wintersemester 1999/2000 und 2000/2001 an der Freien Universität Berlin, Sommersemester 2000 am WIAS.

—, Seminar *Halbleiterlaser* (gemeinsam mit L. Recke und H.-J. Wünsche, Humboldt-Universität), Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000 und Sommersemester 2000.

—, Vorlesung *Qualitative Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 2000/2001.

V. SCHULZ, Vorlesung *Numerische Methoden der nichtlinearen Optimierung* (gemeinsam mit M. Steinbach, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin), Technische Universität Berlin, 4 SWS, Sommersemester 2000.

V. SCHULZ, Seminar *Praktische mathematische Modellierung* (gemeinsam mit S. B. Hazra, Universität Heidelberg), Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 2000/2001.

V. SPOKOINY, Seminar *Mathematische Statistik*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000, Sommersemester 2000 und Wintersemester 2000/2001.

—, Vorlesung *Statistik der Finanzmärkte*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 2000/2001.

J. SPREKELS, Vorlesung *Mathematische Modelle von Phasenumwandlungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000.

—, Vorlesung *Variationsungleichungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 2 SWS, Sommersemester 2000.

—, Vorlesung *Funktionalanalysis*, Humboldt-Universität zu Berlin, 4 SWS, Wintersemester 2000/2001.

G. TELSCHOW, Vorlesung *Einführung in die Datenverarbeitung III*, Technische Fachhochschule Berlin, 4 SWS, Wintersemester 1999/2000.

—, Übung *Einführung in die Datenverarbeitung III*, Technische Fachhochschule Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000.

——, Vorlesung *Elektronische Datenverarbeitung I*, Technische Fachhochschule Berlin, 2 SWS, Sommersemester 2000.

——, Übung *Elektronische Datenverarbeitung I*, Technische Fachhochschule Berlin, 2 SWS, Sommersemester 2000.

——, Vorlesung *Grundlagen der elektronischen Datenverarbeitung*, Technische Fachhochschule Berlin, 6 SWS, Wintersemester 2000/2001.

W. WEISS, Vorlesung *Kinetische Theorie*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Sommersemester 2000.

K. WILMAŃSKI, Vorlesung *Grundlagen der Kristallplastizität*, Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000.

——, *Thermodynamisches Seminar* (gemeinsam mit I. Müller, Technische Universität Berlin), WIAS/Technische Universität Berlin, 2 SWS, Wintersemester 1999/2000, Sommersemester 2000 und Wintersemester 2000/2001.

6.7 Dissertationen, Habilitationen und Rufe

Dissertationen

B. ALBERS, Dissertationsschrift: *Makroskopische Beschreibung von Adsorptions-Diffusions-Vorgängen in porösen Körpern*, Technische Universität Berlin, Betreuer: Prof. Dr. Krzysztof Wilmański, 13. April 2000.

J. A. GRIEPENTROG, Dissertationsschrift: *Zur Regularität linearer elliptischer und parabolischer Randwertprobleme mit nichtglatten Daten*, Humboldt-Universität zu Berlin, Betreuer: Dr. habil. Rolf Hünlich, 30. Mai 2000.

B. NIEDERHAUSER, Dissertationsschrift: *Mathematical aspects of Hopfield models*, Technische Universität Berlin, Betreuer: Priv.-Doz. Dr. Anton Bovier, 29. September 2000.

M. SIEGFANZ, Dissertationsschrift: *Die eindimensionale Wellengleichung mit Hysterese*, Humboldt-Universität zu Berlin, Betreuer: Prof. Dr. Jürgen Sprekels, 14. Juli 2000.

Habilitationen

V. SCHULZ, Habilitationsschrift: *Mehrgittermethoden für Optimierungsprobleme bei partiellen Differentialgleichungen*, Universität Heidelberg, 24. Mai 2000.

Rufe

V. SPOKOINY, C4-Professur an der Universität Würzburg, am 29. Juni 2000.

6.8 Eigene Tagungen und Veranstaltungen des WIAS

WORKSHOP „HOMOCLINIC ORBITS IN HAMILTONIAN AND DISSIPATIVE SYSTEMS“

Berlin, 24. Februar

Organisation: WIAS (FG 2)

Sponsoring: WIAS

Der Workshop war der komplexen Dynamik von Systemen gewöhnlicher Differentialgleichungen gewidmet, die durch homokline Bifurkation erzeugt wird. Im Mittelpunkt standen Vorträge über Bifurkationen von Systemen mit homoklinen Orbits und homoklinen Berührungen einschließlich deren Normalformen. Der Workshop fand auf einem sehr hohen Niveau statt und wurde durch die Teilnahme bekannter Vertreter der Schule von L. Shilnikov aus Nishny Novgorod geprägt. Die Teilnehmer kamen aus Deutschland, Israel und Russland.

FESTKOLLOQUIUM ANLÄSSLICH DES 60. GEBURTSTAGES VON HERRN PROF. DR. KRZYSZTOF WILMAŃSKI

Berlin, 28. Februar

Organisation: WIAS (FG 7)

Sponsoring: WIAS

Das Programm des Kolloquiums wurde von Freunden und Mitarbeitern von Prof. Wilmański gestaltet. Zunächst sprach der Direktor des WIAS, Prof. Sprekels, über Phasenübergänge und gratulierte dem Jubilar. Prof. Zorski (IPPT, Warschau, Polen) hielt einen Vortrag über Versetzungstheorie. An seiner Wirkungsstätte, der polnischen Akademie der Wissenschaften, hat auch Prof. Wilmański promoviert und habilitiert. Prof. Müller (TU Berlin) übertrug die Thermodynamik auf die Population von Falken und Tauben. Prof. Ruggeri (Bologna, Italien) hielt einen Vortrag zur Erweiterten Thermodynamik. Als Vertreter der Forschungsgruppe sprach Dr. Dreyer über Mikro-Makro-Übergänge. Die Humboldt-Stipendiatin Dr. I. Edelman referierte über das jüngste Forschungsgebiet des Jubilars, nämlich die Ausbreitung von Oberflächenwellen in porösen Medien.

WORKSHOP „SINGULÄR GESTÖRTE SYSTEME“

Berlin, 13. April

Organisation: WIAS (FG 2)

Sponsoring: WIAS

Der internationale Workshop war Strukturbildungsprozessen in Mehrskalensystemen und deren Steuerung gewidmet. Neben der Präsentation neuer Resultate über schnelle und langsame wandernde Wellen, Bifurkationen in Systemen mit langsam veränderlichen Parametern sowie in singular gestörten Systemen wurden auch beweistechnische Fragestellungen (z. B. Anwendung von Differentialgleichungstechniken) erörtert. Die Teilnehmer kamen aus Deutschland, Frankreich, Israel und Russland.

WORKSHOP „FAST SOLUTION OF DISCRETIZED OPTIMIZATION PROBLEMS“

Berlin, 8. – 12. Mai

Organisation: Stiftung caesar (Bonn), Universität Augsburg, WIAS (FG 4)

Sponsoring: DFG, WIAS

An diesem Workshop nahmen 59 Wissenschaftler aus zehn Ländern teil. Das Ziel dieses Workshops war es, zwischen den noch relativ getrennten Communities zur nichtlinearen Optimierung auf der einen Seite und zur Numerik partieller Differentialgleichungen auf der anderen Seite

einen Ideen-Austausch anzuregen, der insbesondere notwendig ist zur Lösung vielfältiger aktueller Optimierungsprobleme bei PDE in Anwendungen (Formoptimierung, Topologieoptimierung, Prozessoptimierung, ...). Daher war das Organisationskomitee gemischt disziplinär besetzt, und auch die eingeladenen Vortragenden gehörten zu etwa gleichen Teilen den beiden Disziplinen an. Der Austausch kam in lebhaften Diskussionen in Gang, und es wurde aus dem Kreis der Teilnehmer angeregt, einen Proceedingsband zu erstellen (erscheint bei Birkhäuser) und auch eine Fortsetzung dieser Veranstaltung durchzuführen. (Letzteres wird 2003 in Oberwolfach der Fall sein.)

WORKSHOP „STOCHASTIC MODELS FOR TURBULENT TRANSPORT PROCESSES“³

Berlin, 23. – 25. Oktober

Organisation: WIAS (FGn 5/6)

Sponsoring: WIAS, INTAS, DFG

Zielstellung des Workshops war es, Wissenschaftler und Anwender auf dem Gebiet der stochastischen Modelle für turbulente Transportprozesse zusammenzuführen, wichtige Ergebnisse der letzten Zeit vorzustellen sowie über aktuelle Probleme und Anforderungen aus den Anwendungsbereichen zu diskutieren. An der dreitägigen Veranstaltung nahmen 22 Teilnehmer aus 10 Ländern teil, es wurden 16 Vorträge gehalten. Das Spektrum der Teilnehmer umfasste sowohl Physiker aus den Gebieten Aerosolforschung und Meteorologie, die über umfangreiches Material an experimentellen Daten verfügen, als auch auf dem Gebiet der Stochastik und Numerik arbeitende Mathematiker.

