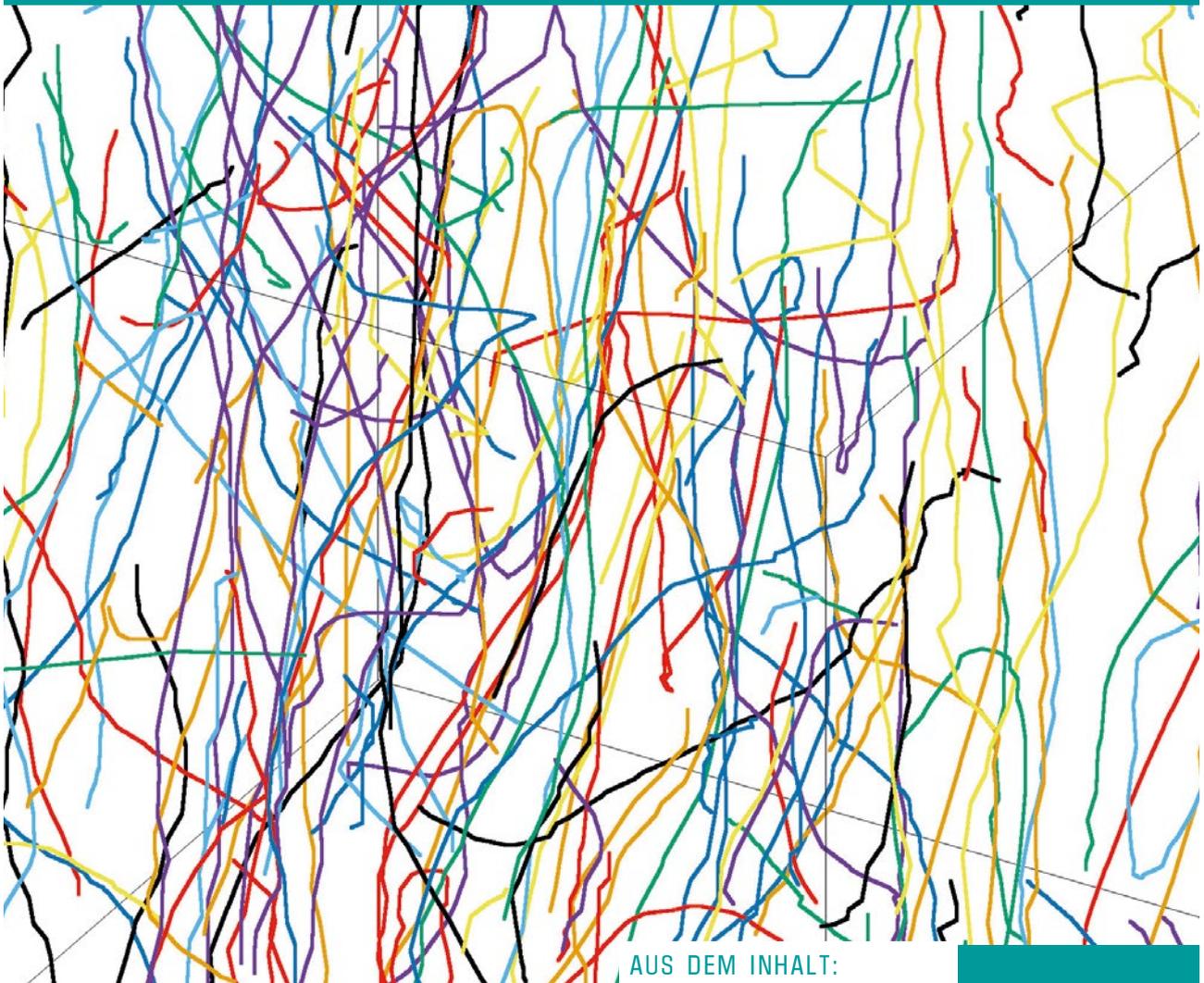


RUNDBRIEF



GESELLSCHAFT FÜR ANGEWANDTE MATHEMATIK UND MECHANIK



AUS DEM INHALT:

HERAUSGEBER
IM AUFTRAG DES VORSTANDES DER GAMM E.V.:
PROF. DR. AXEL KLAWONN
UNIVERSITÄT ZU KÖLN
PROF. DR.-ING. DANIEL BALZANI
RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM

STEFAN TUREK, DUSTIN RUDA,
DIRK RIBBROCK, PETER ZAJAC:
EINE MACHBARKEITSSTUDIE ZU
SCHNELLEN FEM-POISSON-LÖSERN AUF
BESCHLEUNIGERHARDWARE ALS BEISPIEL
FÜR HARDWARE-ORIENTIERTE NUMERIK

JÖRN MOSLER
VARIATIONPRINZIPIEN IN DER
MATERIALMODELLIERUNG -
BESCHREIBUNG VON GRENZFLÄCHEN

JUNGE WISSENSCHAFTLER:
JANA WILMERS
ANDRÉ USCHMAJEV

1/2021

www.gamm-ev.de

Herausgeber:
 Prof. Dr. Axel Klawonn
 Universität zu Köln
 Prof. Dr.-Ing. Daniel Balzani
 Ruhr-Universität Bochum

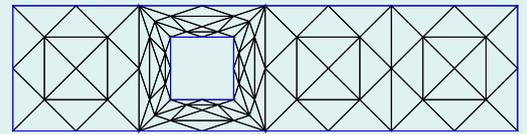
Schriftleitung:
 Prof. Dr. Axel Klawonn
 Universität zu Köln
 Department Mathematik/Informatik
 Weyertal 86-90
 50931 Köln
 Tel.: +49 (0)221 / 470-7868
 E-Mail: klawonn@math.uni-koeln.de

Anzeigenverwaltung
 GAMM-Geschäftsstelle
 c/o Prof. Dr.-Ing. habil. Michael Kaliske
 Institut für Statik und Dynamik der
 Tragwerke
 Fakultät Bauingenieurwesen
 Technische Universität Dresden
 01062 Dresden
 Tel.: +49 (0)351 / 463-33448
 E-Mail: GAMM@mailbox.tu-dresden.de

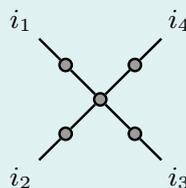
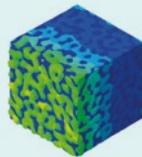
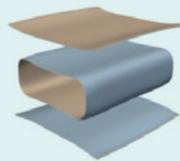
Gestaltung:
 Dr. Hein Werbeagentur GmbH, Köln
 www.heinagentur.de
 Peter Liffers, Dortmund
 www.liffers.de

Druck:
 Bauer & Frischluft Werbung GmbH
 Gutenbergstr. 3
 84069 Schierling
 Tel.: +49 9451 943024
 Fax.: +49 9451 1837
 E-Mail: sr@bauer-frischluft-werbung.de
 www.bauer-frischluft-werbung.de

ISSN 2196-3789



<p>4 Eine Machbarkeitsstudie zu schnellen FEM-Poisson-Lösern auf Beschleunigerhardware als Beispiel für Hardware-orientierte Numerik Stefan Turek, Dustin Ruda, Dirk Ribbrock, Peter Zajac</p> <p>14 Variationprinzipien in der Materialmodellierung - Beschreibung von Grenzflächen Jörn Mosler</p> <p>21 Steckbrief Jana Wilmers</p> <p>23 Steckbrief André Uשמajew</p> <p>27 Aktivitäten der GAMM Junioren zur Förderung junger Nachwuchswissenschaftler/innen Peter Gangl, Carmen Grässle, Arne Hansen-Dörr und Kathrin Welker</p>	<p>28 Angewandte Operatortheorie</p> <p>28 Optimierung mit partiellen Differentialgleichungen</p> <p>28 Analysis partieller Differentialgleichungen</p> <p>29 Dynamik und Regelungstheorie</p> <p>30 Mathematische Signal- und Bildverarbeitung (MSIP)</p> <p>31 Analysis von Mikrostrukturen</p> <p>32 Computational and Mathematical Methods in Data Science</p> <p>33 Stochastische Optimierung</p> <p>34 Angewandte und Numerische Lineare Algebra (ANLA)</p> <p>34 Computational Biomechanics</p> <p>35 Computational Science and Engineering (CSE)</p> <p>36 Data-driven modeling and numerical simulation of micro-structured materials (AG Data)</p> <p>36 Phasenfeldmodellierung</p> <p>37 Uncertainty Quantification (UQ)</p> <p>37 Experimentelle Festkörpermechanik</p> <p>38 Modellierung, Analysis und Simulation molekularer Systeme</p> <p>39 Numerische Analysis</p> <p>40 Wissenschaftliche Veranstaltungen</p> <p>41 Ausschreibung: Richard-von-Mises-Preis 2021</p> <p>42 Vorstand der GAMM</p> <p>43 Ehrenmitglieder der GAMM</p>
---	--



LIEBE LESERIN, LIEBER LESER,

LIEBE GAMM-MITGLIEDER,



über Jahrzehnte dominierten im Prozessorbereich klassische CPUs die Rechnersysteme, auf denen die numerischen Simulationen durchgeführt wurden, die im Zentrum vieler Forschungsprojekte in der Angewandten Mathematik und Mechanik sowie von Anwendungen in der Industrie stehen. Seit etwa zwei Jahrzehnten werden Grafikprozessorkarten (GPUs) nicht nur zur schnelleren Grafikedarstellung benutzt, sondern sie finden auch vermehrt Anwendung in der numerischen Simulation. Die Stärke der GPUs liegt u. a. auch darin, dass sie in der Regel in einfacher und sogar halber Genauigkeit (single/half precision) arbeiten. Für numerische Berechnungen ist dies aber eine Herausforderung. Im Hinblick auf die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen beschäftigt sich mit diesem Thema der Beitrag über hardwareorientierte Numerik auf Beschleunigerkarten von Stefan Turek, Dustin Ruda, Dirk Ribbrock und Peter Zajac von der TU Dortmund, den Sie ab S. 10 finden.



Während Variationsprinzipien seit langem wesentlicher Bestandteil der Festkörpermechanik sind, ist deren Nutzung für eine kanonische Beschreibung dissipativer Systeme im Rahmen inkrementeller Variationsformulierungen vergleichsweise neu. Anhand von Beispielen zur Modellierung von Grenzflächen erläutert Jörn Mosler von der TU Dortmund in seinem Beitrag ab S. 1 die grundsätzliche Methodik sowie Auswirkungen auf die Materialbeschreibung. Vom Autor vorgeschlagene Verallgemeinerungen zeigen bei Einsatz in Mikrostruktursimulationen mit anschließender Homogenisierung, dass Größeneffekte nicht immer monoton sind: Mit zunehmender Größe der betrachteten Mikrostruktur nimmt die makroskopische Steifigkeit teils zu, teils ab.

Als Nachwuchswissenschaftlerin aus der Mechanik stellt sich ab S. 21 Jana Wilmers von der Bergischen Universität Wuppertal und ab S. 23 aus der Mathematik der Nachwuchswissenschaftler André Uschmajew vom Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften in Leipzig vor.

Für die GAMM Juniors berichten in dieser Ausgabe Peter Gangl, Carmen Grässle, Arne Hansen-Dörr und Kathrin Welker. Sie weisen auf die von den Juniors organisierte Online-Zeitschrift GAMMAS hin und insbesondere auf den GAMMAS Journal – Best Paper Award. Lesen Sie mehr dazu auf S. 27.

Traditionell schreiben in der Frühjahrsausgabe des GAMM-Rundbriefes die aktuell existierenden GAMM-Fachausschüsse über ihre Aktivitäten des vergangenen Jahres. Derzeit hat die GAMM 17 aktive Fachausschüsse; Sie finden ihre Beiträge ab S. 28. Hinweisen möchten wir auch wieder auf die Ausschreibung des Richard-von-Mises-Preises auf S.41; der Stichtag für Nominierungen ist der 30. September 2021.

Als Herausgeber des Rundbriefes bedanken wir uns herzlich bei den Autorinnen und Autoren für Ihre Beiträge. Für weitere Anregungen zur Gestaltung des GAMM-Rundbriefes und die Einsendung von Beiträgen schicken Sie bitte eine E-Mail an daniel.balzani@rub.de (Mechanik) oder axel.klawonn@uni-koeln.de (Mathematik).

Bei der Lektüre der vorliegenden Ausgabe des Rundbriefes wünschen wir Ihnen viel Freude.

Köln und Bochum im März 2021

Axel Klawonn und Daniel Balzani

EINE MACHBARKEITSSTUDIE ZU SCHNELLEN FEM-POISSON-LÖSERN AUF BESCHLEUNIGERHARDWARE ALS BEISPIEL FÜR HARDWARE-ORIENTIERTE NUMERIK

VON STEFAN TUREK, DUSTIN RUDA, DIRK RIBBROCK, PETER ZAJAC

Motivation

Moderne Computersysteme beinhalten heutzutage mehr und mehr „Beschleunigerhardware“, insbesondere Grafikkarten mit KI-Komponenten (z.B. NVIDIA Volta V100 mit „Tensorcores“). Diese versprechen mehrere TFLOP/s Rechenleistung (obige V100 mit ca. 8 TFLOP/s in doppelter Genauigkeit und sogar mit bis zu 125 TFLOP/s in „half precision“ [1,2,3]). Damit stellt sich natürlich insbesondere für Anwendungen in der numerischen Kontinuumsmechanik, die oftmals Modelle auf der Basis von partiellen Differentialgleichungen verwenden, die dann beispielweise mit Finite Elemente Methoden (FEM) diskretisiert werden, die Frage:

Können Basisbausteine für FEM-Simulationen bei signifikanter Ausnutzung dieser sehr hohen Rechenleistungen auf moderner Beschleunigerhardware realisiert werden?