Physikalische Vorgänge in turbulenten Medien sind in wichtigen Bereichen der Umweltforschung von entscheidender Bedeutung. Ein Beispiel hierfür sind die Prozesse der Entstehung, der Umwandlung und des Transports von Schadstoffen in der Atmosphäre, auf denen der inhaltliche Schwerpunkt des Workshops lag. Weltweit führende Experten hielten Vorträge zu dieser Thematik, wie etwa M. Borgas (Australien) über „A new inertial-range scaling for high concentration patches in turbulently mixed plumes“, D. J. Thomson (Großbritannien) über „Decay of scalar variance in isotropic turbulence“ und P. K. Yeung (USA) über „Direct numerical simulations for stochastic modeling in turbulence“. Der intensive Austausch von Ergebnissen und Erfahrungen hat zu neuen Impulsen bei der Weiterentwicklung stochastischer numerischer Verfahren im Bereich der Umweltforschung geführt. Die Abstracts der Vorträge erscheinen in der Zeitschrift *Monte Carlo Methods and Applications*, Vol. 6, Nr. 4 (2000).

BEGUTACHTUNGSKOLLOQUIUM DES SCHWERPUNKTPROGRAMMS „INTERAGIERENDE STOCHASTISCHE SYSTEME VON HOHER KOMPLEXITÄT“

Berlin, 11. – 13. Dezember

Organisation: DFG-Schwerpunkt, Technische Universität Berlin, Universität Erlangen, WIAS (FG 5)

Sponsoring: DFG

Das WIAS war Austragungsort des Begutachtungskolloquiums des Schwerpunktprogramms „Interagierende Stochastische Systeme von hoher Komplexität“, in dem die FG 5 intensiv mitarbeitet. In 15 Vorträgen wurde den 50 Teilnehmern ein Überblick über das vielfältige Spektrum der in diesem Programm behandelten Fragestellungen geboten. Dabei zeigten sich die vielseitigen Anwendungsgebiete stochastischer Methoden, von stochastischer Optimierung, statistischer Physik, Biologie bis zur Finanzmathematik.

³<http://www.wias-berlin.de/research/events/workshops/SMTTP2000>

6.9 Gastaufenthalte am WIAS

S. ATHREYA, University of British Columbia, Mathematics Department, Vancouver, Kanada, 23. April – 18. Mai.

P. AZERAD, Université de Perpignan, Laboratoire de Modélisation, Analyse Non-linéaire et Optimisation, Frankreich, 21. November – 22. Dezember.

Y. BARAUD, Ecole Normale Supérieure, Laboratoire de Mathématiques, Paris, Frankreich, 24. – 28. März.

I. BELINSKAYA, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Angewandte Mathematik und Geophysik, Novosibirsk, 29. Februar – 3. März.

H. BERESTYCKI, Université Paris VI, Laboratoire d'Analyse Numérique, Frankreich, 15. – 19. Dezember.

N. BERGLUND, Eidgenössische Technische Hochschule, Departement Mathematik, Zürich, Schweiz, 6. – 20. Oktober und 11. – 22. Dezember.

A. BOHÉ, Université de Paris-Sud, Laboratoire d'Analyse Numérique et EDP, Frankreich, 3. – 14. April.

A. BORZI, Karl-Franzens-Universität Graz, Institut für Mathematik, Österreich, 22. – 28. Oktober.

J. BUKSZAR, Universität Miskolc, Institut für Analysis, Ungarn, 6. November – 5. Dezember.

V. BUTUZOV, Staatliche Universität Moskau, Fakultät für Physik, Russland, 1. – 30. April.

J. CHENG, Gunma Universität, Institut für Mathematik, Kiryu, Japan, 20. August – 6. September und 27. September – 10. Oktober.

R. DALANG, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Département de Mathématiques, Schweiz, 9. – 13. Oktober.

D. A. DAWSON, Carleton University, Department of Mathematics and Statistics, Ottawa, Kanada, 31. Oktober – 8. November.

V. DELOUILLE, Universität Louvain-la-Neuve, Institut für Statistik, Belgien, 12. – 19. November.

P. DUARTE, Technische Universität Lissabon, Fachbereich Mathematik, Portugal, 16. – 22. Dezember.

M. EFENDIEV, Akademie der Wissenschaften Aserbaidshans, Fachbereich Mathematik, Baku, 16. Juni – 31. Juli und 1. – 22. Dezember.

S. M. ERMAKOV, Universität St. Petersburg, Fakultät für Mathematik und Mechanik, Russland, 1. – 31. Oktober.

TH. ERNEUX, Université Libre de Bruxelles, Optique Nonlinéaire Théorique, Brüssel, Belgien, 24. – 29. Juni.

- P. FABRIE, Université de Bordeaux 1, Institut de Mathématiques, Frankreich, 19. – 27. April.
- M. FRÉMOND, Laboratoire Lagrange, LCPC, Paris, Frankreich, 2. – 31. Oktober.
- V. GAIKO, Belarussian State University of Informatics and Radioelectronics, Department of Mathematics, Minsk, Weißrussland, 16. Oktober – 12. November.
- A. L. GARCIA, San Jose State University, Department of Physics, USA, 27. Juli – 27. August.
- V. GAYRARD, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Département de Mathématiques, Schweiz, 24. September – 23. Oktober.
- G. GIELIS, University of Cambridge, King's College, Großbritannien, 12. – 16. Dezember.
- L. GOLDENTAYER, Tel Aviv University, Department of System Engineering, Israel, 28. August – 10. September.
- S. GONCHENKO, Institut für Angewandte Mathematik und Kybernetik, Nizhny Novgorod, Russland, 1. Januar – 29. Februar.
- I. GRAMA, Universität Vannes, Fachbereich Mathematik, Frankreich, 7. – 25. August.
- O. GROSSHANS, Universität Heidelberg, Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen, 16. – 21. Januar.
- H. HAAF, Dresdner Kleinwort Benson (Dresdner Bank), Frankfurt am Main, 13. – 17. März.
- S. HANDROCK-MEYER, Technische Universität Chemnitz, Fachbereich Mathematik, 21. – 25. August.
- S. B. HAZRA, Universität Heidelberg, Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen, 6. – 18. März, 5. – 10. Juni, 24. Juli – 1. August und 20. – 24. November.
- M. HOFFMANN, Universität Paris VII, Statistiques et Modèles Aléatoires, Frankreich, 25. – 29. November.
- R. HONG, Hong Kong Baptist University, Hongkong, China, 4. – 29. September.
- A. IGNAT, University „Al I. Cuza“, Faculty of Computer Science, Iași, Rumänien, 10. – 25. Juli.
- Y. JETYBAEV, Tek Kazinvest Partnership Limited, Almaty, Kasachstan, 7. – 16. Dezember.
- M. JUNK, Universität Kaiserslautern, Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik, 13. – 24. März.
- J. KASHTANOV, Universität St. Petersburg, Fachbereich Mathematik und Mechanik, Russland, 2. November – 1. Dezember.
- N. KENMOCHI, Chiba University, Department of Mathematics, Japan, 3. – 18. Juli.
- A. M. KHLUDNEV, Russische Akademie der Wissenschaften, Lavrentiev-Institut für Hydrodynamik, Novosibirsk, 20. Januar – 20. Februar und 3. Dezember – 31. Januar 2001.

B. N. KHOROMSKIJ, Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig, 12. – 15. November.

M. KIRKILIONIS, Universität Heidelberg, Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen, 10. – 20. April.

TH. KLETSCHKOWSKI, Universität der Bundeswehr Hamburg, 6. – 8. November.

A. KOLODKO, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Angewandte Mathematik und Geophysik, Novosibirsk, 30. April – 29. Mai.

A. KOROSTELEV, Wayne State University, Department of Mathematics, Detroit, USA, 1. – 30. November.

I. KOURKOVA, Université Paris VI „Pierre et Marie Curie“, Frankreich, 20. – 30. November.

M. KRAFT, University of Cambridge, Department of Chemical Engineering, Großbritannien, 26. – 31. März, 7. August – 7. September und 11. – 20. Dezember.

B. KRAUSKOPF, University of Bristol, Department of Engineering Mathematics, Großbritannien, 24. – 28. Oktober.

O. KURBANMURADOV, Turkmenische Akademie der Wissenschaften, Wissenschaftliches Zentrum „Climate“, Aschhabad, Turkmenistan, 11. März – 21. Mai und 20. Oktober – 16. Dezember.

PH. LAURENÇOT, Université de Nancy I, Laboratoire de Mathématiques, Institut Elie Cartan, Vandœuvre-les-Nancy, Frankreich, 21. – 25. Februar,

—, Université Paul Sabatier, Toulouse, Frankreich, 25. November – 2. Dezember.

G. LEONOV, Universität St. Petersburg, Mathematisch-Mechanische Fakultät, Russland, 4. – 10. Dezember.

A. LEVYKIN, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Angewandte Mathematik und Geophysik, Novosibirsk, 12. November – 12. Dezember.

D. LOGASHENKO, Universität Heidelberg, Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen, 19. November – 3. Dezember.

M. LÖWE, Katholieke Universiteit Nijmegen, Faculteit der Natuurwetenschappen, Wiskunde en Informatica, Niederlande, 25. – 29. November.

ST. LUDING, Universität Stuttgart, Mathematisches Institut A, 25. September – 6. Oktober.

A. LUSHNIKOV, Karpov-Institut für Physikalische Chemie, Moskau, Russland, 21. – 27. Februar.

O. LYKOVA, Nationale Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Institut für Mathematik, Kiew, 14. – 21. August.

Y. MAISTRENKO, Nationale Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Institut für Mathematik, Kiew, 16. – 20. Juli.

S. MARTÍNEZ, Universidad de Chile, Departamento de Ingeniería Matemática, Santiago, Chile, 17. – 20. Oktober.

K. MIKULA, Slowakische Technische Universität, Fachbereich Mathematik, Bratislava, 27. November – 17. Dezember.

G. MILSTEIN, Ural State University, Department of Mathematics, Ekaterinburg, Russland, 1. – 30. April.

A. MIRANVILLE, Université de Poitiers, Mathématiques, Futuroscope Chasseneuil, Frankreich, 25. April – 2. Mai.

C. MUELLER, University of Rochester, Department of Mathematics, USA, 27. Mai – 4. Juni.

W. MÜLLER, Heriot-Watt University, Department of Mechanical and Chemical Engineering, Edinburgh, Großbritannien, 27. März – 21. April und 12. – 16. Dezember.

L. MYTNIK, Technion Israel Institute of Technology, Faculty of Industrial Engineering and Management, 18. Juli – 18. August.

N. NEFEDOV, Staatliche Universität Moskau, Fakultät für Physik, Russland, 1. – 30. April.

C. NEWMAN, New York University, Courant Institute of Mathematical Sciences, USA, 14. – 19. Juni.

E. G. NG, Lawrence Berkeley National Laboratory, National Energy Research Scientific Computing Center, Berkeley, USA, 13. – 19. August.

B. NIEDERHAUSER, Eidgenössische Technische Hochschule, Fachbereich Mathematik, Zürich, Schweiz, 15. – 22. Oktober.

S. PEREVERZEV, Nationale Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Institut für Mathematik, Kiew, 18. September – 18. Dezember.

J. POLEWCZAK, California State University, Department of Mathematics, Northridge, USA, 29. Oktober – 2. November.

E. RADKEVICH, Staatliche Universität Moskau, Fachbereich Mathematik und Mechanik, Russland, 7. – 12. August.

J.-M. ROQUEJOFFRE, Université Paul Sabatier, Toulouse, Frankreich, 15. – 22. Oktober.

T. RUGGERI, Universität Bologna, CIRAM, Italien, 24. – 28. Februar.

G. SCHIMPERNA, Universität Pavia, Fachbereich Mathematik „F. Casorati“, Italien, 11. – 17. Dezember.

H. SCHURZ, University of Minnesota, Institute of Technology, Minneapolis, USA, 10. – 14. Januar.

I. SHALIMOVA, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Angewandte Mathematik und Geophysik, Novosibirsk, 1. Oktober – 1. November.

A. SHILNIKOV, Institut für Angewandte Mathematik und Kybernetik, Nizhny Novgorod, Russland, 3. – 7. Juli.

L. P. SHILNIKOV, Institut für Angewandte Mathematik und Kybernetik, Nizhny Novgorod, Russland, 1. – 29. Februar.

L. SIMON, Eötvös-Loránd-Universität, Fachbereich Numerische Analysis, Budapest, Ungarn, 9. – 14. Januar.

N. SIMONOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Angewandte Mathematik und Geophysik, Novosibirsk, 26. März – 6. Mai.

I. V. SKRYPNIK, Nationale Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Institut für Angewandte Mathematik und Mechanik, Donetsk, 1. – 31. Juli.

I. H. SLOAN, The University of New South Wales, School of Mathematics, Sydney, Australien, 3. – 6. Oktober.

V. SOBOLEV, Staatliche Universität Samara, Fachbereich Differentialgleichungen & Kontrolltheorie, Russland, 13. November – 2. Dezember.

J. SOKOŁOWSKI, Université de Nancy I, Laboratoire de Mathématiques, Institut Elie Cartan, Vandœuvre-les-Nancy, Frankreich, 17. – 20. April.

S. SPERLICH, Universität Carlos III Madrid, Fachbereich Mathematische Statistik und Ökonometrie, Spanien, 5. – 22. Dezember.

U. STEFANELLI, Universität Pavia, Fachbereich Mathematik „F. Casorati“, Italien, 1. September – 8. Oktober.

O. STENKIN, Institut für Angewandte Mathematik und Kybernetik, Fachbereich Differentialgleichungen, Nizhny Novgorod, Russland, 15. September – 15. Dezember.

G. STOYAN, Eötvös-Loránd-Universität, Fachbereich Numerische Analysis, Budapest, Ungarn, 9. – 14. Januar.

V. STRYGIN, Staatliche Universität Voronezh, Institut für Angewandte Mathematik, Russland, 27. Februar – 12. März.

V. TEMLYAKOV, University of South Carolina, Department of Mathematics, Columbia, USA, 25. – 29. Oktober.

M. TRETIAKOV, University of Wales, Department of Mathematics, Swansea, Großbritannien, 11. – 24. Juni und 7. – 22. Dezember.

V. TRONCIU, Technische Universität Moldawien, Fachbereich Physik, Chisinau, Moldawien, 11. – 21. Dezember.

A. B. VASILIEVA, Staatliche Universität Moskau, Fakultät für Physik, Russland, 18. Mai – 2. Juni.

O. VASSILIEVA, Staatliche Universität Moskau, Fachbereich Mathematik und Mechanik, Russland, 23. Mai – 4. Juni.

V. A. VATUTIN, Steklov-Institut für Mathematik, Moskau, Russland, 10. November – 9. Dezember.

A. VERETENNIKOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau, 25. – 30. Juni.

A. VISINTIN, Universität Trento, Fachbereich Mathematik, Povo di Trento, Italien, 12. – 18. Juni und 9. – 15. September.

A. A. VLADIMIROV, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau, 29. Februar – 31. März.

S. VOLKWEIN, Karl-Franzens-Universität Graz, Institut für Mathematik, Österreich, 19. – 25. Februar.

R. VON SACHS, Universität Louvain-la-Neuve, Institut für Statistik, Belgien, 12. – 19. November.

T. WILHELM, Universität Innsbruck, Institut für Geotechnik und Tunnelbau, Österreich, 4. – 9. Juni.

L. XIAO, Academia Sinica, Institute of Mathematics, Peking, China, 23. – 26. Februar.

J. XIONG, University of Tennessee, Department of Mathematics, Knoxville, USA, 13. Juni – 11. Juli.

M. YAMAMOTO, Universität Tokio, Institut für Mathematik, Japan, 11. März – 18. April und 28. September – 12. Oktober.

M. ZAHRADNÍK, Karls-Universität Prag, Fakultät für Mathematik und Physik, Tschechische Republik, 7. November – 15. Dezember.

S. V. ZELIK, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau, 4. März – 14. April und 29. Oktober – 1. Dezember.

Stipendiaten

I. EDELMAN, Russische Akademie der Wissenschaften, Institut der Physik der Erde, Moskau, 1. Januar – 31. August (Alexander-von-Humboldt-Stipendium).

A. KADOYA, Hiroshima Shudo Universität, Fakultät für Wirtschaftswissenschaften, Hiroshima, Japan, 31. August 2000 – 31. August 2001 (Fellowship des Visiting Professor Programms der Hiroshima Shudo Universität).

D. TIBA, Rumänische Akademie, Institut für Mathematik, Bukarest, Rumänien, 1. Juli – 31. Dezember (Alexander-von-Humboldt-Stipendium).

Am WIAS betreute Doktoranden und Postdoktoranden

F. MANZO, Postdoktorand, Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Technische Universität Berlin, 1. September – 31. Dezember.

B. NIEDERHAUSER, Doktorand, Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Technische Universität Berlin, 1. Januar – 1. Oktober.

J. SWART, Postdoktorand, Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Technische Universität Berlin, 1. Januar – 30. September.

H. ZÄHLE, Doktorand, Graduiertenkolleg „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“, Technische Universität Berlin, 1. April – 31. Dezember.

6.10 Gastvorträge

M. ACHENBACH, Parker Hannifin GmbH, Bietigheim, *Stand der Materialbeschreibung technischer Elastomere unter besonderer Berücksichtigung ihrer dynamischen Eigenschaften*, 4. Dezember.

A. ARNOLD, Universität des Saarlandes, Saarbrücken, *Mathematische Konzepte von offenen Quanten-Randbedingungen*, 20. November.

S. ATHREYA, University of British Columbia, Vancouver, Kanada, *Duality method for martingale problems*, 3. Mai.

J. AU, Technische Universität Berlin, *Zur Integration der maximierten Verteilungsfunktion*, 17. Mai.

P. AZERAD, Université de Perpignan, Frankreich, *About the hydrostatic approximation in geophysical fluid dynamics*, 14. Dezember.

Y. BARAUD, Ecole Supérieure Normale, Paris, Frankreich, *Nonasymptotic lower bounds for rates of testing in signal detection*, 28. Juni.

I. BELINSKAYA, Computing Center, Novosibirsk, Russland, *A Monte Carlo method for solving an inverse problem for hyperbolic equations*, 1. März.

N. BERGLUND, Eidgenössische Technische Hochschule, Zürich, Schweiz, *Dynamic pitchfork bifurcations with additive noise*, 18. Oktober.

A. BORZI, Karl-Franzens-Universität Graz, Österreich, *Optimal control for determining optical flow*, 26. Oktober.

J. BRECKLING, Insiders GmbH, Mainz, *A new framework for the evaluation of market and credit risk*, 26. Juni.

P. BROCKWELL, Colorado State University, USA, *Heavy-tailed and non-linear continuous-time AMRA models for financial time series*, 25. Oktober.

J. BUKSZAR, Universität Miskolc, Ungarn, *Probability bounds with applications*, 20. November.

J. CHENG, Gunma Universität, Kiryu, Japan, *Unique continuation on an analytic curve and its applications to inverse problems*, 9. Oktober.