Ziel dieser „proof-of-concept“ Studie (aus einem laufenden Promotionsvorhaben) ist es, unter Ausnutzung von problemspezifischen Ansätzen der Hardware-orientierten Numerik zu zeigen, wie zugehörige FEM-Simulationskomponenten um mehrere Größenordnungen im Vergleich zu „Standardmethodik“ (konkret: geometrisches Mehrgitterverfahren) auf „Standardhardware“ (konkret: Multicore CPUs) beschleunigt werden können.

Ein Beispiel für moderne Beschleunigerhardware

Als Prototyp für moderne „Beschleunigerhardware“ betrachten wir die genannte NVIDIA Volta V100 SXM2 [1], die durch die folgenden Leistungsdaten charakterisiert werden kann: 7.8 TFLOP/s in „double precision“ (DP), 15.7

TFLOP/s in „single precision“ (SP), 31.3 TFLOP/s in „half precision“ (HP) und sogar 125 TFLOP/s bei HP mit Tensorcores; die Speicherbandbreite beträgt 900 GByte/s. Im Vergleich dazu betrachten wir die folgende „x64“ Konfiguration (AMD EPYC 7542, 32 Cores pro CPU, 128 MB L3-Cache [4]), die moderne („Standard“) Rechnerplattformen, insbesondere in Rechenzentren, für FEM-Simulationen prototypisch repräsentieren soll. Hier lauten die entsprechenden Leistungsdaten: 1.5 TFLOP/s in DP, 3 TFLOP/s in SP (HP wird nicht unterstützt) und eine Speicherbandbreite von 205 GByte/s.

Diese angegebenen TFLOP/s („Peak“) Raten beruhen auf BLAS3 Techniken, die für Anwendungen mit vollbesetzten Matrizen relevant sind (und tatsächlich auch im Rahmen von direkten Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme erreicht werden, allerdings dann mit bekannter kubischer Komplexität). Dagegen basieren moderne Lösungsverfahren für Steifigkeitsmatrizen, die aus FEM-Diskretisierungen resultieren und i.d.R. sehr dünnbesetzt („sparse“) sind, auf iterativen Lösungsmethoden vom Typ Krylov-Mehrgitter-Verfahren. Diese wiederum nutzen vor allem entsprechende Matrix-Vektor-Anwendungen als schnelle Basisbausteine, deren Performance allerdings durch die Speicherbandbreite charakterisiert wird. Für den betrachteten Testfall (hier: Poisson-Probleme, bilineare (Q1) FEM, 2D, Einheitsquadrat, CSR-Speichertechnik [5]) bedeutet das für die beiden betrachteten Hardwarekonfigurationen (NVIDIA Volta V100, AMD EPYC 7542), dass für solche „sparse“ Matrix-Vektor (MV) bzw. Matrix-Matrix (MM) Anwendungen, d.h. für MV-Anwendungen mit vielen Vektoren bzw. für die simultane Lösung von Poisson-Problemen mit vielen rechten Seiten, die erzielte Rechen-

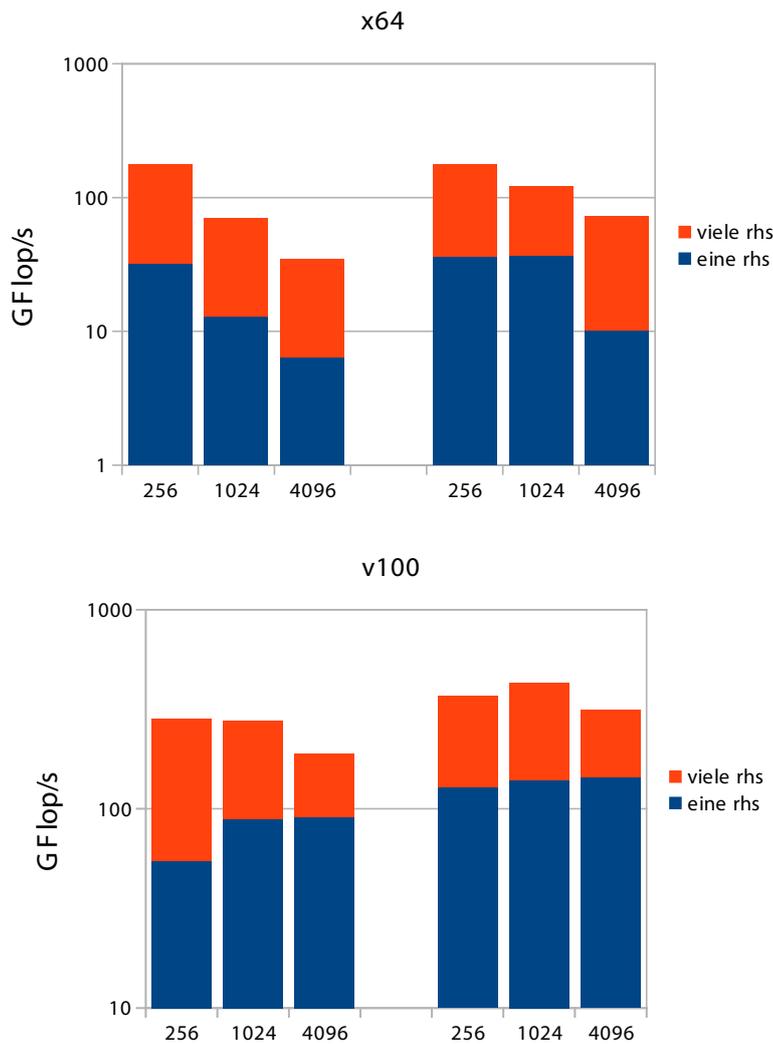


Abb. 1: GFlop/s Raten für „sparse“ MV („eine rhs“) und „sparse“ MM („viele rhs“) in DP (jeweils linke Säulen) und in SP (jeweils rechte Säulen).

leistung weit entfernt von den theoretischen „Peak“ Raten ist: Die V100 Grafikkarte ist für den untersuchten Testfall zwar schneller als die AMD CPU, aber eben „nur“ um einen Faktor 4–6 (für Gitterweite $h=1/1024$, d.h. ca. 1 Million Unbekannte, in obigem Testfall), und die Diskrepanz zu den „erhofften“ Peak Raten im mehrfachen TFLOP/s Bereich ist offensichtlich (siehe Abb. 1).

Die tatsächlich erzielbare Rechenleistung (siehe Abb. 2) erhöht sich signifikant, wenn entsprechende Ergebnisse für „dense“ Matrix-Vektor bzw. insbesondere für Matrix-Matrix-Multiplikationen betrachtet werden. Auffällig ist dabei, dass gerade in „lower precision“, d.h. in „single“ und vor allem in „half precision“, eine sehr hohe Performance erreicht werden kann, da zusätzlich die genannten Tensorcores [6] der V100 ausgenutzt werden können.

Diese Ergebnisse illustrieren, wie groß einerseits die Unterschiede zwischen „realer“ Rechenleistung für FEM-An-

wendungen, die in der Regel auf „sparse“ MV-Techniken in „double precision“ beruhen, und erreichbarer Peak Performance sind. Und sie zeigen andererseits, wie hoch das Potential für numerische Simulationen in der Kontinuumsmechanik sein kann, wenn tatsächlich „lower precision“ und Tensorcores ausgenutzt werden können. Aber natürlich stellt sich dann sofort die Frage:

Kann man FEM-Simulationen ohne signifikante Genauigkeitsverluste in „lower precision“ durchführen und können zugehörige schnelle Löser realisiert werden, die zu großen Teilen auf „dense“ MV- bzw. MM-Anwendungen beruhen und damit die sehr hohen Rechenleistungen moderner Beschleunigerhardware ausnutzen können?

Im Folgenden werden wir in Kurzform zuerst das Konzept des „prehandling“ [7,8] erläutern. Dieses erlaubt, FEM-Matrizen, die zu (linearen) Differentialoperatoren – im

Folgenden für Poisson-Probleme als wesentliche Bausteine in vielen numerischen Simulationen – gehören, in „lower precision“ zu behandeln und dennoch eine vergleichbare Genauigkeit wie in doppelter Genauigkeit zu erhalten. Als weiteren Schritt werden wir eine spezielle Variante dieser „Vorbehandlung“, nämlich mittels „hierarchischer Finite Elemente Methoden“ (HFEM [9]), vorstellen. Für diese lassen sich spezielle Schurkomplement-artige Lösungsverfahren entwickeln und realisieren, die auf Multiplikationen mit vollbesetzten (Teil-)Matrizen beruhen und damit auch das Potential der Tensorcores ausnutzen können. Im anschließenden Teil stellen wir erste numerische Studien zu diesen Überlegungen vor, die als „proof-of-concept“ demonstrieren, dass tatsächlich mittels spezieller Hardware-orientierter Techniken moderne Beschleunigerhardware adäquat ausgenutzt werden kann.

Prehandling als Konzept für FEM-Matrizen in „lower precision“

Die FEM-Steifigkeitsmatrizen (im Folgenden mit A_h bezeichnet) zu elliptischen Differentialgleichungen (von 2. Ordnung), und damit insbesondere für Poisson-Probleme als betrachtete Prototypen, lassen sich dadurch charakterisieren, dass sich ihre „Konditionszahl“ wie $\text{cond}(A_h) = \mathcal{O}(h^{-2})$ verhält, wobei h die Gitterweite beschreibt. Da Störungen in den Daten (z.B. in den Matrix- bzw. Lastvektoreinträgen durch Rundungsfehler) auch zu Störungen in der zugehörigen Lösung führen, die von $\text{cond}(A_h)$ abhängen, erhält man für die (relativen) „Störungsfehler“

$$\frac{\|u_h - \tilde{u}_h\|}{\|u_h\|} \approx \text{cond}(A_h) \cdot \text{TOL} = \mathcal{O}(h^{-2}) \cdot \text{TOL}$$

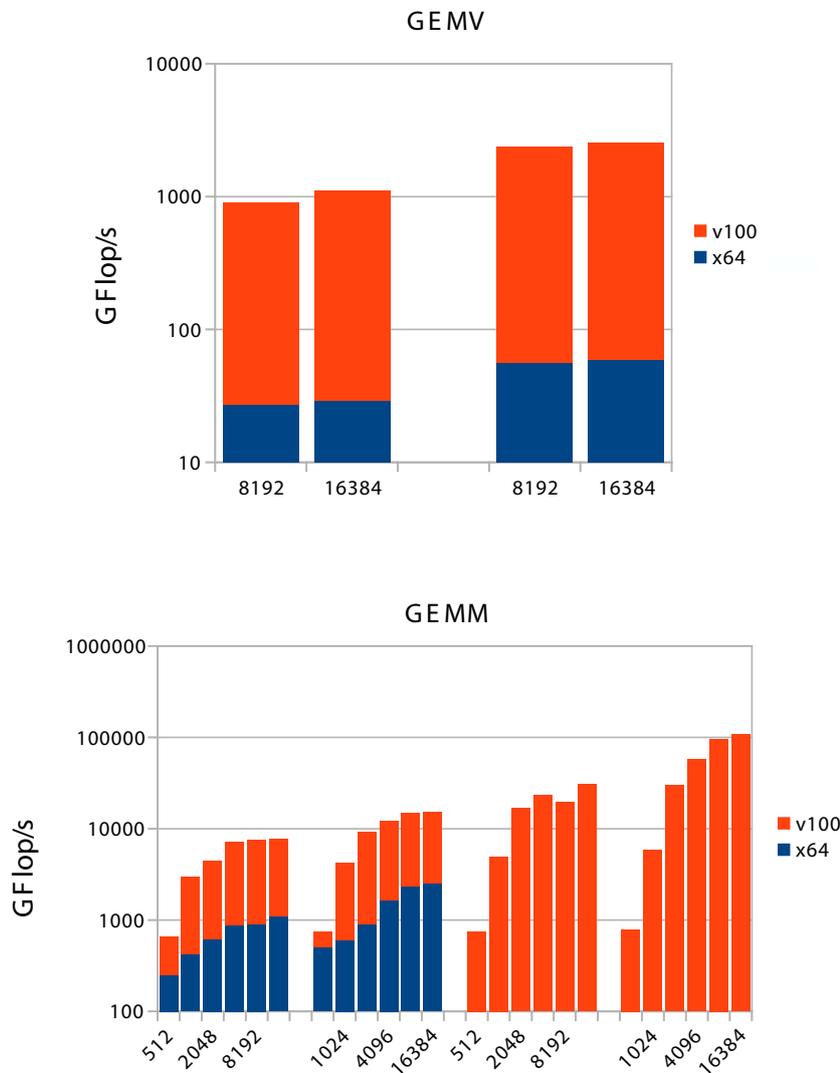


Abb. 2: GFlop/s Raten für „dense“ MV („GEMV“) und „dense“ MM („GEMM“) in DP (jeweils linke Säulen), in SP (jeweils zweite Säulen von links), in HP (dritte Säulen von links für V100) und für HP mit Tensorcores (rechte Säulen für V100).

wobei TOL (mindestens) die „Maschinengenauigkeit“ beschreibt, d.h. $TOL \approx 10^{-16}$ für DP, 10^{-7} für SP und (nur) $TOL \approx 10^{-3}$ für HP. Da sich gleichzeitig – für lineare bzw. multilineare FEM-Ansätze – die (relativen) Diskretisierungsfehler wie $\mathcal{O}(h^2)$ verhalten

$$\|u - u_h\|/\|u\| = \mathcal{O}(h^2)$$

ergibt sich die Problematik, dass sich der Gesamtfehler $u - \tilde{u}_h$ aus Anteilen des Diskretisierungs- und des Störungsfehlers zusammensetzt, die sich jeweils wie $\mathcal{O}(h^2)$ bzw. $\mathcal{O}(h^{-2})$ verhalten: Konkret bedeutet das, dass h nicht

zu klein gewählt werden darf, da ansonsten der Störungsfehler dominiert, wie Abb. 3 zeigt:

Um beide Fehlerarten zu äquilibrieren, zeigt eine einfache Rechnung, dass die Gitterweite h (asymptotisch) nicht kleiner als $\mathcal{O}(TOL^{1/4})$ gewählt werden darf. Das führt aber für SP und insbesondere für HP zu sehr groben Gitterweiten und macht damit die Lösung von sehr großen Problemen, für die eigentlich (parallele) Hochleistungsrechner mit solcher Beschleunigerhardware benötigt werden, unmöglich. Die zentrale Idee des „prehandling“ (bzw. der „Vorbe-

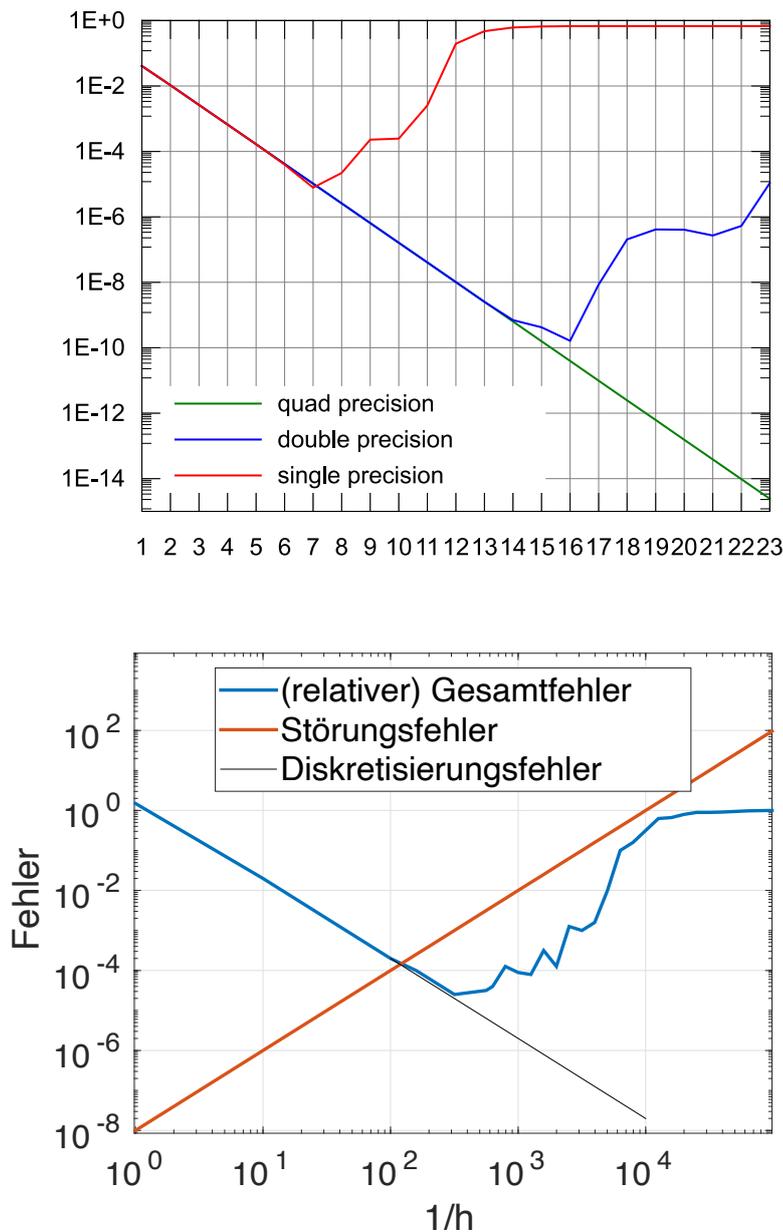


Abb. 3: Unten: Illustrative Darstellung der Gesamtfehler sowie der Störungs- und Diskretisierungsfehler in SP für einen bilinearen FEM-Ansatz für das Poisson-Problem; oben: Realer Verlauf der L^2 -Gesamtfehler für einfache, doppelte und vierfache Rechengenauigkeiten bei Anwendung von Standard-FEM in 1D in Abhängigkeit vom Verfeinerungslevel (Level 10 entspricht $h = 1/1024$).

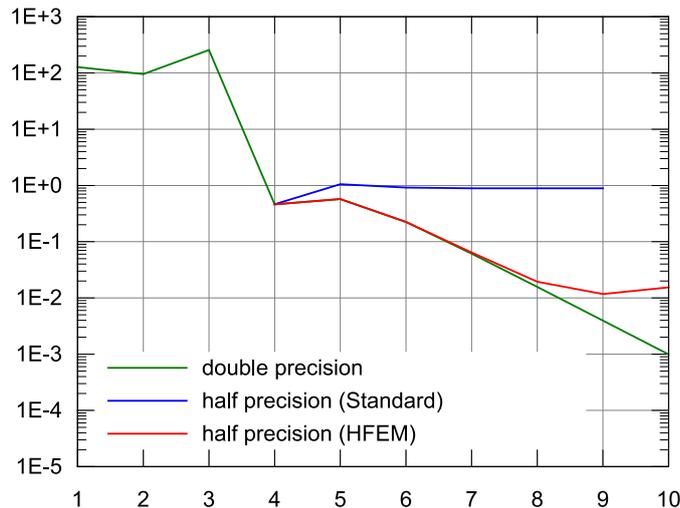


Abb. 4: Vergleich der \mathcal{L}^2 -Fehler bei Verwendung von Standard-FEM (blau) und Prehandlung mittels HFEM (rot) jeweils in HP sowie der Referenzlösung in DP (grün, in diesem Bereich unabhängig von Prehandlung) in 2D in Abhängigkeit vom Verfeinerungslevel (Level 10 entspricht wieder $h = 1/1024$) für eine stark oszillierende exakte Lösung. Ohne Prehandlung weicht der Fehler ab Level 4 ab, mit Prehandlung dagegen ab Level 8 bzw. 9.

handlung“) besteht jetzt darin, die Steifigkeitsmatrix A_h explizit in eine modifizierte Matrix \tilde{A}_h zu transformieren, so dass – bei exakter Rechengenauigkeit – die resultierenden Gleichungssysteme zu identischen Ergebnissen führen und dabei folgende drei Bedingungen erfüllt sind:

- 1. starke Reduktion der Konditionszahl:
 $\text{cond}(\tilde{A}_h) \ll \text{cond}(A_h)$
- 2. ähnliche „sparsity“ (Dünnbesetztheit) der transformierten Matrix \tilde{A}_h
- 3. effiziente Transformation (z.B. in $\mathcal{O}(N \log N)$, wenn die Problemgröße N ist)

Ein Kandidat für eine solche Transformation und damit für „prehandling“ – zumindest in 2D – ist die genannte Methode der hierarchischen Finiten Elemente, die zu Konditionszahlen der Größe $\text{cond}(\tilde{A}_h) = \mathcal{O}\left(\left(\log \frac{1}{h}\right)^2\right)$ [9]

führt und damit die Verwendung von „single“ und sogar „half precision“ erlaubt (siehe Abb. 4).

Konkret erhalten wir für die untersuchten Testkonfigurationen Konditionszahlen in der (maximalen) Größenordnung $\text{cond}(\tilde{A}_h) \approx 50 - 100$, die für (relative) Genauigkeiten im Bereich von ca. 1% ausreichen, was aber für komplexe technische Simulationen in den meisten Fällen eine realistische Forderung darstellt.

Ausführliche numerische Analysen und Tests in [8] belegen, dass damit tatsächlich eine geeignete Technik gefunden werden konnte, um zumindest für FEM-Diskretisierungen von Poisson-Problemen in 2D auf allgemeinen Rechengittern (d.h. Gittern, die von einem unstrukturierten Grobgitter ausgehend durch sukzessive hierarchische Verfeinerung entstehen) qualitativ und auch quantitativ genaue FEM-Lösungen in SP und sogar in HP zu berechnen.

Ein direkter HFEM-Poisson-Löser

Ein Nebeneffekt der durch das „prehandling“ deutlich verringerten Konditionszahl der Steifigkeitsmatrix ist, dass iterative Methoden vom Typ Krylov-Raum-Verfahren (CG [10]) schon sehr effiziente Zugänge darstellen. Analysiert man allerdings die Struktur der entstehenden Matrizen genauer und berücksichtigt dabei die besonderen Eigenschaften der hierarchischen FEM, so lassen sich im Rahmen eines Schurkomplement-Ansatzes neben iterativen Varianten sogar effiziente direkte Lösungsverfahren konzipieren. Deren Aufwand lässt sich wie $\mathcal{O}(N^{3/2})$ charakterisieren, wobei N die Problemgröße darstellt und sich bei linearen bzw. bilinearen Finiten Elementen in 2D wie $\mathcal{O}(h^{-2})$ verhält. Die Grundlage dieses Verfahrens [11] ist eine spezielle Unterteilung der Knoten, die im direkten Zusammenhang mit der Gitterhierarchie steht. Konkret ergeben sich für den resultierenden Löser für das äquidistant diskretisierte Einheitsquadrat ca. $12N^{3/2}$ als notwendige Anzahl an arithmetischen Operationen (FLOPs).

Diese Anzahl an Operationen ist natürlich nicht optimal, da keine lineare Komplexität, also $\mathcal{O}(N)$, erreicht wird. Aber dafür beruht der zugehörige Algorithmus auf „dense“ Matrix-Vektor bzw. sogar Matrix-Matrix-Multiplikationen (im Falle von Problemen mit vielen rechten Seiten), die – wie oben gezeigt – auf der V100 so implementiert werden können, dass sie tatsächlich die Tensorcores ausnutzen, wie auch die nachfolgenden Studien illustrieren werden.

Numerische Resultate und Vergleiche mit Standard-FEM-Lösern auf Standard-Hardware

In den folgenden Grafiken in Abb. 5 zeigen wir exemplarisch für die drei Gitterweiten $h = 1/1024$, $1/512$ und $1/256$ (was im Zusammenhang mit (b)linearen FEM für

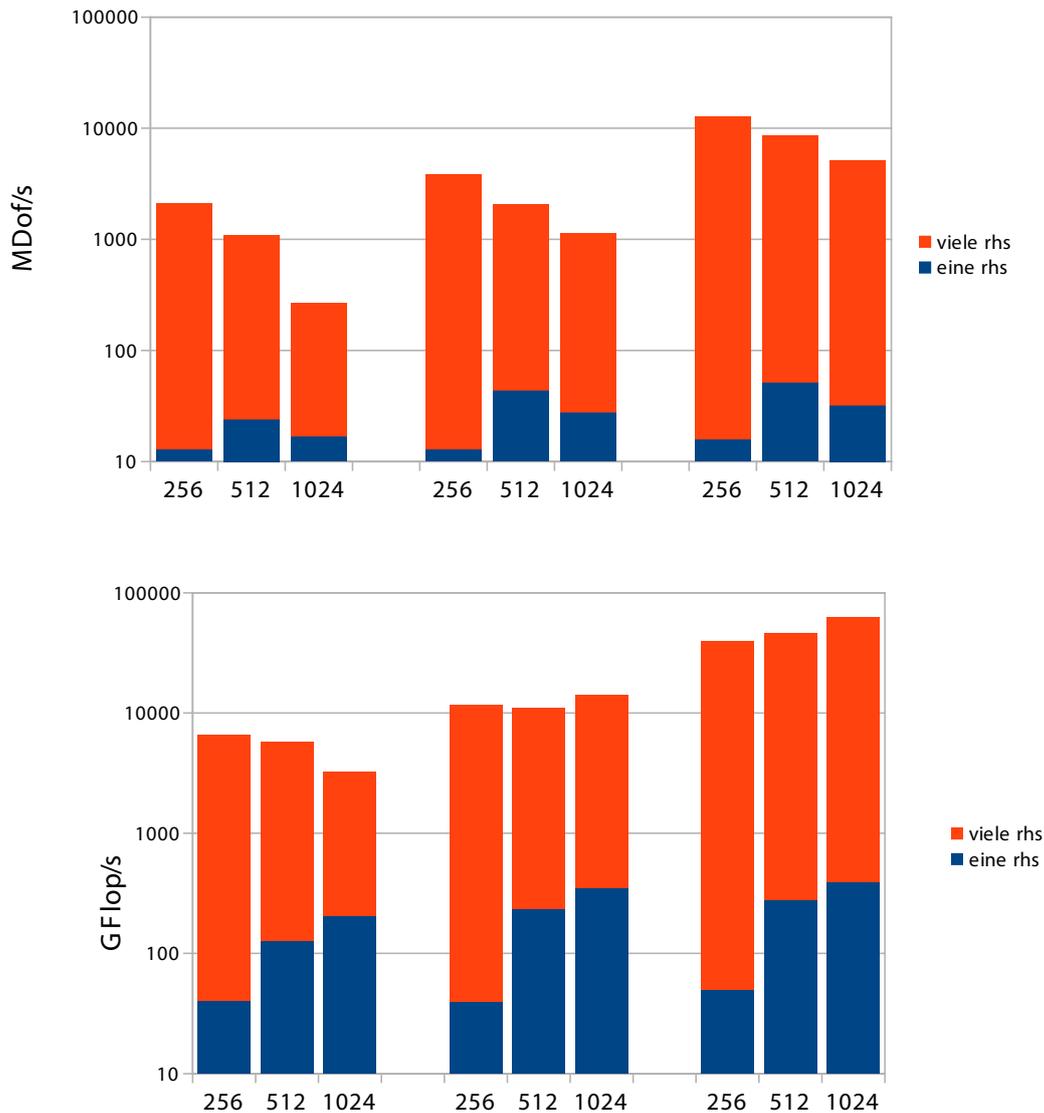


Abb. 5: GFlop/s Raten (unten) und „Anzahl Millionen von Freiheitsgrade/s“ ((oben) für die neue HFEM-basierte Methode für DP (jeweils links), SP (Mitte) und HP mit Tensorcores (rechts) auf der V100.