S. CHENG, University of Hong Kong, China, *Mark recapture and biased sampling*, 1. November.

L. CROMME, Brandenburgische Technische Universität Cottbus, *Mathematische Probleme bei der Optimierung einer automatischen Produktionsanlage*, 2. November.

R. C. DALANG, Ecole Polytechnique Fédérale, Lausanne, Schweiz, *Level sets and excursions of the Brownian sheet*, 11. Oktober.

S. CO, Universität Rennes I, Frankreich, *Skew without skewness*, 3. Mai.

D. A. DAWSON, Carleton University, Ottawa, Kanada, *Two and four dimensional caricatures in the hierarchical group*, 1. November.

M. DELECROIX, ENSAI, Rennes, Frankreich, *Optimal smoothing in M-estimators for S. I. and P. P. regression*, 10. Januar.

T. DELMOTTE, Université Paul Sabatier, Toulouse, Frankreich, *Reversible random walks in random environment with an application in statistical mechanics*, 15. November.

A. DEMIDOV, Staatliche Lomonossov-Universität Moskau, Russland, *Inverse problems in plasma equilibrium*, 1. März.

R. DUDUCHAVA, Akademie der Wissenschaften Georgiens, Tbilissi, *Boundary value problems in domains with peaks*, 9. Februar.

—, *Boundary integral equations on curves with cusps*, 10. Februar.

I. EDELMAN, Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau, *Surface waves*, 5. Juli.

M. EFENDIEV, Akademie der Wissenschaften Aserbaidshans, Baku, *Exponential attractors for reaction diffusion systems without squeezing property*, 21. Dezember.

S. EICHLER, Freiburger Compound Materials GmbH, *Industrielle Probleme der Kristallzucht*, 20. November.

U. ERBEN, TEMIC Semiconductor GmbH, Ulm, *Simulationstechniken im Hochfrequenzschaltungsentwurf*, 5. Juni.

T. ERNEUX, Freie Universität Brüssel, Belgien, *Bifurcation studies of semiconductor lasers subject to delayed optical feedback*, 26. Juni.

P. FABRIE, Universität Bordeaux 1, Frankreich, *Some recent results in micromagnetism*, 26. April.

M. FENGLER, Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Wirtschaftswissenschaften, *The implied volatility surface: A common principle components approach*, 8. November.

M. FETTE, Universität-Gesamthochschule Paderborn, *Anwendungen der „Continuation Method“ zur Analyse nichtlinearer Elektroenergiesysteme — Potentiale und Probleme*, 28. Februar.

U. FEUDEL, Universität Potsdam, *Multistability and attractor hopping in weakly dissipative systems*, 11. Juli.

S. FOTI, Politecnico di Torino, Italien, *Multistation methods for geotechnical characterization using surface waves*, 16. November.

G. FRAHM, West-Landesbank Düsseldorf, *Sinn und Unsinn bei der Ermittlung des Value-at-Risk mit Methoden der Extremwerttheorie*, 20. Dezember.

M. FREIDLIN, University of Maryland, College Park, USA, *Reaction-diffusion in incompressible fluid*, 8. November.

M. FRÉMOND, Laboratoire Lagrange, Paris, Frankreich, *Collisions of solids and fluids*, 11. Oktober.

G. GIELIS, King's College, Cambridge, Großbritannien, *Coupled map lattices with phase transition*, 13. Dezember.

S. GONCHENKO, Institut für Angewandte Mathematik und Kybernetik, Nizhny Novgorod, Russland, *On Andronov-Hopf bifurcations near homoclinic tangencies*, 20. Januar.

L. GOROSTIZA, Academia Mexicana de Ciencia, Mexiko, *Occupation time fluctuations of two-level branching systems*, 25. Oktober.

M. GROVES, Universität Stuttgart, *Hamiltonian spatial dynamics methods for 3D water waves*, 9. Mai.

H. HAAF, Dresdner Bank, Frankfurt am Main, *Ein realistisches Value-at-Risk-Maß im Hinblick auf Performance-Aspekte*, 13. März.

S. HANDROCK-MEYER, Technische Universität Chemnitz, *Further examples for model reduction by extended quasi-steady state approximation*, 24. August.

K.-H. HASLER, Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik, Berlin, *Anwendung des TWE-Modells auf DBR-Laser*, 30. November.

O. HEINTZE, Technische Universität Berlin, *Präsentation der Simulation von Formgedächtnisverhalten im Internet*, 14. Juni.

M. HOFFMANN, Universität Paris VI, Frankreich, *Some results on estimation in diffusion models from discrete data*, 29. November.

A. HOFMANN, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Berlin, *Theoretische Beschreibung des SBI-Versuchs (Single Burning Item)*, 26. Januar.

TH. HOHAGE, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, *Inverse medium scattering problems: Stability and numerical solution*, 23. August.

R. HÖPFNER, Universität Mainz, *On limit theorems for null recurrent Markov processes*, 29. November.

M. HUNKEL, Stiftung Institut für Werkstofftechnik, Bremen, *Simulation des Härtens von Stahlbauteilen*, 9. Oktober.

P. IMKELLER, Humboldt-Universität zu Berlin, *Konjugation stochastischer und zufälliger Differentialgleichungen und Attraktoren*, 20. Juni.

M. JANZURA, Karls-Universität Prag, Tschechische Republik, *On the pseudolikelihood principle in the statistical inference for Gibbs random fields*, 7. Juni.

J. JÄRVINEN, CSC-Scientific Computing Ltd., Espoo, Finnland, *Recent-modeling and computing developments in Czochralski silicon crystal growth at CSC*, 25. September.

J. JOHANNES, Humboldt-Universität zu Berlin, *Selfinformative limits of Bayes estimates in multivariate models*, 12. Januar.

O. JOHN, Karls-Universität Prag, Tschechische Republik, *Regularity — some elliptic and parabolic counterexamples*, 31. Mai.

M. JUNK, Universität Kaiserslautern, *Ersetzung von kinetischen Gleichungen durch Momentensysteme. Teil 3*, 7. Juni.

I. KAMOTSKI, Steklov-Institut für Mathematik, St. Petersburg, Russland, *Asymptotic analysis of surface waves on periodic structures*, 17. Februar.

O. KASTNER, Technische Universität Berlin, *Vorschläge zur martensitischen Transformation unter Last*, 3. Mai.

N. KENMOCHI, Chiba University, Japan, *Mathematical treatment of phase separation and order-disorder transition in binary mixtures*, 12. Juli.

A. KHLUDNEV, Russische Akademie der Wissenschaften, Novosibirsk, Russland, *On an equilibrium problem for a cracked body with electrothermoconductivity*, 16. Februar.

B. N. KHOROMSKII, Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig, *\mathcal{H} -matrix approximation and preconditioning to nonlocal (integral) operators*, 13. November.

R. KIESEL, London School of Economics, Großbritannien, *Analytic approximations for credit risk models (more on credit risk models)*, 17. Mai.

W. KIM, Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Wirtschaftswissenschaften, *A local instrumental variable estimation method for generalized additive volatility models*, 22. November.

M. KIRKILIONIS, Universität Heidelberg, *Modeling of cell populations with internal structure*, 13. April.

P. KLEINERT, Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik, Berlin, *Quantentransport in Übergittern*, 6. November.

TH. KLETSCHKOWSKI, Universität der Bundeswehr Hamburg, *Experimentelle Untersuchungen zum Plastic-Memory-Effekt von PTFE Compounds*, 7. November.

CHR. KLINGENBERG, Universität Würzburg, *Micro- and macroscopic traffic models via a Boltzmann-type equation*, 3. November.

A. KOROSTELEV, Wayne State University, Detroit, USA, *Minimax rates in image reconstruction under sequential designs*, 6. Dezember.

I. KOURKOVA, Universität Paris VI, Frankreich, *Fluctuations of the free energy in Gaussian spin glasses: The REM and the p -spin SK model*, 22. November.

R. KRAUSE, Freie Universität Berlin, *Mehrgitterverfahren auf dem uneingeschränkten Produktraum von Mortar Diskretisierungen*, 10. Juli.

B. KRAUSKOPF, University of Bristol, Großbritannien, *How to find chaos in lasers*, 25. Oktober.

C. LAI, Institut für Geotechnik, Mailand, Italien, *Some peculiarities of surface wave propagation in continuous, heterogeneous media*, 12. Dezember.

R. LANCELLOTTA, Politecnico di Torino, Italien, *Constitutive relations for granular materials*, 16. November.

ST. LANG, Universität München, *Bayesianische Inferenz für generalisierte additive gemischte Modelle basierend auf Glattheitsprioris*, 21. Juni.

L. LERMAN, Freie Universität Berlin, *Dynamics and exponentially small phenomena in singularly perturbed Hamiltonian systems*, 23. Mai.

H. LESCHKE, Universität Erlangen-Nürnberg, *Schrödinger-Operatoren mit Zufallspotential und konstantem Magnetfeld*, 12. Juli.

D. LOGASHENKO, Universität Heidelberg, *Parameter estimation for Bingham models*, 29. November.

ST. LUDING, Universität Stuttgart, Mathematisches Institut A, *Statistical physics for hard sphere fluids and granular media*, 4. Oktober.

Y. MAISTRENKO, Nationale Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Kiew, *Loss of coherence in a system of globally coupled maps*, 24. Oktober.

E. MAMMEN, Universität Heidelberg, *Backfitting for additive models: Asymptotic theory and bandwidth choice*, 12. Juli.

S. MARTÍNEZ, Universidad de Chile, Santiago, *Asymptotic mean-time behaviour of group automata*, 18. Oktober.

J. G. MCINERNEY, University College Cork, Irland, *Suppression of filamentation in large aperture semiconductor lasers*, 16. Juni.

D. MERCURIO, Humboldt-Universität zu Berlin, *Optimal model selection and forecasting for time series*, 12. Januar.

K. MIKULA, Slowakische Technische Universität, Bratislava, *Nonlinear degenerate parabolic PDEs in processing of 3D image sequences*, 14. Dezember.

A. J. MILANI, University of Wisconsin – Milwaukee, USA, *A singular perturbation approach to global existence for quasilinear evolution equations*, 5. April.

U. MÜLLER, Universität Olsen, Schweiz, *Volatilität von Hochfrequenzdaten: Messgröße oder Modellvariable?*, 10. Mai.

W. MÜLLER, Heriot-Watt University, Edinburgh, Großbritannien, *Morphologieänderungen in Sn-Pb-Loten*, 19. April.

—, *Kühlung durch Phasenübergang*, 13. Dezember.

L. MYTNIK, Technion Haifa, Israel, *Hard killing branching model*, 19. Juli.

E. G. NG, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, USA, *New ideas for solving sparse nonsymmetric linear systems*, 17. August.

A. NOE, Forschungs- und Entwicklungszentrum Unterlüß GmbH, *Quantitative numerische Auswertung von STM-Messungen an einem CF-Composite*, 27. März.

J. NORRIS, University of Cambridge, Großbritannien, *Spatial models in coagulation*, 6. Dezember.

M. OHLBERGER, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, *A posteriori error estimates for finite volume approximations of scalar conservation laws and singularly perturbed problems*, 10. Februar.

I. OLKIN, Stanford University, USA, *Measures of discrepancy between treatment and control*, 19. April.

A. PANKOV, zurzeit Justus-Liebig-Universität Gießen, *Mathematics of photonic crystals*, 8. März.

—, *Multiplicity for stationary nonlinear Schrödinger equation with a deep potential well*, 21. Juni.

—, *Standing waves in discrete nonlinear systems*, 22. Juni.

L. A. PELETIER, Universität Leiden, Niederlande, *Recent development in Swift-Hohenberg equation*, 25. April.

S. V. PEREVERZEV, Nationale Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Kiew, *On the information complexity of severely ill-posed problems*, 16. Oktober.

W. POLASEK, Universität Basel, Schweiz, *Bayesian causality measures for multiple ARCH models using marginal likelihoods*, 19. April.

J. POLEWCZAK, California State University, Department of Mathematics, Northridge, USA, *Mathematical problems of dense gases: The square-well kinetic theory*, 1. November.

V. PUKHNACHOV, Russische Akademie der Wissenschaften, Novosibirsk, *Free boundary problems for the Navier-Stokes equations: Non-local results in small dimensions*, 4. Januar.

E. RADKEVICH, Staatliche Universität Moskau, Russland, *On weak convergence in models in porous media*, 27. Juni.

—, *Introduction into asymptotic methods on the example of a generalized Korteweg-de Vries equation*, 9., 10. und 11. August.

L. RECKE, Humboldt-Universität zu Berlin, *Synchronisation modulierter Wellenlösungen*, 18. Mai.

D. REITEBUCH, Technische Universität Berlin, *Wärmeleitung mit vielen Momenten*, 5. Januar.

M. REUSS, Universität Stuttgart, *Neue Herausforderung für die mathematische Modellierung biologischer Systeme — Übersetzung von linearer Sequenzinformation in nichtlineare Zelldynamik*, 8. Mai.

- J.-M. ROQUEJOFFRE, Université Paul Sabatier, Toulouse, Frankreich, *A nonlinear oblique derivative problem for the heat equation: Analogy with the porous medium equation*, 18. Oktober.
- E. SANTNER, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Berlin, *Reibung — ein Phänomen stochastischer Prozesse*, 18. Dezember.
- A. SCHEEL, Freie Universität Berlin, *Stability and instability of spiral waves*, 30. Mai.
- G. SCHIMPERNA, Universität Pavia, Italien, *Some results on phase separation models with thermoelastic effects*, 13. Dezember.
- J. SCHÖBERL, Universität Linz, Österreich, *Robust multigrid methods for parameter dependent problems*, 11. Mai.
- P. SCHÖNBUCHER, Universität Bonn, *A market model for stochastic implied volatility*, 31. Mai.
- L. SIMON, Eötvös-Loránd-Universität, Budapest, Ungarn, *On stability of solutions to nonlinear functional differential equations*, 12. Januar.
- I. V. SKRYPNIK, Nationale Akademie der Wissenschaften der Ukraine, Donetsk, *Asymptotical behaviour of solutions of nonlinear elliptic and parabolic problems in perforated domains*, 19. Juli.
- R. SLAMA, INSERM, Paris, Frankreich, *Nonparametric and parametric analyses of the risk of spontaneous abortion. An epidemiological study with longitudinal data*, 18. Oktober.
- I. H. SLOAN, The University of New South Wales, Sydney, Australien, *Solving parabolic problems without time-stepping*, 5. Oktober.
- V. SOBOLEV, Staatliche Universität Samara, Russland, *Traveling wave solution of Canard type*, 23. November.
- ST. SPERLICH, Universität Carlos III, Madrid, Spanien, *Semiparametric estimation of weak and strong separable models*, 21. Juni.
- , *Structural tests in additive regression*, 13. Dezember.
- U. STEFANELLI, Universität Pavia, Italien, *On a class of nonlocal evolution equations: Analysis, approximation and applications*, 22. September.
- O. STENKIN, Institut für Angewandte Mathematik und Kybernetik, Nizhny Novgorod, Russland, *Two-dimensional diffeomorphisms with infinitely many non-trivial attractors and repellers*, 14. November.
- R. STÖVER, Universität Bremen, *Kollokationsverfahren für lineare differential-algebraische Randwertprobleme*, 30. November.
- V. STRYGIN, Staatliche Universität Voronesh, Russland, *Partial averaging and periodic solutions of functional differential equations*, 9. März.
- K. SUNDMACHER, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, *Einsatz mathematischer Methoden in der System-Verfahrenstechnik*, 10. April.

V. TRONCIU, Technische Universität Moldawien, Chisinau, *Excitability of single mode dispersive reflector laser*, 20. Dezember.

CH. VILLA, Universität Rennes I, Frankreich, *Market models of volatility revisited*, 3. Mai.

M. VISHIK, Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau, Russland, *Attractors for equations of mathematical physics with rapidly oscillating terms*, 13. Juni.

A. VISINTIN, Universität Trento, Italien, *Models of phase relaxation*, 15. Juni.

S. VOLKWEIN, Karl-Franzens-Universität Graz, Österreich, *Über das Lagrange-Newton-SQP-Verfahren für die Optimalsteuerung der Burgers-Gleichung*, 23. Februar.

R. VON SACHS, Universität Louvain-la-Neuve, Belgien, *Nonparametric stochastic regression with design-adapted wavelets*, 15. November.

M. WOLF, Universität Carlos III, Madrid, Spanien, *Subsampling inference in threshold autoregressive models*, 6. Dezember.

L. XIAO, Academia Sinica, Peking, China, *Mathematical modelling and analysis for semiconductors*, 24. Februar.

J. XIONG, University of Tennessee, Knoxville, USA, *Large deviation principle for Fleming–Viot process*, 28. Juni.

M. YAMAMOTO, Universität Tokio, Japan, *Overview to stability and uniqueness in inverse problems for PDE's — solved and unsolved problems*, 30. März.

—, *Inverse problem of diffractive optics; conditional stability*, 6. Oktober.

Y. YAMAMOTO, Hokkaido University, Sapporo, Japan, *Dynamic statistical graphics on the web*, 5. Juli.

S. V. ZELIK, Institut für Probleme der Informationsübertragung, Moskau, Russland, *The dynamics of fast non-autonomous travelling waves and homogenization*, 23. März.

—, *Damped nonlinear hyperbolic equations in unbounded domains and their attractors*, 19. April.

—, *Spatial and dynamical chaos generated by reaction-diffusion systems in unbounded domains*, 23. November.

H. G. ZIMMERMANN, Siemens AG, München, *Neuronal networks in economic principles, techniques and applications in learning, forecasting and decision support*, 2. Januar.

6.11 Mitveranstaltung auswärtiger Tagungen

E. BÄNSCH, Mitglied des Wissenschaftlichen Programmkomitees, *ALGORITMY 2000, Conference on Scientific Computing*, Podbanské, Slowakei, 10. – 15. September.

—, Mitglied des Organisationskomitees, *VIIIth Workshop on Numerical Methods for Free Boundary Problems (Interphase 2000)*, Freie Universität Berlin, 5. – 7. Oktober.

A. BOVIER, Organisation einer „Invited paper session“ „Statistical Mechanics of Disordered Systems“, *5th World Congress of the Bernoulli Society for Probability and Mathematical Statistics and 63rd Annual Meeting of the Institute of Mathematical Statistics*, Guanajuato, Mexiko, 15. – 20. Mai.

—, Leitung der Sektion „Stochastische Modelle der Biologie und Physik“, *Hamburger Stochastik-Tage 2000*, Universität Hamburg, 21. – 24. März.