das Poisson-Problem auf dem äquidistant verfeinerten Einheitsquadrat zu $N \approx 1$ Million Unbekannte (für $h = 1/1024$) führt) die gemessenen GFLOP/s Raten für die verschiedenen Genauigkeiten (also in HP, SP und DP). Zusätzlich geben wir in Abb. 6 auch die (durchschnittliche) Zahl an Millionen von Freiheitsgraden an, die in einer Sekunde behandelt (d.h. „gelöst“) werden können, um einen direkten Vergleich mit (geometrischen) FEM-Mehrgitterlösern zu erlauben. Dabei zeigen wir jeweils die Resultate für genau eine rechte Seite, d.h. wir lösen $Ax = b$ mit Lösungsvektor x und rechter Seite Vektor b der Dimension N , und für „viele“ ($= M$) rechte Seiten, d.h. $AX = B$ mit X und B als Matrix von Lösungen bzw. rechten Seiten der Dimension $N \times M$. Gerade der Fall $M > 1$, d.h. wir lösen die Poisson-Probleme auf dem gleichen Rechengitter, aber gleichzeitig für M rechte Seiten, erlaubt zahlreiche Anwendungen von vollbesetzten Matrix-Matrix-Multiplikationen, die – wie vorher gezeigt – die höchsten Rechenleistungen erzielen können. Eine illustrierende Motivation, wo solche Probleme auftreten bzw. wie ebenfalls im Zuge von Hardware-orientierter

Numerik entsprechende neue Algorithmen hergeleitet werden können, werden wir im abschließenden Kapitel nachreichen.

Tatsächlich belegen unsere Studien auf der V100, dass für „große“ Probleme, d.h. in unserem Fall $h = 1/1024$ für mit ca. 1 Million Unbekannten im Ort bei gleichzeitig vielen ($= M$) rechten Seiten, die Tensorcores immer besser ausgenutzt werden können, was letztendlich zu ca. 60 TFLOP/s „realer“ Rechenleistung führt. Und unsere Versuche, die internen V100 Strukturen zusammen mit speziellen NVIDIA Routinen besser auszunutzen, zeigen, dass wir damit deutlich über dem erwarteten Geschwindigkeitsgewinn beim Übergang von „single“ zu „half precision“ liegen, was bedeutet, dass wir mit diesem Zugang tatsächlich die Tensorcores ausnutzen können. Allerdings sind das bisher „nur“ TFLOP/s Raten, die nichts darüber aussagen, wie effizient dieser neue Zugang tatsächlich ist, insbesondere im direkten Vergleich zu einem Standard (geometrischen) FEM-Mehrgitterlöser, der auf den oben untersuchten „sparse“ MV-Anwendungen (natürlich in „double precision“ auf-

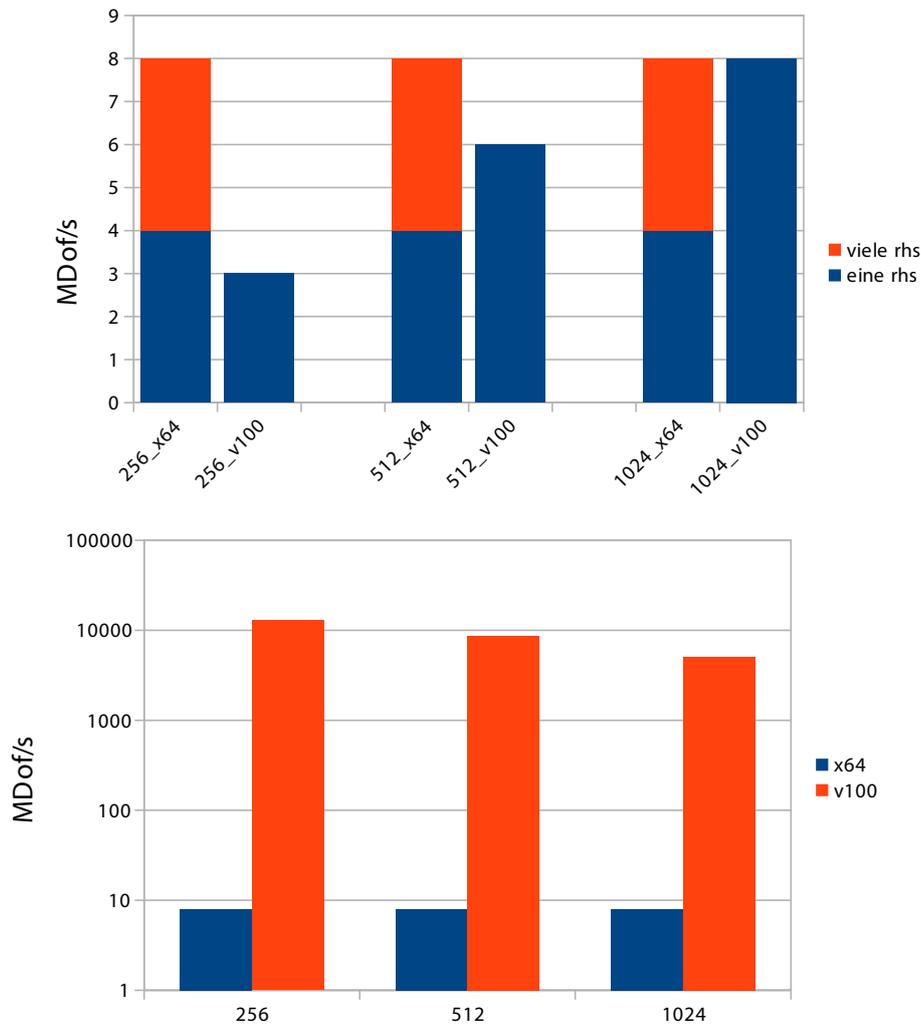


Abb. 6: „Anzahl Millionen von Freiheitsgrade/s“ (links) für den FEM-MG-Zugang in DP und Vergleich dieses „Standardzugangs“ (FEM, MG, DP, x64, viele rechte Seiten) mit der neuen Methode (HFEM, direkt, HP, V100).

grund der schlechten Konditionierung) beruht: Während ein typisches (optimiertes) Mehrgitterverfahren eine „optimale“ numerische Komplexität aufweist, d.h. $\mathcal{O}(N)$ arithmetische Operationen (FLOPs) zur Lösung benötigt, kostet der Lösungsvorgang mit der neuen vorgestellten Methode ca. $12N^{3/2}$ FLOPs, was nicht optimal ist für immer größer werdende Problemgrößen N .

Im konkreten Fall betrachten wir allerdings Probleme der Größe $N \approx 1$ Million, was für viele 2D-Problemstellungen schon eher zu den „größeren“ Problemen gehört; tatsächlich würde ein analoger Zugang in 3D bei der untersuchten Gitterweite $h = 1/1024$ zu ca. 1 Milliarde Unbekannten führen. Wenn man gleichzeitig berücksichtigt, dass für obige (optimierte) Mehrgitterverfahren eine Faustregel lautet, dass auf solchen gleichförmigen Gittern ca. $1.000 N$ arithmetische Operationen ausreichen, um das zugehörige Problem (hinreichend genau) zu lösen, vergleichen wir hier die Faktoren 1.000 (Standard MG) und $12N^{1/2} \approx 12.000$ (HFEM): Der neue Zugang benötigt damit zwar ca. 12-mal mehr arithmetische Operationen, aber die Hoffnung ist – und dies wird auch durch die folgenden Ergebnisse belegt – dass durch die bessere Ausnutzung der Hardware-

leistung dennoch insgesamt eine deutlich höhere Effizienz, d.h. deutlich geringere Rechenzeiten, erreicht wird. (Abb. 6) Konkret zeigen diese Studien, dass der neue Zugang im Falle von einer einzigen rechten Seite, also $Ax = b$, im Vergleich zu unserem (in FEAT3 [12] bereits hochoptimierten) Standard-Mehrgitter-Löser auf der V100 bis zu viermal und auf der AMD CPU bis zu achtmal schneller sein kann (man beachte: Der neue Löser für HFEM in HP wird mit dem FEM-Zugang in DP verglichen). Und im Falle von vielen rechten Seiten erreichen wir weitere deutliche Effizienzsteigerungen auf der V100, da wir sowohl „lower precision“ als auch die Tensorcores ausnutzen können. Und um es auf die Spitze zu treiben: Der neue Zugang ist auf einer V100 Grafikkarte bei vielen rechten Seiten – und bei nahezu gleicher Genauigkeit – um den Faktor 600 schneller als unser bisheriges „Arbeitspferd“, ein geometrischer FEM-Mehrgitterlöser in „double precision“ und CSR-Speichertechnik auf einer (multicore) AMD EPYC 7542 CPU! Natürlich muss man an dieser Stelle kritisch anmerken, dass diese Studien nur für ein äquidistant verfeinertes Einheitsquadrat durchgeführt wurden, und das mit einem „black box“ FEM-Mehrgitterzugang für allgemeine, d.h.

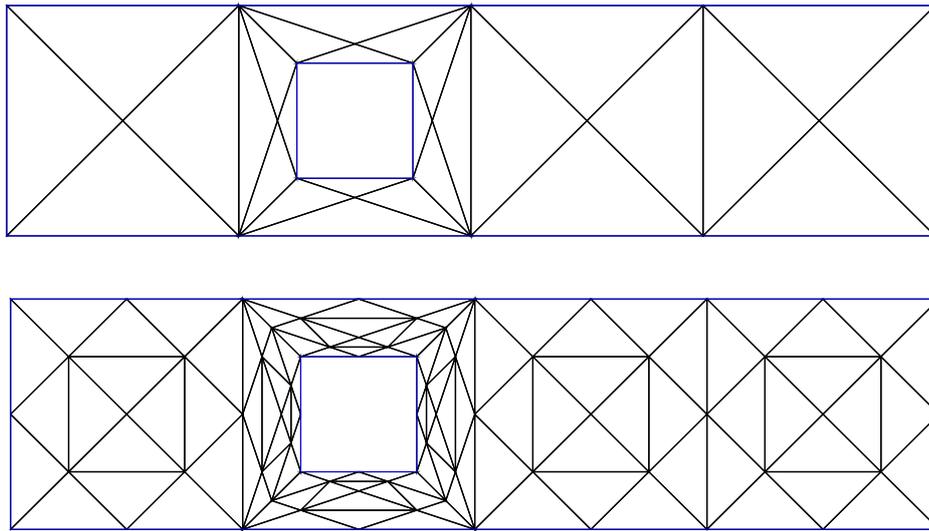


Abb. 7: Darstellung des gröbsten Gitters einer „flow around a square“ Konfiguration und des Gitters nach einem uniformen Verfeinerungsschritt.

insbesondere semi-strukturierte Grobgitter, die hierarchisch verfeinert werden. Der neu vorgestellte Zugang kann aber ebenfalls auf solchen Rechengittern verwendet werden, bei denen das „Groggitter“ unstrukturiert ist, weitere Verfeinerungslevel aber durch uniforme Verfeinerungen erhalten werden. Ein typisches Beispiel (z.B. für eine „flow around a square“ Konfiguration) ist in der obigen Abb. 7 zu finden, für die wir ebenfalls im Rahmen dieser „proof-of-concept“ Studien mit linearen FEM den beschriebenen Zugang analysieren konnten.

Ein weiterer Vorteil des neuen Zugangs, zumindest der beschriebenen Variante eines „direkten“ Löser, besteht darin, dass das Löserverhalten mehr oder weniger unabhängig von sog. „aspect ratios“, d.h. Gitterverzerrungen, Elementgrößenprüngen, etc. ist. Im Gegensatz dazu reagieren die verwendeten (iterativen) geometrischen Mehrgitterlöser bzgl. ihres Konvergenzverhaltens tatsächlich sehr sensitiv (und zwar deutlich schlechter!) auf solche Gitterstrukturen.

Zusammenfassung und Ausblick

Ziel dieser aktuellen Studie (Stand: November 2020) war es, exemplarisch zu demonstrieren, wie mit dem Wissen über moderne „Spezialhardware“ neue (Hardware-orientierte) numerische Techniken und Algorithmen entwickelt werden können. Diese sind in der Lage, eine hohe numerische Effizienz mit einer gleichzeitig sehr hohen „computational“ Performance auf eben solchen Computersystemen, hier insbesondere Beschleunigerhardware vom Typ NVIDIA Volta V100, zu verknüpfen. Wird zusätzlich noch Parallelität bzgl. vieler solcher Komponenten ausgenutzt, können für entsprechende Anwendungen in der numerischen Kontinuumsmechanik, die solche „Basisbausteine“ verwenden, die Simulationszeiten um mehrere Größenordnungen beschleunigt werden.