H. GAJEWSKI, Organisation der Sektion „Evolutionsgleichungen“, *Konferenz „Trends in Nonlinear Analysis — Theory, Modelling and Computation“*, Heidelberg, 9. – 12. Oktober.

K. GRÖGER, Mitglied des Wissenschaftlichen Beirats, *International Summer School on Evolution Equations (EVEQ 2000)*, Prag, Tschechische Republik, 3. – 7. Juli.

G. HEBERMEHL, Mitglied des Internationalen Wissenschaftlichen Beirats, *Scientific Computing in Electrical Engineering (SCEE 2000)*, Warnemünde, 20. – 23. August.

R. HENRION, A. MÖLLER, Mitorganisator, *DECHEMA-Weiterbildungskurs „Optimierung verfahrenstechnischer Prozesse“*, Technische Universität Berlin, 4. – 6. September.

P. KREJČÍ, Mitglied des Organisationskomitees, *International Summer School on Evolution Equations (EVEQ 2000)*, Prag, Tschechische Republik, 3. – 7. Juli.

J. SPREKELS, Mitglied der Tagungsleitung, *Tagung „Optimale Steuerung komplexer dynamischer Strukturen“*, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, 4. – 10. Juni.

—, Mitglied des Organisationskomitees, *VIIIth Workshop on Numerical Methods for Free Boundary Problems (Interphase 2000)*, Freie Universität Berlin, 5. – 7. Oktober.

W. WAGNER, Organisation und Leitung der Special Session „Stochastic particle systems and coagulation equations“, *International Conference on Monte Carlo and probabilistic methods for partial differential equations*, Monte Carlo, Monaco, 3. – 5. Juli.

6.12 Produkte

COG (Kontakt: I. Schmelzer, Tel.: 030/20372-463)

COG ist ein Paket zur Generierung von Geometriebeschreibungen und Gittern. Der Gittergenerator ermöglicht die vollautomatische Erzeugung von Delaunay-Gittern in 1D, 2D und 3D. Er erlaubt es, die Gitterdichte lokal und richtungsabhängig zu steuern. COG gestattet eine einfache Erzeugung und Veränderung auch sehr komplizierter Geometrien.

COG ist eine Neuimplementierung und Weiterentwicklung des Gittergenerators IBG.

Ausführliche Informationen: <http://www.wias-berlin.de/research/groups/nummath/projects/cog>

ClusCorr98[®] — **Statistiksoftware zur Clusteranalyse, Klassifikation und Datenanalyse mit Erweiterungen zur modellbasierten Clusteranalyse** (Kontakt: J. Mucha, Tel.: 030/20372-573)

Die Statistiksoftware ClusCorr98[®] extrahiert Wissen aus umfangreichen und hochdimensionalen Datenmengen hauptsächlich mit adaptiven Methoden der Clusteranalyse, Klassifikation und multivariaten Graphik. Sowohl numerische als auch alphanumerische Informationen können verarbeitet werden. Die Ergebnisse werden mit statistischen Simulationstechniken bewertet. Durch die Visualisierung von Daten und Ergebnissen soll das Verständnis für Daten und angewandte Methoden erhöht und die Hypothesensuche erleichtert werden. Über die Excel-Umgebung der in Visual Basic for Applications (VBA) geschriebenen Software ist der Zugriff auf interne oder externe Datenbanken realisiert. Im Rahmen der computerorientierten Statistik wurden die Arbeiten an der Statistiksoftware ClusCorr98[®] insbesondere mit dem Schwerpunkt *modellbasierte Methoden der Clusteranalyse* fortgesetzt. Durch spezifische Annahmen über die Kovarianzstrukturen in den unbekanntenen Klassen können Ergebnis und Stabilität der Clusteranalysen verbessert werden. Diese Erweiterungen resultieren aus Anforderungen der Praxis und werden in realen Anwendungsprojekten, z. B. in der Archäometrie, eingesetzt. Die Statistiksoftware ClusCorr98[®] ist unter Windows lauffähig.

Nähere Informationen: <http://www.wias-berlin.de/products/cluscorr>

DIPOG, Direkte und inverse Probleme bei optischen Gittern (Kontakt: G. Schmidt, Tel.: 030/20372-456)

Das System dient zur Simulation und Optimierung von periodischen Beugungsgittern. Beim direkten Problem werden die Beugungseffizienzen von vorgegebenen periodischen diffraktiven Strukturen für TE- und TM-Polarisation sowie die konische Diffraktion berechnet. Beim inversen Problem wird der optimale Entwurf von Beugungsgittern behandelt, die vorgegebene Funktionen, z. B. Effektivitätsverläufe oder Phasenverschiebungen, realisieren sollen. Dabei wird ein Zielfunktional konstruiert, für das über einer Klasse von zulässigen Gittergeometrien ein Minimum mittels Gradientenabstiegsverfahren gesucht wird. Mit der implementierten Software lassen sich binäre periodische Strukturen in Dünnschichtsystemen bei beliebigen Einfallswinkeln des Lichtstrahls modellieren und optimieren.

Nähere Informationen unter: <http://www.wias-berlin.de/research/projects/optik>

glttools (Kontakt: J. Fuhrmann, Tel.: 030/20372-560)

glttools wurde entwickelt, um die speziellen Bedürfnisse der Entwickler von Numerik-Codes zufrieden zu stellen. Die Toolbox zur Entwicklung von OpenGL-basierten Graphikausgaben kann problemlos zur Erweiterung vorhandener Codes mit interaktiver 3D-Graphik eingesetzt werden.

Ausführliche Informationen finden sich unter: <http://www.wias-berlin.de/~gltools>

LDSL-Tool, Longitudinale Dynamik in Halbleiterlasern (Kontakt: M. Radziunas, Tel.: 030/20372-441)

Das Softwarepaket *LDSL-Tool* (**L**ongitudinal **D**ynamic in **S**emiconductor **L**asers) wurde zur numerischen Untersuchung und Simulation von raum-zeitlichen dynamischen Effekten in kantenemittierenden Mehrsektions-Halbleiterlasern entwickelt.

Wir setzen voraus, dass das elektrische Feld durch zwei gegenläufige Wellen entlang der Längsachse des Bauelementes beschrieben werden kann. Die zeitliche Entwicklung dieser Wellen wird durch ein System hyperbolischer partieller Differentialgleichungen modelliert, das nichtlinear mit einem System gewöhnlicher Differentialgleichungen für die Dynamik der Ladungsträger gekoppelt ist.

Zur Integration dieser Gleichungen für verschiedene Laser-Konfigurationen stehen mehrere numerische Verfahren zur Verfügung. Darüber hinaus ist es möglich, die longitudinalen Moden des elektrischen Feldes zu berechnen sowie ein vereinfachtes System gewöhnlicher Differentialgleichungen auf der Basis einer Modenreduktion des ursprünglichen Modells zu benutzen.

Weitere Informationen unter: <http://www.wias-berlin.de/research/groups/dynsys/projects/pro1>

NUMATH (Kontakt: G. Hebermehl, Tel.: 030/20372-562)

Das Programmpaket NUMATH umfasst Verfahren der numerischen Mathematik für die Aufgabenklassen:

| | |
|--|--|
| lineare Gleichungssysteme, | Minimierung einer Funktion in einer oder mehreren Variablen, |
| lineare Ausgleichsrechnung, | nichtlineare, quadratische und lineare Optimierung, |
| Eigenwertaufgaben, | gewöhnliche Differentialgleichungen (Anfangs- und Randwertaufgaben), |
| Polynom-, Spline- und trigonometrische Interpolation, | Volterra'sche und Fredholm'sche Integralgleichungen, |
| numerische Berechnung einfacher und mehrfacher Integrale, | elementare und spezielle Funktionen, |
| nichtlineare Gleichungen in einer Variablen, | partielle Differentialgleichungen. |
| nichtlineare und überbestimmte nichtlineare Gleichungssysteme, | |

Die hierarchische Struktur des in FORTRAN IV implementierten Programmpaketes besteht aus Solvern, Basismoduln sowie Elementarmoduln (Level 1) und Moduln zur Matrixmanipulation.

Die Aufgabenklassen und Quellmoduln sind umfangreich dokumentiert.

Mit der NUMATH-Testbibliothek kann die Lauffähigkeit des Paketes geprüft werden.

Weitere Informationen unter: <http://www.wias-berlin.de/~NUMATH>

pdelib (Kontakt: J. Fuhrmann, Tel.: 030/20372-560)

pdelib ist eine Kollektion von Softwarekomponenten für die Erstellung von Simulationscodes auf der Basis von partiellen Differentialgleichungen. Hauptmerkmal der Kollektion ist die mit Hilfe eines schnittstellenorientierten Bottom-up-Designs erreichte Modularität. Die Nutzerschnittstelle basiert auf der Skriptsprache *lua*. Moderne 3D-Graphikhardware kann für Online-Visualisierung und softwarebasierte Videoaufzeichnung der Resultate genutzt werden.

Ausführliche Informationen finden sich unter: <http://www.wias-berlin.de/~pdelib>

WIAS-TeSCA (Kontakt: R. Nürnberg, Tel.: 030/20372-570)

WIAS-TeSCA (Two and three 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 WIAS-TeSCA sind sowohl für den stationären als auch für den zeitabhängigen Fall sehr effiziente numerische Verfahren implementiert. Die Finite-Elemente-Methode gestattet, weitgehend beliebige räumlich zweidimensionale Strukturen zu behandeln.

WIAS-TeSCA wird erfolgreich in der halbleiterphysikalischen Forschung und in der Mikroelektronik bei der Entwicklung von Transistoren, Dioden, Sensoren, Detektoren und Lasern eingesetzt.

Der Bauelementesimulator arbeitet in einer UNIX-Umgebung auf Workstations und ist für verschiedenste Rechnerarchitekturen verfügbar (SUN SPARC, IBM RS 6000, HP 9000/700, DEC Alpha/OSF1, SGI, Linux 486 PC).

Nähere Informationen: <http://www.wias-berlin.de/products/tesca>

6.13 Drittmittelprojekte

Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

- **Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft¹**
 - „Modellierung und Simulation von hochsperrenden Bauelementen für Schaltkreise der angesteuerten Leistungselektronik“ (FG 1)
 - „Modellierung und Simulation verspannter Quantenschichten in Halbleiterlasern“ (FG 1)
 - „Entwicklung von adaptiven Lösungsstrategien und effizienten Auflösungsverfahren für die numerische Simulation unterirdischer Strömungs- und Transportprozesse in räumlich dreidimensionalen Gebieten“ (FG 3)
 - „Simulation dynamischer Prozesse in chemischen Anlagen“ (FG 3)
 - „Analytische und numerische Behandlung direkter und inverser Probleme für diffraktive Strukturen“ (FG 4)
 - „Entwicklung der mathematischen Grundlagen für ein neues Ultraschallpuls-messverfahren“ (FG 6)
 - „Optimale Steuerung der Sublimationszüchtung von SiC-Kristallen“ (FG 1)
 - „3D-Simulation von Halbleiterdetektoren“ (FG 1)
 - „Modellierung, Analyse und Simulation des Widerstands-Impulsschweißens“ (FG 1)
 - „Numerische Verfahren zur Parameterschätzung bei Pasten und zur Formoptimierung“ (FG 4)

DAAD

- VIGONI (FGn 1, 7)
- INIDA (FG 2)
- Studienaufenthalte ausländischer Wissenschaftler in der Bundesrepublik Deutschland (NATO) (FG 2)

Deutsche Forschungsgemeinschaft, Bonn

- „Hysterese-Operatoren in Phasenfeld-Gleichungen“ (FG 1)
- „Adaptive Multiskalenmethoden zur Lösung von Randintegralgleichungen“ (FG 4)
- „Zur Analysis von thermodynamischen Modellen des Stoff-, Ladungs- und Energietransports in heterogenen Halbleitern“ (FG 1)
- „Kopplung von van Roosbroeck- und Schrödinger-Poisson-Systemen mit Ladungsträger-austausch“ (FG 1)

¹<http://www.wias-berlin.de/research/projects>

- „Finite-Integrations-Methode mit Tetraedergitter zur elektromagnetischen Simulation von Mikrowellenschaltungen“ (FG 3)
- „Effektive Steuerung von stochastischen Partikelverfahren für Strömungen in verdünnten Gasen“ (FG 5)
- „Kinetische Lösungen für ausgewählte hyperbolische Anfangs- und Randwertprobleme“ (FG 7)
- „Inverse Modellierung von Strömungs- und Transportvorgängen im heterogenen Untergrund auf der Basis von Mehrgitterverfahren“ (FG 4)
- Schwerpunktprogramm: „Halbleiterbauelemente hoher Leistung“ (FG 1)
- Schwerpunktprogramm: „Interagierende Stochastische Systeme von hoher Komplexität“ (FG 5)
- Schwerpunktprogramm: „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“ (FG 2)
- Schwerpunktprogramm: „Echtzeitorientierung großer Systeme“ (FG 4)
- Schwerpunktprogramm: „Analysis und Numerik von Erhaltungsgleichungen“ (FG 1)
- Schwerpunktprogramm: „Analysis, Modellbildung und Simulation von Mehrskalensystemen“ (FGn 1, 3, 4, 7)
- Kooperationsprojekt zum Thema „Singulär gestörte Systeme und Stabilitätswechsel“ deutscher und russischer Wissenschaftler im Rahmen des *Memorandum of Understanding* zwischen DFG und RFFI (FG 2)
- Sonderforschungsbereich 373, Humboldt-Universität zu Berlin, „Quantifikation und Simulation ökonomischer Prozesse“ (FG 6)
- Sonderforschungsbereich 555, Humboldt-Universität zu Berlin, „Komplexe Nichtlineare Prozesse“ (FG 1)
- Graduiertenkolleg Technische Universität Berlin, „Stochastische Prozesse und Probabilistische Analysis“ (FGn 5, 6)
- Wissenschaftleraustausch mit der Ukraine (FG 6)
- Wissenschaftleraustausch mit Turkmenistan (FG 6)

Alexander von Humboldt-Stiftung

- zwei Stipendiaten (FGn 1, 7)

Internationale Projekte

- (EU) HCM: „Stochastic Analysis“ (FG 5)

- **(EU) INTAS:** „Development of constructive and numerical methods for solving nonlocal linear and nonlinear problems for partial differential equations“ (FG 4)
- **(EU) INTAS:** „Stochastic models of nucleation, transformation and transport of aerosol particles in the turbulent atmosphere“ (FG 6)
- **(EU) INTAS:** „Random walk models for the footprint problem in the turbulent atmosphere“ (FG 5)
- **(EU) TMR:** „Breakthrough in the control of nonlinear systems“ (FG 2)
- **NATO Linkage Grant:** „Stochastic modelling of aerosol particle transport and reacting pollutants in the atmosphere“ (FG 6)

Stiftung Industrieforschung

- „Numerische Simulation von Temperaturfeldern bei der Strahlbearbeitung von kompliziert geformten Bauteilen“ (FG 1)

Auftragsforschung

- Bankgesellschaft Berlin AG: „Monte-Carlo-Simulation“ (FG 6)
- BAYER AG, Leverkusen: „Kontrastverstärkung von Mustern in Datensätzen und Zeitreihen“ (Studie) (FG 2)
- Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Berlin: „Statistische Betreuung von Ringversuchen“ (FG 6)
- EEG — Erdgas Erdöl GmbH, Berlin: „Klassifikation geologischer Strukturen“ (FG 6)
- ein schwäbisches Softwarehaus für Produktionsplanung „Bahnplanung für Industrieroboter und Menschmodelle“ (FG 4)
- Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik, Berlin: „Simulation von Mikrowellschaltungen“ (FG 3)
- Forschungszentrum Jülich: „Numerische Simulation von Methanol-Brennstoffzellen (DMFC)“ (FGn 3, 7)
- Freiburger Compound Materials GmbH: „Spannungs- und Dehnungsanalyse an GaAs-Waferplatten“ (FG 7)
- Motorola Advanced Interconnect Systems Laboratory, München: „Simulation eines zwei-phasigen Kühlsystems“ (FG 7)
- Robert Bosch GmbH, Stuttgart: „Numerische Simulation von Sauerstoffsensoren“ (FG 3)
- Science & Tec, Paris, Frankreich: „Approche statistique des évaluations des accidents APRP grosse brèche“ (FG 5)
- Technische Universität Delft, Projekt NWO, Niederlande: „LIBOR Zinsderivate, Zinsmodelle und Kalibration“ (FG 6)

Index

Projektbearbeiter

| | |
|--------------------------|------------------------------|
| B. Albers | 127 |
| G. Albinus | 24 |
| E. Bänsch | 47 |
| U. Bandelow | 14, 139 |
| D. Baum | 104 |
| J. Borchardt | 55 |
| A. Bovier | 81, 83, 85 |
| I. Bremer | 72 |
| W. Dreyer | 118, 120, 123, 125, 137, 142 |
| F. Duderstadt | 120, 125, 142 |
| M. A. Efendiev | 136 |
| K. Ehrhardt | 55 |
| A. Eibeck | 90, 92 |
| G. Bruckner | 63 |
| J. Elschner | 63 |
| K. Fleischmann | 87 |
| J. Fuhrmann | 47, 49, 136 |
| K. Gärtner | 49 |
| H. Gajewski | 14, 24, 144 |
| B. Gentz | 85 |
| A. Glitzky | 17 |
| J. A. Griepentrog | 19 |
| F. Grund | 55 |
| G. Hebermehl | 51 |
| R. Henrion | 67 |
| M. Herrmann | 118 |
| R. Hinder | 63 |
| D. Hömberg | 22, 142 |
| D. Horn | 55 |
| F.-K. Hübner | 51, 61 |
| R. Hünlich | 17, 24 |
| S. Jaschke | 95, 104 |
| C. Külske | 81 |
| H.-Chr. Kaiser | 14, 19, 139, 144 |
| O. Klein | 133 |
| Th. Koprucki | 139 |
| P. Krejčí | 27 |
| M. Kunik | 118, 137 |
| J.-H. Zacharias-Langhans | 104, 108 |
| H. Langmach | 144 |
| A. Liemant | 89 |
| P. Mathé | 95, 108 |
| I. Matheis | 92 |

| | |
|-----------------|--------------------|
| W. Metzner | 108 |
| G. N. Milstein | 95, 104, 108 |
| A. Möller | 67 |
| H.-J. Mucha | 95 |
| H. Neidhardt | 19 |
| J. Niebsch | 79 |
| R. Nürnberg | 144 |
| M. Petzoldt | 47 |
| P. Philip | 133 |
| J. Polzehl | 95 |
| M. Radziunas | 34 |
| A. Rathsfeld | 77 |
| J. Rehberg | 19, 139 |
| G. Reinhardt | 61 |
| O. Reiß | 104 |
| W. Röpke | 24 |
| K. K. Sabelfeld | 108 |
| J. Schefter | 51 |
| R. Schlundt | 51 |
| I. Schmelzer | 59 |
| G. Schmidt | 63, 79 |
| K. R. Schneider | 34, 43 |
| J. Schoenmakers | 104 |
| V. Schulz | 70, 72, 74, 75 |
| J. Sieber | 34 |
| M. Siegfanz | 27 |
| V. Spokoiny | 95 |
| J. Sprekels | 27, 30, 133, 137 |
| H. Stephan | 14, 24 |
| D. Tiba | 30 |
| J. Tseng | 74 |
| D. Turaev | 34, 40 |
| M. Uhle | 51 |
| W. Wagner | 90, 92 |
| W. Weiss | 22 |
| K. Wilmański | 127, 129, 131, 133 |
| M. Wolfrum | 34, 136 |