Natürlich sind das „nur“ erste (Vor-)Studien für Poisson-Probleme; diese stellen aber beispielsweise einen der zentralen Bausteine innerhalb von zeitabhängigen Strömungsproblemen auf der Basis der inkompressiblen Na-

vier-Stokes Gleichungen dar: Im Rahmen von (diskreten) Projektionsmethoden als typische Operator-Splitting-Zugänge muss in jedem Zeitschritt ein Poisson-Problem für den Druck gelöst werden, bei dem tatsächlich oft nur die rechte Seite von Zeitschritt zu Zeitschritt variiert, wenn das (Orts-)Rechengitter gleich bleibt. Im Zusammenspiel mit „zeitsimultanen“ Zugängen [13] untersuchen wir gerade Varianten der obigen Projektionsmethoden, die es erlauben, **alle** Druck-Poisson-Probleme, d.h. für alle Zeitschritte gleichzeitig, auf einmal zu lösen: Dies entspricht gerade dem beschriebenen Fall von $AX = B$, d.h. gleiche Steifigkeitsmatrix A , aber für eine Matrix an rechten Seiten B und entsprechenden Lösungsvektoren X , für die die beschriebenen sehr hohen Rechenleistungen erreicht werden konnten.

Und natürlich gibt es noch weiteren Forschungsbedarf hinsichtlich „prehandling“ in 3D und für andere Differentialoperatoren bzw. FEM-Ansätze, aber auch bzgl. iterativer Varianten des HFEM-Schurkomplement Ansatzes, insbesondere auf anderer Beschleunigerhardware: Unsere vorgestellten Studien zu den tatsächlich möglichen Effizienzsteigerungen von mathematischen Simulationswerkzeugen, gerade in der numerischen Kontinuumsmechanik, erscheinen noch relevanter angesichts der Tatsache, dass das Rechnersystem „JUWELS“ in Jülich [14] mit dem neuen Boostermodul (basierend auf einem Nachfolgermodell der betrachteten V100 Grafikkarten) in der neuesten Top500-Liste auf Platz 7 steht und somit wohl der derzeit schnellste europäische Rechner ist. Das entsprechende Nachfolgermodell, NVIDIA Ampere A100, bietet Tensorcores in „half precision“ mit mehr als 300 TFLOP/s: Zusammen mit „prehandling“ Techniken wird es daher möglich sein, hocheffiziente FEM-Simulationen von PDEs auf moderner Beschleunigerhardware auszuführen, die das Peak Performance Potential der Hardware (nahezu) voll ausnutzen.

Die Autoren bedanken sich bei Heiko Poelstra für die umfangreichen Programmierarbeiten während der Vorbereitung dieser Studie.

Literatur

- [1] V100 SXM2 <https://images.nvidia.com/content/technologies/volta/pdf/volta-v100-datasheet-update-us-1165301-r5.pdf>
- [2] half precision https://en.wikipedia.org/wiki/Half-precision_floating-point_format
- [3] <https://blogs.nvidia.com/blog/2019/11/15/whats-the-difference-between-single-double-multi-and-mixed-precision-computing/>
- [4] AMD Epyc 7542, 32 Kerne <https://www.amd.com/en/products/cpu/amd-epyc-7542>
- [5] Saad, Y.: Iterative Methods for Sparse Linear Systems; <https://doi.org/10.1137/1.9780898718003>
- [6] Tensorcores <https://www.nvidia.com/de-de/data-center/tensor-cores/>
- [7] Ruda, D., Turek, S., Zajac, P. & Ribbrock, D. (2019). The Concept of Prehandling as Direct Preconditioning for Poisson-like Problems. Ergebnisberichte des Instituts für Angewandte Mathematik, No.620, Dezember 2019, <http://dx.doi.org/10.17877/DE290R-20384>
- [8] Ruda, D. (2020). Numerische Studien zur "Vorbehandlung" (prehandling) von Poisson-artigen Problemen durch die hierarchische Finite-Elemente-Methode. Masterarbeit, TU Dortmund
- [9] Yserentant, H. (1986). On the Multi-Level Splitting of Finite Element Spaces. Numerische Mathematik, Vol. 49, S. 379-412, <https://doi.org/10.1007/BF01389538>
- [10] Meister, A.: Numerik linearer Gleichungssysteme; <https://doi.org/10.1007/978-3-658-07200-1>
- [11] Ruda, D., Turek, S., Ribbrock, D. Zajac, P. & Poelstra, H. (2021). Very fast FEM Poisson solvers on lower-precision accelerator hardware: A „proof-of-concept“ study for NVIDIA Volta V100 (in Vorbereitung)
- [12] Ruelmann, H.; Geveler, M.; Ribbrock, D.; Zajac, P. & Turek, S. (2019) Basic Machine Learning Approaches for the Acceleration of PDE Simulations and Realization in the FEAT3 Software, Ergebnisberichte des Instituts für Angewandte Mathematik Nummer 618, Fakultät für Mathematik, TU Dortmund, 618
- [13] Dünnebacke, J.; Turek, S.; Lohmann, Chr.; Sokolov, A. & Zajac, P. (2020). Increased space-parallelism via time-simultaneous Newton-multigrid methods for nonstationary nonlinear PDE problems (Special Issue PACO 2019, eingereicht)
- [14] <https://www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/EN/2020/2020-11-16-juwels-booster.html?nn=362372>



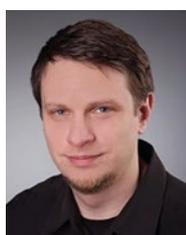
Stefan Turek ist seit 1999 Inhaber des Lehrstuhls für Angewandte Mathematik & Numerik (LS3) an der TU Dortmund. Er studierte Mathematik an der Universität des Saarlandes in Saarbrücken und wechselte 1988 an die Universität Heidelberg, wo er im Jahre 1991 seine Promotion anfertigte. Von 1991 – 1999 arbeitete er als PostDoc und habilitierte sich dort in 1998 im Fachgebiet Mathematik. In 1999 wechselte er auf eine C4-Professur für Mathematik an die Universität Dortmund. Seine Forschungsinteressen liegen im Bereich der numerischen Simulationsmethoden für inkompressible Fluide (FEATFLOW als Open Source Software) im Zusammenspiel mit Techniken des wissenschaftlichen Rechnens, insbesondere auf modernen Hochleistungsrechnern.



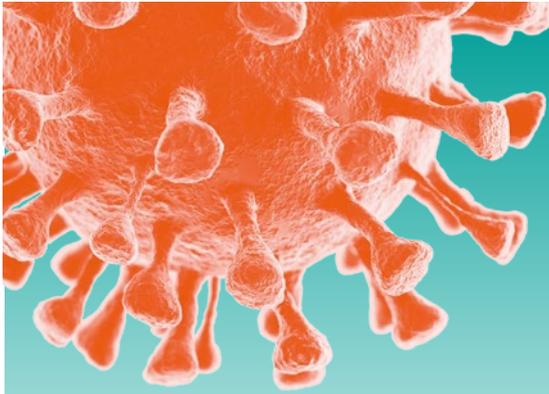
Dustin Ruda, M.Sc., absolvierte von 2014 bis 2020 sein Bachelor- und Masterstudium in Mathematik an der TU Dortmund. Seitdem ist er ebendort als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Angewandte Mathematik & Numerik (LS3) tätig. Sein Forschungsinteresse gilt der Anpassung von Finite-Elemente-Zugängen für elliptische Probleme und Konstruktion von Lösungsverfahren, die den Einsatz schneller Low-Precision Hardware erlauben.



Dirk Ribbrock, Dipl.-Inf., absolvierte sein Informatikstudium an der TU Dortmund. Seit 2010 ist er ebendort als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Angewandte Mathematik & Numerik (LS3) tätig. Sein Forschungsinteresse gilt der hardwareorientierten Numerik und der Parallelisierung von Numerikanwendungen, insbesondere per GPU.



Peter Zajac, Dipl.-Math., absolvierte im Jahr 2011 sein Studium der Mathematik an der TU Dortmund und ist seitdem als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Angewandte Mathematik & Numerik (LS3) tätig, wo er insbesondere maßgeblich an der Programmierausbildung der Studierenden mitwirkt. Sein Hauptaufgabengebiet besteht in der Kernelentwicklung des Finite-Elemente Software-Pakets FEAT(v3) sowie in der software-technischen Betreuung und Einarbeitung von Nutzern der aktuellen Software. Forschungsseitig beschäftigt er sich primär mit der Umsetzung von geometrischen Mehrgitterverfahren auf parallelen Clusterrechnern sowie der Konstruktion und Analyse von Finite-Elemente-Räumen.



SIAM Epidemiology Collection

The collection, which has been made freely available, is comprised of 150+ epidemiology-related SIAM journal articles, proceedings, and book chapters focused on disease modeling, pandemics, and vaccines.

Access and share: epubs.siam.org/page/EpidemiologyCollection



SIAM's 18 peer-reviewed research journals are the leading source of knowledge for the world's applied mathematics and computational science communities. Normally available only by subscription, 150+ epidemiology-related articles are now freely available to all.

Learn more: www.siam.org/journals



VARIATIONSPRINZIPIEN IN DER MATERIALMODELLIERUNG – BESCHREIBUNG VON GRENZFLÄCHEN

VON JÖRN MOSLER

Variationsprinzipien in der Mechanik

Variationsprinzipien sind spätestens seit Mitte des 18. Jahrhunderts integraler Bestandteil der Physik – insbesondere stellen sie einen zentralen und nicht mehr wegzudenkenden Grundpfeiler der Festkörpermechanik dar. Prominente Beispiele umfassen das Hamilton'sche Prinzip – auch als Prinzip der stationären Wirkung bekannt – oder das Prinzip der virtuellen Arbeit. Während solche und andere Variationsprinzipien für konservative Systeme bereits etabliert sind (z.B. das Postulat des Minimums des Gesamtpotenzials für hyperelastische Materialmodelle), so trifft diese Aussage für Modelle mit Dissipation nur stark eingeschränkt zu. Zwar sind Variationsprinzipien in der Tat auch für dissipative Systeme seit Langem bekannt – wie z.B. das Postulat der maximalen Dissipation – jedoch werden sie noch immer selten auch für eine kanonische Beschreibung des gesamten Systems oder für die direkte Entwicklung komplexer Materialmodelle und effektiver Algorithmen verwendet.

Der Fokus des vorliegenden Artikels liegt auf einer speziellen Klasse von Variationsprinzipien: Modelle auf der Grundlage inkrementeller Minimierungsprinzipien, s. [P:9 5,OR:99,OR:99,CHM:02,P:05,MR:15].

Im Gegensatz zu konventionellen Ansätzen weisen solche kanonischen Beschreibungen signifikante Vorteile auf. Neben der natürlichen physikalischen Interpretation der eingenommenen Zustände als Energieminimierer ermöglichen Minimierungsprinzipien die Anwendung mathematisch mächtiger Methoden, wie beispielsweise diejenigen der Gamma-Konvergenz und die numerische Umsetzung der Modelle mittels robuster und effizienter Optimierungsalgorithmen. Darüber hinaus impliziert ein Minimierungsproblem einen natürlichen Rahmen für Fehlerschätzer bzw. Fehlerindikatoren und damit schlussendlich einen natürlichen Rahmen für adaptive Diskretisierungsverfahren.

Auch mit den zuvor beschriebenen Einschränkungen – Variationsprinzipien auf der Grundlage inkrementeller Energieminimierung – ist die dazu korrespondierende Klasse von Systemen für einen kurzen Übersichtsartikel noch immer zu groß. Aus diesem Grund sollen hier nur Modelle für Grenzflächen betrachtet werden. Während im ersten Teil des Artikels so genannte Sharp Interfaces im Vordergrund stehen, werden Diffuse Interfaces im zweiten Teil behandelt.

Modellierung verallgemeinerter Grenzflächen – Sharp Interfaces

Grenzflächen spielen in vielen Bereichen des Ingenieurwesens und der Materialwissenschaften eine entscheidende Rolle. Risse in quasi-spröden Werkstoffen, Scherbänder in duktilen Werkstoffen, Korngrenzen in Polykristallen oder Zwillingsgrenzen in metallischen Legierungen sind einige relevante Beispiele für Grenzflächen auf unterschiedlichen Längenskalen. Ist der Einfluss von Grenzflächen auf der makroskopischen Skala auf das makroskopische Verhalten unmittelbar ersichtlich, so ist auch der Einfluss mikroskopischer Grenzflächen auf das makroskopische Antwortverhalten oftmals signifikant. Ein Beispiel hierfür sind nanokristalline Materialien, deren mechanisches Verhalten aufgrund des hohen Anteils an Grenzflächen im Verhältnis zum Volumen primär durch die Eigenschaften der involvierten Grenzflächen definiert wird. Die resultierenden Eigenschaften unterscheiden sich oftmals gravierend von denen klassischer Bulkwerkstoffe, wodurch es möglich wird, Werkstoffe mit grundlegend neuen Eigenschaften zu entwickeln.

Um den Einfluss von Grenzflächen auf das effektive Materialverhalten prädiktiv und quantitativ analysieren zu können, werden entsprechende Modelle benötigt. Die hier skizzierte Klasse von Modellen berücksichtigt: (1) die Dekohäsion an Grenzflächen und (2) Oberflächenspannungen an Grenzflächen. Während die erste Eigenschaft in der Regel mit sogenannten Kohäsivzonenmodellen beschrieben wird (vgl. [D:60,B:62]), können Oberflächenspannungen auf Basis der Surface Elasticity abgebildet werden (s. [GM75,M76]).

Ogleich Kohäsivzonenmodelle bereits seit mehreren Jahrzehnten erfolgreich zur Beschreibung mechanischer Systeme angewendet worden sind, wiesen diese bis vor Kurzem fundamentale Probleme auf. So erfüllten sie zum Beispiel, außer unter der sehr restriktiven Annahme der materiellen Isotropie, weder den Drallsatz noch den Zweiten Hauptsatz der Thermodynamik bei finiten Deformationen, s. [ORM:15, ORM:16,VSSG:13]. Erweiterte Theorien, welche diese Defizite nicht aufweisen, wurden vom Autor in [MS:11,ORM:15,ORM:16] vorgeschlagen. Zwar beheben diese erweiterten Theorien in der Tat die zuvor beschriebenen Probleme, jedoch ist die Herleitung dieser Theorien keineswegs einheitlich und kanonisch. Dadurch müssen teilweise aufwändige Techniken verwendet wer-

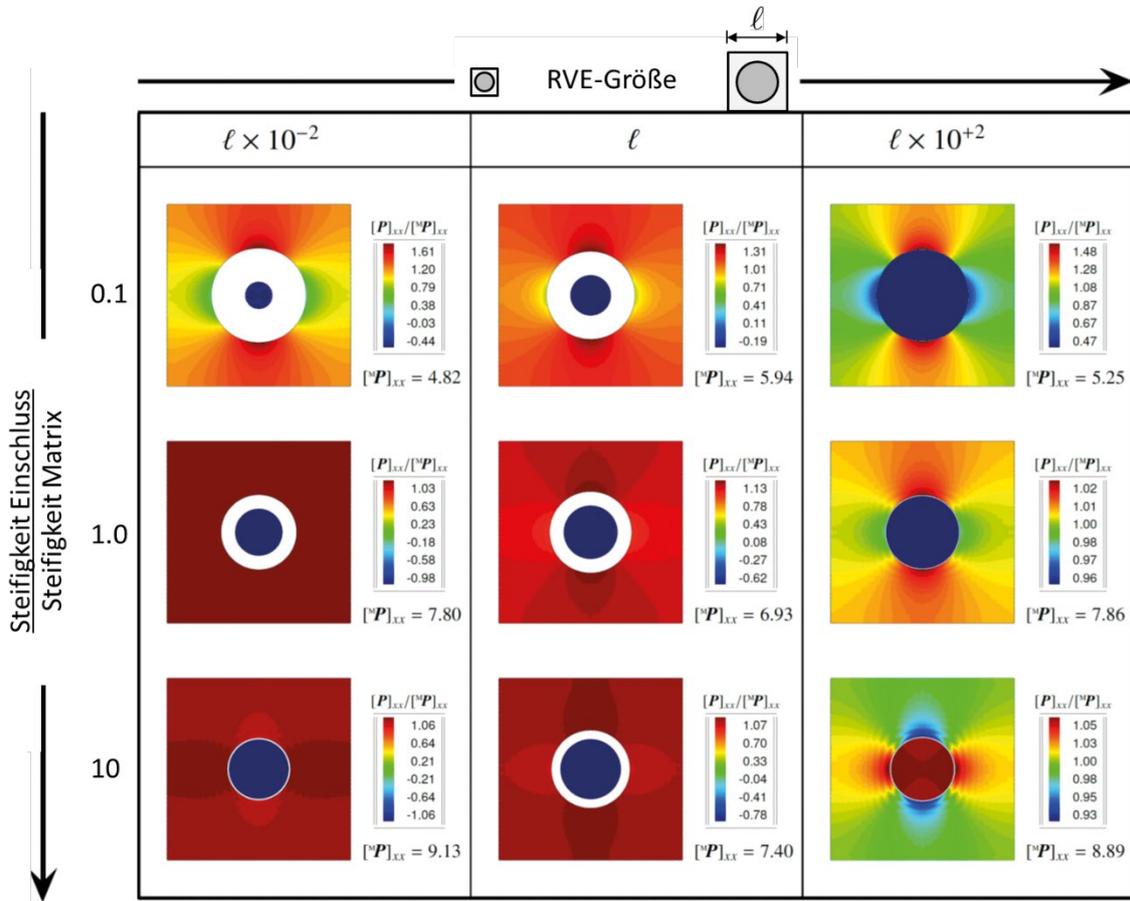


Abb. 1: Repräsentatives Volumenelement (RVE) – Einschluss eingebettet in Matrix. Das RVE wird auf makroskopischer Skala durch eine Volumenerweiterung von 20% belastet. Gezeigt sind die makroskopischen (gemittelten) Spannungen (xx -Koordinate) in Abhängigkeit von der Größe des RVEs und des Steifigkeitskontrasts. Die Ergebnisse des rein hyperelastischen mechanischen Systems sind mit einem verallgemeinerten Grenzflächenmodell berechnet worden (sowohl Anteile eines Kohäsivzonenmodells als auch Anteile der Surface Elasticity). Die Ergebnisse sind der Arbeit [JSM:17] entnommen.

den. Genau an dieser Stelle können Variationsprinzipien aber einen wichtigen Beitrag leisten. So ist beispielsweise der in [ORM:16] diskutierte Rahmen in [HORM:18] auf der Grundlage inkrementeller Energieminimierung erneut motiviert und erneut entwickelt worden. Dabei ist der Impulssatz über die Euler-Lagrange-Gleichungen eingeführt und der Drallsatz aus einer Rotationsinvarianz der zugrundeliegenden Energie gewonnen worden. Aufgrund einer solchen Potenzial- bzw. Energie-basierten Vorgehensweise kann die Formulierung neuer konstitutiver Rahmen gänzlich auf die Motivation erweiterter Energien beschränkt werden.

Um die zuvor skizzierte variationelle Vorgehensweise zu verdeutlichen, wird an dieser Stelle ein Beispiel angeführt. Ziel soll die Entwicklung eines konsistenten Kohäsivzonenmodells sein (vgl. [HORM:18]) – konsistent mit den fundamentalen Grundgleichungen der Physik, wie dem Drallsatz. Der Modellierungsrahmen soll dabei auch materielle Anisotropien abbilden können.

Die flächenspezifische Helmholtzenergie Ψ_I bei Kohäsivzonenmodellen ist abhängig vom Verschiebungssprung (Diskontinuität), der im Folgenden mit $[[\mathbf{u}]]$ bezeichnet wird. Inelastisches Materialverhalten wird auf der Basis interner

Geschichtsvariablen α erfasst. Um auch eine materielle Anisotropie in das Modell zu integrieren, wird schließlich der Deformationsgradient $\bar{\mathbf{F}}$ der Grenzfläche ebenfalls in die Helmholtzenergie mit aufgenommen. Dadurch ist es beispielsweise möglich, den Normalenvektor der Grenzfläche in der verformten Konfiguration zu berechnen und damit eine Aufspaltung in die unterschiedlichen, fundamentalen Versagensmoden I, II und III der Bruchmechanik vorzunehmen. Dabei ist anzumerken, dass in der verformten Konfiguration beide Seiten der geöffneten Grenzfläche durch unterschiedliche Deformationsgradienten charakterisiert sind. Die Wahl von $\bar{\mathbf{F}}$ ist daher keinesfalls eindeutig. In der Regel wird der gemittelte Deformationsgradient verwendet.

Gemäß den vorherigen Ausführungen wird also eine Grenzflächenenergie der Form $\Psi_I = \Psi_I([[\mathbf{u}]], \bar{\mathbf{F}}, \alpha)$ betrachtet. Die Gesamtenergie I des Systems wird vervollständigt durch die Wahl einer (volumen- oder massenspezifischen) Bulk-Energie Ψ_B . I wird berechnet, indem die spezifischen Energien einfach über die entsprechenden Volumina und Flächen integriert werden. Im Rahmen einer variationellen Beschreibung ist der Impulserhaltungssatz implizit durch I definiert. Er folgt direkt aus den Euler-

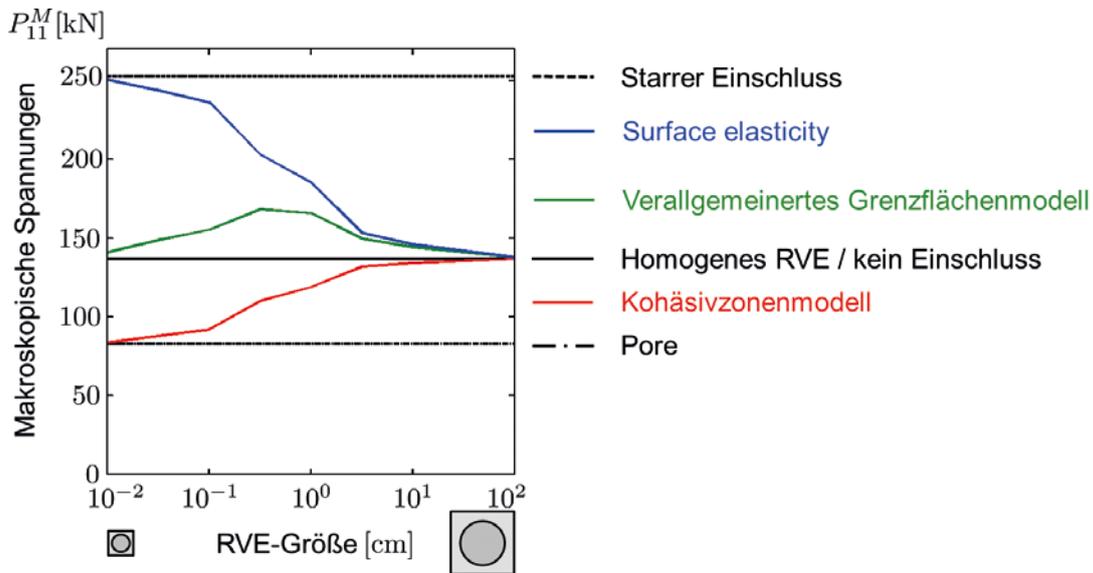


Abb. 2: Repräsentatives Volumenelement (RVE) – Einschluss eingebettet in Matrix. Das RVE wird auf makroskopischer Skale durch einen einaxialen Dehnungszustand belastet. Ein Größeneffekt induziert durch die Interaktion zwischen Volumen- und Grenzflächenenergien ist zu erkennen. Dieser ist abhängig vom zugrundeliegenden Grenzflächenmodell. Die Ergebnisse sind der Arbeit [HORM:18] entnommen.

Lagrange-Gleichungen, s. [HORM:18]. Für die Vereinfachung $\Psi_I = \Psi_I([\mathbf{u}], \alpha)$ ist er äquivalent mit der Stetigkeit des Traktionsvektors über die Grenzfläche. Dies entspricht dem Impulserhaltungssatz klassischer Kohäsivzonenmodelle. Die Annahme $\Psi_I = \Psi_I(\bar{\mathbf{F}}, \alpha)$ hingegen führt auf natürliche Weise auf die Surface Elasticity (s. [GM75,M76]). Darüber hinaus kann der Drallsatz direkt über eine Invarianz der spezifischen Helmholtzenergien beschrieben werden – wie beispielsweise bei klassischen hyperelastischen Bulkmodellen der Form $\Psi_B = \Psi_B(\mathbf{F}) = \hat{\Psi}_B(\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F})$. Hier führt die Invarianz der Parametrisierung $\hat{\Psi}_B(\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F})$ (materielle Objektivität) unmittelbar auf die Symmetrie der Cauchy-Spannungen und somit auf den Drallsatz. Analog kann die Potenzialstruktur auch für das verallgemeinerte Grenzflächenmodell verwendet werden. Unter der Annahme, die internen Variablen sind invariant unter einer lokalen Isometrie der Momentankonfiguration (eine andere Annahme ist ebenso zulässig), kann die Invarianz von $\Psi_I = \Psi_I([\mathbf{u}], \bar{\mathbf{F}}, \alpha)$ automatisch durch einen Ansatz der Form $\Psi_I([\mathbf{u}], \bar{\mathbf{F}}, \alpha) = \hat{\Psi}_I([\mathbf{u}] \cdot [\mathbf{u}], \bar{\mathbf{F}}^T \cdot \bar{\mathbf{F}}, [\mathbf{u}] \cdot \bar{\mathbf{F}}, \alpha)$ gewährleistet werden – völlig analog zu Bulk-Modellen. Für dissipative Prozesse ist das Modell durch Evolutionsgleichungen für die internen Variablen zu schließen. Den Arbeiten [P:95,OR:99,OR:99,CHM:02,P:05,MR:15] folgend wird dazu ein Dissipationsfunktional verwendet – im Gegensatz zu Bulk-Modellen jedoch ein flächenspezifisches. Durch diesen Ansatz ist einerseits die thermodynamische Konsistenz gesichert – der Zweite Hauptsatz ist also erfüllt – und das Gesamtmodell lässt sich nach zeitlicher Diskretisierung in ein inkrementelles Minimierungsproblem überführen, vgl. [MR:15]. Numerische Analysen auf Grundlage des in [HORM:18] vorgeschlagenen, verallgemeinerten Grenzflächenmodells sind in Abb. 1. und in Abb. 2 zusammenfassend dargestellt. Dabei ist ein hyperelastischer Einschluss in einer

hyperelastischen Matrix betrachtet worden. Diese Bulkphasen werden durch das Grenzflächenmodell separiert. Wie in Abb.1 entlang der horizontalen Entwicklung zu erkennen, führt die unterschiedliche Skalierung zwischen Bulk- und Grenzflächenenergien auf natürliche Weise zu einem Größeneffekt. Für das gewählte Grenzflächenmodell ist die resultierende Größenskalierung nicht-monoton. So sind beispielsweise für das in der ersten Zeile in Abb. 1 gewählte Kontrastverhältnis von 0.1 die effektiven Spannungen für die mittlere RVE-Größe maximal – nicht für das kleinste oder das größte RVE. Um diese nicht-triviale Skalierung besser zu erläutern, ist ein ähnliches Beispiel erneut in Abb. 2 untersucht worden. Gemäß Abb. 2 korrespondiert ein klassisches Kohäsivzonenmodell zur Skalierung „je kleiner, je weicher“. Surface Elasticity hingegen ist charakterisiert durch „je kleiner, je steifer“. Das verallgemeinerte Grenzflächenmodell, welches als nichttriviale Superposition dieser Grenzfälle betrachtet werden kann, resultiert daher in einer komplexen, nicht-monotonen Skalierung – in Abhängigkeit von den gewählten Modellparametern. Dadurch ist es möglich, neue Werkstoffe mit neuen Eigenschaften zu entwickeln.