A

| | |
|---------------------------------|-----|
| a priori-Abschätzungen | 18 |
| Absorbing-Boundary-Bedingungen | 51 |
| Algebro-Differentialgleichungen | 46 |
| Altern | 85 |
| Anfangs- und Randwertprobleme | 118 |
| anisotrope Materialien | 120 |
| anisotrope Phasengrenzfläche | 125 |

- Arsen-Ausscheidung 125
 asymptotische Unter- und Oberlösungen 44
 atomaren Kette 137
 Attraktor
 endlichdimensionaler 136
- B**
- Bahnplanung 72
 Bandstruktur 24
 Beugungseffektivitäten 64
 Bifurkationsanalyse 36
 Bifurkationsverzögerung 86
 Bilanzgleichungen 118
 Bingham-Strömung 70
 Block-QMR-Methode 52
 Boltzmann-Gleichung 92, 118
 Boltzmann-Peierls-Gleichung 117
 Boltzmann-Statistik 24
 Brennstoffzelle 49
 Brown'sche Teilchen 118
 Bruchtest 120
- C**
- Cahn-Hilliard 125
 Calmness 68
 ClusCorr98[®] 210
 Clusteranalyse 100
 Clusterentwicklung 81
 COG 210
- D**
- Destillationskolonne 67
 diffraktive Strukturen 63
 Dimension
 kritische 87
 DIPOG 210
 DMFC 49
 dreidimensionales Randwertproblem . . 51
- E**
- einkristalline Waferplatte 116
 empirische Maße 90
 Energieabschätzungen 17, 18
 Energiemodell 24
 Entropiefluss 127
 Erhaltungsgleichungen 134
 Erregbarkeit 36
 Euler-System 118
- Existenzaussagen 90
- F**
- FEFLOW 47
 Fehlerschätzer 47
 Fermi-Dirac-Statistik 24
 Filterdesign 74
 Finite Elemente 47
 Fluktuationen 83
 Fokker-Planck-Gleichung 117–119, 126
 freier Rand 133
- G**
- Gain-Dispersion
 nichtlineare 34
 Gallium-Arsenid 116, 120, 125
 Gauß'scher Prozess 83
 gekrümmte Stäbe 31
 Gelation 90
 Gibbs-Eigenschaften 81
 gltools 210
 granulare Stoffe 129, 131
- H**
- Halbleiter-Power-Modul 123
 heterokline Orbits 136
 Heterostrukturen 17
 homokline Berührungen 40
 Hoppingtransport 89
 hyperbolisches System 116, 118, 138
 Hystereseoperatoren 27
- I**
- ideales Gas 118, 119
 Image-Processing 61
 inverses Problem 89
 isotropes Material 121
- K**
- Kennlinien 24
 kinetische Gleichung 116
 Kirchhoff-Love-Modell 30
 konische Diffraktion 64
 Kontinuitätsgleichungen 17
 Korteweg-deVries-Gleichung 138
- L**
- Lagrange'sche Koordinaten 120
 Lagrange'sche relative Geschwindigkeit 127

- LDSL-Tool 211
 Leistungselektronik 24
 LIBOR-Zins 104
 linearer Löser GSPAR 56
 Lippmann-Schwinger-Gleichung 79
 Lipschitz-stetige Bögen 31
- M**
- Massenaustausch 116
 Massendichten 131
 Massenwirkungsgesetz 18
 Maximum-Entropie-Prinzip 117, 118
 Maxwell'sche Gleichungen 51
 MCMC 113
 Mehrphasenströmung 75
 Mehrskalen
 -modellierung 116, 137
 -probleme 116
 -systeme 43
 Mikro-Makro-Übergang 116, 117, 137, 138
 Mikroelektronik 24
 Mikrowellenschaltungen 51
 Modenapproximationen 35
 Momentensysteme 117–119
 Moser-Iteration 18
- N**
- Naghdi-Modell 31
 Nanoelektronik 24
 Newton'sche Bewegungsgleichungen 137,
 138
 nichtautonome dynamische Systeme 85
 nichtisotherme Massenaustauschprozesse 116,
 127
 nichtlineare Evolutionsgleichungen 79
 nichtlineare Transportgleichung 89
 nichtlineare Wellen 116
 NUMATH 211
- O**
- Oberflächenwellen 116, 131
 optimales Design von Beugungsgittern 64
 Optimierung 67
 Optoelektronik 24
- P**
- P1- und P2-Wellen 131
 Paardiffusionsmodell 17
- Paradoxon 87
 Parameterschätzung 70, 75
 partielle Differentialgleichungen 46
 Partikelverfahren 90
 pdelib 46, 47, 211
 Perfectly Matched Layers 51
 Phasen-Koexistenz 81
 Phasenübergänge 125
 Phasendichte 119
 Phasenfeldmodell 125, 126
 Phasenfeldsystem 116, 125
 Phonon-Bose-Gas 118, 119
 Phonon-Bose-Phasendichte 118
 piezoelektrischer Aktor 28
 Pirogov-Sinai-Theorie 81
 Poissongleichung 17
 poröse Körper 127, 131
 Porositätsfluss 127
 Powermodul 123
 Prozess-Simulator BOP 55
 Pseudo-Stoneley-Welle 131
 Punktkatalysatoren
 stabile 87
- Q**
- Quadraturalgorithmus 77
 Quantum-Wells 139
- R**
- Random-Energy Model 83, 85
 Rayleigh-Welle 131
 Reaktionen 17
 Reaktions-Diffusions-Gleichungen 134
 reduziertes Gauß-Newton-Verfahren 75
 Regularität 47
 Rekonstruktion des Gitterprofils 65
 Relaxationszeit 131
 Riemann'sches Anfangswertproblem 137
 Risiko-Management 105
- S**
- S-Wellen 131
 Selbstpulsationen
 hochfrequente 38
 Sherrington-Kirkpatrick-Modell 83
 SiC 133
 Siliziumkarbid 133
 Simulation 123

| | |
|---|-------------|
| Simulation dynamischer Prozesse | 55 |
| Simulationsansatz | |
| heterogener | 55, 57 |
| homogener | 55 |
| Skorokhod-Problem | 27 |
| Smoluchowski-Gleichung | 90 |
| Software | |
| ClusCorr98 [®] | 210 |
| WIAS-TeSCA | 212 |
| COG | 210 |
| DIPOG | 210 |
| FEFLOW | 47 |
| gltools | 210 |
| LDSL-Tool | 211 |
| NUMATH | 211 |
| pdelib | 46, 47, 211 |
| Soliton-ähnliche Wellen | 116, 131 |
| Spannungsanalyse | 116 |
| Spektraltheorie | 85 |
| Spin-Glas-Phasenübergang | 83 |
| Stabilisierung singular gestörter Kontrollsysteme | 44 |
| Stabilitätswechsel | 43 |
| Stabilitätsanalyse | 130 |
| stochastische | |
| Dynamik | 85 |
| Optimierung | 68 |
| Partikelverfahren | 92 |
| Resonanz | 86 |
| Synchronisation | 86 |
| wechselwirkende Teilchensysteme | 90 |
| Stoneley-Welle | 131 |
| Strömungsinstabilität | 129 |
| Streumatrix | 51 |
| Sublimationszüchtung | 133 |

T

| | |
|-----------------------------------|----|
| Thermoelastoplastizität | 28 |
| Transitzeit | 89 |

U

| | |
|----------------------------------|-----|
| Ultraschallausbreitung | 111 |
| ungeordnete Modelle | 83 |
| ungeordnete Systeme | 85 |

V

| | |
|---------------------------|-----|
| Value at Risk | 105 |
| Versuchsplanung | 71 |

| | |
|---------------------------------------|----|
| Verzweigungsprozess | |
| gegenseitig katalysierender | 87 |
| im konstanten Medium | 87 |
| katalytischer | 87 |
| visuelle Auswertung | 61 |

W

| | |
|--|----------|
| Wärmefluss | 127 |
| Wärmeleitungsgleichung | 24 |
| Waferplatte | 120 |
| Wahrscheinlichkeitsrestriktion | 68 |
| Waveletalgorithmus | 77 |
| Wellenausbreitung | 116, 131 |
| WIAS-TeSCA | 24, 212 |
| Widerstands-Impulsschweißen | 142 |

Z

| | |
|-----------------------------------|-----|
| Zinn-Blei-Lot | 125 |
| zweiphasiges Kühlsystem | 116 |
| Zylinder-Kolben-System | 119 |