Phasenfeldmodelle – Diffuse Interfaces

Als zweites Beispiel für die Anwendung von Variationsprinzipien auf der Grundlage inkrementeller Energieminimierung zur Beschreibung von Grenzflächen werden Diffuse Interfaces im Sinne einer Phasenfeldapproximation betrachtet, s. [AC:79,CH:58]. Die Variationsstruktur der ursprünglichen Allen-Cahn-Theorie ist dabei mathematisch offensichtlich und an das physikalische Problem gekoppelt – das System relaxiert durch Änderung der Mikrostruktur zu energetisch optimalen Zuständen. Aber auch die Kopplung des Allen-Cahn-Modells mit dem me-

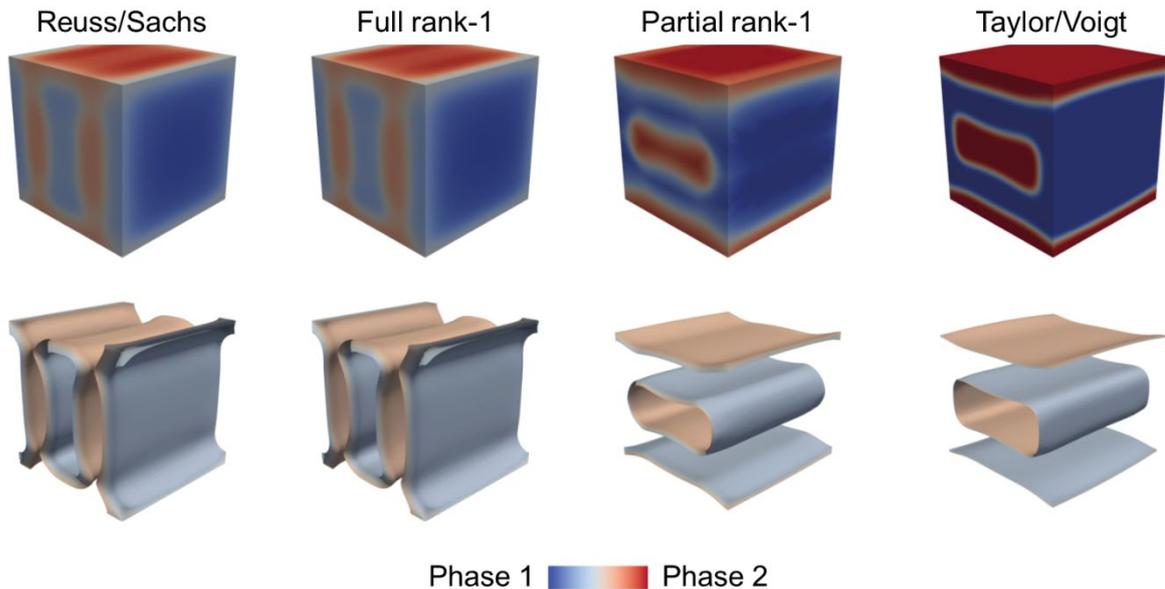


Abb. 3: Phasenfeldsimulation basierend auf Allen-Cahn-Theorie gekoppelt mit dem mechanischen Problem. Die Mikrostruktur der Zweiphasenmischung nach vollständiger Relaxierung ist gezeigt. Während der Phasenfeldparameter in der oberen Zeile dargestellt ist, illustriert die untere Zeile die Mitte der Grenzfläche (Isolinie für Phasenfeldparameter = 0.5). Für die verwendete Finite-Elemente-Diskretisierung ist die finale Mikrostruktur abhängig vom Homogenisierungsansatz im Diffuse Interface. Die Ergebnisse sind der Arbeit [BM:17] entnommen.

chanischen Problem lässt sich durch ein Minimierungsproblem beschreiben, s. [HM:12,MSM:14,BM:17]. Die zu minimierende Energie des gekoppelten Gesamtproblems setzt sich diesbezüglich aus der Approximation der Grenzflächenenergien (Phasengrenzen), der zeitlich integrierten Dissipation resultierend aus der Bewegung der Phasengrenzen sowie aus den Bulkenergien zusammen. Während die Bulkenergie für die einzelnen, reinen Phasen klar definiert ist, bedarf der Ansatz für die Bulkenergie im Diffuse Interface weitergehender Überlegungen. Ein natürlicher Rahmen für die Berechnung von Mischenergien – im Diffuse Interface koexistieren mehrere Phasen gleichzeitig – ist die Homogenisierungstheorie. In Hinblick auf die Einbettung in die Phasenfeldmethode ist der numerischen Effizienz des Homogenisierungsansatzes in diesem Zusammenhang große Aufmerksamkeit zu schenken. Aus diesem Grund ist in [MSM:14] vorgeschlagen worden, die Verzerrungen in jeder Phase des Diffuse Interfaces durch einen räumlich konstanten Deformationsgradienten zu approximieren. Dabei ist anzumerken, dass sich diese Approximation auf einen Materialpunkt bezieht, der Deformationsgradient kann demzufolge im Gesamtproblem in der Tat räumlich variieren – auch im Diffuse Interface. Basierend auf dieser kinematischen Vereinfachung lassen sich dann verschiedene Homogenisierungsansätze direkt in die variationelle Phasenfeldmodellierung einbetten. Eine freie, unrestringierte Relaxierung der Deformationsgradienten korrespondiert beispielsweise zur klassischen Reuss/Sachs Annahme. Für die Wahl der gleichen Verzerrung in allen Phasen (keine Relaxation) erhält man eine Homogenisierung nach Taylor/Voigt. Aber auch nicht-klassische, verbesserte Homogenisierungsansätze lassen sich durch dieses Vorgehen auf natürliche Weise in das Phasenfeldmodell integrieren. Wird zum Beispiel eine kinematische Kompatibilität der Deformationsgradienten im Sinne der

Cauchy-Hadamard-Bedingung konstruktiv erzwungen, so erfüllt die Relaxierung a priori sowohl statische als auch kinematische Kompatibilität – Gleichgewicht am Interface ist somit kanonisch in das Gesamtmodell integriert, vgl. auch die Arbeiten [B:76,D:99,CHM:02,BCHH:04,MLG:04, HM:12] zur Rang-1-Konvexifizierung. Zusammenfassend ist die kanonische Umsetzung physikalisch sinnvoller Homogenisierungsmethoden also ein wesentlicher Vorteil der zugrundeliegenden Variationsstruktur. Auch wenn im Grenzfall alle Homogenisierungsannahmen zum identischen Sharp-Interface-Problem konvergieren, so wird die Konvergenzgeschwindigkeit maßgeblich durch die Wahl der Homogenisierung beeinflusst, vgl. [KFM:17]. Darüber hinaus ist anzumerken, dass in der Regel die räumliche Diskretisierung noch nicht ausreichend fein ist, so dass die Ergebnisse in der Tat abhängig von den Modellannahmen im Interface sind. Dies ist beispielsweise klar in Abb. 3 zu erkennen. Die Modelle, welche mit „Full rank 1“ bzw. mit „Partial rank 1“ bezeichnet werden, berücksichtigen dabei kinematische Kompatibilität an der Grenzfläche durch Anwendung der Cauchy-Hadamard-Bedingung. Während bei „Full rank 1“ der Normalenvektor des Interfaces Teil der lokalen Relaxierung ist (im Materialpunkt), wird der Normalenvektor bei „Partial rank 1“ aus dem Phasenfeld abgeleitet. Dies kann daher als eine Relaxierung auf globaler Ebene interpretiert werden. Aus der Definition der zu den Relaxierungen korrespondierenden Räume können zudem Abschätzungen für die resultierenden Energien abgeleitet werden. Während die Voigt/Taylor-Annahme mit der höchsten Energie verbunden ist, reduziert eine Relaxierung gemäß dem „Partial rank 1“ Modell diese. Eine weitere Reduktion erfolgt durch lokale Energieminimierung des Normalenvektors („Full rank 1“). Schließlich ist eine vollständige, unrestringierte Minimierung durch das energetische Minimum charakterisiert (Reuss/Sachs).

Fazit und Ausblick

Variationsprinzipien, insbesondere solche auf Basis inkrementeller Energieminimierung, stellen mächtige Rahmen für die Herleitung und Entwicklung neuer Materialmodelle dar. Exemplarisch ist diese Aussage im vorliegenden Artikel anhand zweier Beispiele belegt worden. Einerseits wurde ein verallgemeinertes Grenzflächenmodell diskutiert, welches in konsistenter Weise sowohl klassische Kohäsivzonenmodelle als auch die sogenannte Surface Elasticity beinhaltet. Das Grenzflächenmodell erlaubt dabei, beliebige materielle Anisotropien abzubilden bei gleichzeitiger Erfüllung der Grundgleichungen der Physik. Um diese Eigenschaften zu gewährleisten, ist die Potenzialstruktur des Modells genutzt worden – also ein fester Bestandteil der Variationsstruktur. Andererseits ist ein inkrementelles Energieminimierungsproblem für die Beschreibung mechanisch getriebener Phasentransformationen vorgestellt worden. Die Variationsstruktur des Problems erlaubte es dabei, verbesserte Homogenisierungsansätze in die Modellierung des Diffuse Interfaces einzubinden. Im Gegensatz zu zuvor verwendeten Ansätzen wird dadurch sowohl kinematische als auch statische Kompatibilität an der Grenzfläche erfüllt.

Obgleich Variationsprinzipien in der Materialmodellierung nicht gänzlich neu sind, und auch Algorithmen basierend auf inkrementeller Energieminimierung bereits publiziert worden sind, so ist das Anwendungsspektrum dieser Methoden sicherlich noch immer nicht annähernd ausgeschöpft. Darüber hinaus werden primär relativ einfache Prototypmodelle betrachtet und die Erweiterung sind keineswegs trivial, welche zur Beschreibung komplexer Phänomene notwendig sind. Genau hier setzt das neue Schwerpunktprogramm 2256 „Variational Methods for Predicting Complex Phenomena in Engineering Structures and Materials“ an – ein Schlußstein zwischen der angewandten Mathematik und der Mechanik und somit ein Programm im Kern der GAMM.

Danksagung

Die in diesem Artikel zusammengefassten Ergebnisse sind das Resultat zahlreicher Forschungs Kooperationen. An dieser Stelle möchte sich der Autor des Artikels daher bei all denjenigen bedanken, die dazu Beiträge geleistet haben. Im Bereich der Sharp Interfaces sind dies insbesondere die Kollegen Prof. Matti Ristinmaa und Prof. Niels Saabye Ottosen (beide Lund University) sowie Prof. Ali Javili (Bilkent University). Bei der Modellierung der Diffuse Interfaces (Phasenfeldmodellen) ist die Gruppe um Prof. Steinbach (ICAMS, Bochum), allen voran Dr. Oleg Shchyglo, namentlich hervorzuheben. Selbstverständlich sollen auch die Beiträge innerhalb des Instituts für Mechanik nicht vergessen werden. Namentlich dafür möchte der Autor die ehemaligen Doktoranden Dr. Tim Heitbreder (Bereich verallgemeinerter Grenzflächenmodelle; Sharp Interfaces) und Dr. Alexander Bartels (Phasenfeldmodelle) nennen. Schließlich möchte sich der Autor bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) für die finanzielle Unterstützung bedanken – exemplarisch durch

die Sachbeihilfe „Phasenfeldbeschreibung allgemeiner imperfekter Grenzflächen“ und durch das Projekt „Rate-independent systems in solid mechanics“ im Rahmen des SPP 2256.

Literatur

- [AC:79] S. M. Allen, J. W. Cahn. A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening. *Acta Metallurgica* 27, 1085--1095, 1979
- [B:62] G. Barenblatt. The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture. *Advances in Applied Mechanics* 7, 55–129, 1962
- [B:76] J. M. Ball. Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elasticity. *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 63, pages, 337–403, 1976
- [BCHH:04] S. Bartels, C. Carstensen, K. Hackl, U. Hoppe. Effective relaxation for microstructure simulations: algorithms and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 193, 5143–5175, 2004
- [BM:17] A. Bartels, J. Mosler. Efficient variational constitutive updates for Allen-Cahn-type phase field theory coupled to continuum mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 317, 55–83, 2017
- [CH:58] J. W. Cahn, J. E. Hilliard. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy. *Journal of Chemical Physics* 28, 258--267, 1958
- [CHM:02] C. Carstensen, K. Hackl, and A. Mielke. Nonconvex potentials and microstructure in finite-strain plasticity. *Proc. Royal Soc. London Ser. A*. 458 (2018), 299–317, 2002.
- [D:60] D. Dugdale. Yielding of steel sheets containing slit. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 8, 100–108, 1960
- [D:99] G. Dolzmann. Numerical Computation of Rank-One Convex Envelopes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 36, 1621–1635, 1999
- [GM:75] M. Gurtin and A. I. Murdoch. A Continuum Theory of Elastic Material Surfaces. *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 57, 291–323, 1975
- [HM:12] F.E. Hildebrand, C. Miehe. A phase field model for the formation and evolution of martensitic laminate microstructure at finite strains. *Philosophical Magazine*, 92, 4250–4290, 2012
- [HM:12] M. Homayonifar, J. Mosler. Efficient modeling of microstructure evolution in magnesium by energy minimization. *International Journal of Plasticity*, 28, 1–20, 2012
- [HORM:18] T. Heitbreder, N. S. Ottosen, M. Ristinmaa, J. Mosler. On damage modeling of material interfaces: Numerical implementation and computational homogenization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 337, 1–27, 2018
- [JSM:17] A. Javili, P. Steinmann, J. Mosler. Micro-to-macro transition accounting for general imperfect interfaces. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 317, 274–317, 2017
- [KFM:17] B. Kiefer, T. Furlan, J. Mosler. A numerical convergence study regarding homogenization assumptions in phase field modeling. *Numerical Methods in Engineering* 112, 1097–1128, 2017
- [M:76] A. Ian Murdoch. A thermodynamical theory of elastic material interfaces. *Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics* 29.3, 245–275, 1976
- [MLG:04] C. Miehe, M. Lambrecht, E. Gürses. Analysis of material instabilities in inelastic solids by incremental energy minimization and relaxation methods: evolving deformation microstructures in finite plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 52 2725–2769, 2004
- [MR:15] A. Mielke, T. Roubicek. *Rate-Independent Systems Theory and Application*, Springer-Verlag, 2015

- [MS:11] J. Mosler, I. Scheider. A thermodynamically and variationally consistent class of damage-type cohesive models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 59, 1647–1668, 2011
- [MSM:14] J. Mosler, O. Shchyglo, H. Montazer Hojjat. A novel homogenization method for phase field approaches based on partial rank-one relaxation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 68, 251–266, 2014
- [OR:99] Z. Ortiz and E. Repetto. Nonconvex energy minimization and dislocation structures in ductile single crystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 47, 397–462, 1999.
- [ORM:15] N.S. Ottosen, M. Ristinmaa, J. Mosler. Fundamental physical principles and cohesive zone models at finite displacements - limitations and possibilities. *International Journal of Solids and Structures* 53, 70–79, 2015
- [ORM:16] N. S. Ottosen, M. Ristinmaa, J. Mosler. Framework for non-coherent interface models at finite displacement jumps and finite strains. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 90, 124–141, 2016
- [OS:99] M. Ortiz, L. Stainer. The variational formulation of viscoplastic constitutive updates. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 171, 419–444, 1999
- [P:05] H. Petryk. Thermodynamic conditions for stability in materials with rate-independent dissipation. *Phil. Trans. R. Soc. A* 363, 2479–2515, 2005
- [P:95] H. Petryk. Thermodynamic stability of equilibrium in plasticity. *J. Non-Equilib. Thermodyn.* 20, 132–149, 1995
- [VSSG:13] B. Vossen, P. Schreurs, O. van der Sluis, M. Geers. On the lack of rotational equilibrium in cohesive zone models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 254, 145–153, 2013



Jörn Mosler studierte 1994–1998 an der Ruhr-Universität Bochum Bauingenieurwesen. Im Jahr 2002 folgte seine Promotion an der selbigen Universität mit einer Arbeit zur numerischen Beschreibung von Rissen und Scherbändern. Nach einer Postdoc-Phase und einem einjährigen Auslandsaufenthalt (2004–2005) am California Institute of Technology (Computational Solid Mechanics Group) folgte er 2007 dem Ruf auf eine Juniorprofessur für Computational Mechanics an der Ruhr-Universität Bochum. In diesem Jahr habilitierte er sich auch. Nur kurze Zeit später nahm er 2008 den Ruf auf eine Universitätsprofessur für Computational Mechanics an der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel an. Diese Professur war eine Shared Professur und mit der Leitung der Abteilung „Simulation of Solids and Structures“ am Helmholtz-Zentrum Geesthacht verbunden. Seit 2011 ist er Professor für Mechanik an der TU Dortmund. Seine Forschungsinteressen liegen in der Materialmodellierung – insbesondere auf der Grundlage von Variationsprinzipien.



siam[®] 2021 Conference Schedule

Conferences will be held in person, virtually, or hybrid in 2021. Please check siam.org for up-to-date information.

SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE21)

March 1-5, 2021 **HAPPENING VIRTUALLY**

SIAM International Conference on Data Mining (SDM21)

April 29-May 1, 2021 **HAPPENING VIRTUALLY**

SIAM Conference on Applied Linear Algebra (LA21)

May 17-21, 2021 New Orleans, Louisiana, U.S. **HAPPENING VIRTUALLY or HYBRID**

SIAM Conference on Mathematical Aspects of Materials Science (MS21)

May 17-28, 2021 **HAPPENING VIRTUALLY**

SIAM Conference on Applications of Dynamical Systems (DS21)

May 23-27, 2021 **HAPPENING VIRTUALLY**

SIAM Conference on Financial Mathematics and Engineering (FM21)

June 1-4, 2021 Philadelphia, Pennsylvania, U.S.

SIAM Conference on Mathematical & Computational Issues in the Geosciences (GS21)

June 21-24, 2021 Milan, Italy

Mathematical Congress of the Americas 2021

July 19-24, 2021 **HAPPENING VIRTUALLY**

SIAM Annual Meeting (AN21)

July 19-23, 2021 Spokane, Washington, U.S.

SIAM Conference on Control and Its Applications (CT21)

July 19-21, 2021 Spokane, Washington, U.S.

SIAM Conference on Applied and Computational Discrete Algorithms (ACDA21)

July 19-21, 2021 Spokane, Washington, U.S.

SIAM Conference on Optimization (OP21)

July 20-23, 2021 Spokane, Washington, U.S.

SIAM Conference on Discrete Mathematics (DM21)

July 20-23, 2021 Spokane, Washington, U.S.

SIAM Conference on Applied Algebraic Geometry (AG21)

August 16-20, 2021 College Station, Texas, U.S.

SIAM Conference on Geometric and Physical Modeling (GD/SPM21)

September 27-29, 2021 Davis, California, U.S.

Dr.-Ing. Jana Wilmers studierte Chemie mit Materialwissenschaften (Bachelor) sowie Materialwissenschaften (Master). Im Anschluss an das Masterstudium trat sie 2012 eine Stelle als wissenschaftliche Mitarbeiterin bei Prof. Swantje Bargmann am Helmholtz-Zentrum Geesthacht an. Während ihrer Promotion im Bereich der multiphysikalisch gekoppelten Modellierung polymerbasierter Materialien führten sie Forschungsaufenthalte an die Nagoya University in Japan und an die University of Cape Town in Südafrika. 2016 schloss sie ihre Promotion im Fachgebiet Maschinenbau an der Technischen Universität Hamburg mit Auszeichnung ab. Als Postdoc an der Bergischen Universität Wuppertal (BUW) forscht sie im Bereich Hochleistungs-Nanokomposite und biologische Materialien. Seit Ende 2020 leitet sie an der BUW den Lehrstuhl „Computergestützte Modellierung in der Produktentwicklung“ im Rahmen einer Vertretungsprofessur.

An ihrem Studium der Chemie und Materialwissenschaft reizte Jana Wilmers das interdisziplinäre Arbeiten an der Schnittstelle zwischen Chemie, Physik und Ingenieurwissenschaft. Schon früh faszinierte sie die theoretische Beschreibung und Modellierung des mechanischen Materialverhaltens. Im Masterstudium spezialisierte sie sich daher in Richtung Kontinuumsmechanik und physikalische Werkstoffmodellierung und nahm eine Stelle als studentische Mitarbeiterin im Bereich Mechanik an. Am Lehrstuhl für Technische Mechanik der Universität des Saarlandes unter Leitung von Prof. Stefan Diebels beschäftigte sie sich im Rahmen ihrer Masterarbeit mit der Analyse verschiedener Finite Element-Verfahren zur effektiven Modellierung von Faserkompositen [1]. Dabei wurde sie durch ein Stipendium der Stiftung Industrieforschung gefördert. An dieser Arbeit interessierte sie vor allem die Verknüpfung physikalischer Materialmodellierung und mathematischer Verfahren, um mit Hilfe theoretischer und angewandter Wissenschaft neue fundierte Einsichten in die Materialphysik zu liefern.

Das interdisziplinäre Forschungsinteresse an der Materialmodellierung und numerischen Mechanik teilt Jana Wilmers mit ihrer Dokormutter Prof. Swantje Bargmann, unter deren Leitung sie im Dezember 2012 ihre Tätigkeit am Helmholtz-Zentrum Geesthacht begann. Dort entwickelte und implementierte sie ein Materialmodell für die nicht-klassische Case-II-Diffusion in Polymeren [2,3]. Dieser Prozess zeichnet sich durch eine starke Kopplung zwischen Transport, Wärmeleitung und großen mechanischen Deformationen aus.

Die Entwicklung von multiphysikalisch gekoppelten Materialmodellen war auch Thema von Frau Wilmers Forschung im SFB 986 „Maßgeschneiderte Multiskalige Materialsysteme“ zur Funktionalisierung von Hochleistungs-Nanokompositen. In den im SFB 986 betrachteten Metall-Polymer-Nanokompositen resultieren Grenzflächenladungen, die bei Anlegen eines elektrischen Feldes entstehen, in makroskopischen Deformationen des Materials. Die Nano-

komposite eignen sich also als Aktuatoren, deren Funktion noch verstärkt wird wenn das Polymer selbst elektroaktiv ist. Um die in den verschiedenen Phasen eines solchen

Komposits aktiven Mechanismen abbilden zu können, entwickelte Jana Wilmers eine grenzflächen-erweiterte Kontinuumstheorie für die chemoelektromechanische Kopplung [4,5]. Hierbei wird, wie in Abb. 1 dargestellt, der Komposit als ein System aus drei Phasen mit unterschiedlichem physikalischen Verhalten modelliert. Sowohl für das Volumenmaterial als auch für die Grenzfläche wurden multiphysikalisch gekoppelte Materialmodelle etabliert. Die Implementierung dieser Modelle erforderte insbesondere zur Abbildung der Grenzfläche die Entwicklung neuer numerischer Methoden, die den Transfer von Volumenfeldgrößen zu Grenzflächengrößen ermöglichen [4]. Sowohl im Modell als auch in der Simulation wird das gekoppelte Mehrfeldproblem vollständig berücksichtigt, so dass sowohl die Interaktion der verschiedenen

Aktuationsmechanismen als auch transportlimitierende Effekte in der Struktur untersucht werden können (Abb. 2). Die Arbeit in diesem Projekt erfolgte in enger Zusammenarbeit mit Experimentatoren im SFB sowie im Rahmen eines Forschungsaufenthaltes in Kooperation mit der Gruppe von Prof. B. Daya Reddy an der University of Cape Town (UCT), Südafrika. Auch nach Abschluss ihrer Promotion setzte Jana Wilmers die Forschung an diesem Projekt in Kooperation mit der UCT fort [6].

Während ihrer Promotionszeit war Frau Wilmers außerdem für einige Monate zu Gast bei Prof. Nobutada Ohno an der Nagoya University, Japan, gefördert von der Japan Society for the Promotion of Science. Hier konnte sie nicht nur eine Begeisterung für die japanische Küche entwickeln, sondern vor allem auch an der Modellierung von Faserkompositen mit unerwartetem auxetischem Verhalten arbeiten. Die Verknüpfung von materialwissenschaftlichen Fragestellungen mit Methoden der Modellierung und Simulation lieferte in diesem und weiteren Projekten [7,8] neue Einsichten in die zugrundeliegenden physikalischen Prinzipien und

STECKBRIEF



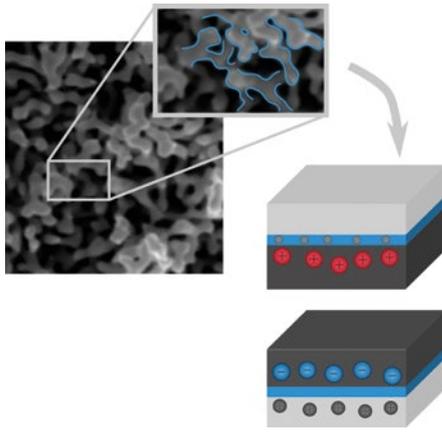


Abb. 1: Nanokompositmaterialien zeichnen sich durch ihr großes Grenzfläche-zu-Volumenverhältnis aus. In der grenzflächenverweiterten Kontinuumstheorie werden Grenzflächen (blau) und ihr energetisches Verhalten explizit berücksichtigt.

ermöglichte eine Charakterisierung von Mechanismen, die experimentell nicht oder nur schwer zugänglich sind. In ihrer Arbeit als Postdoc an der Bergischen Universität Wuppertal beschäftigt sich Jana Wilmers nun verstärkt mit

der Modellierung mikrostrukturierter Materialien [8,9] und biologischer Komposite wie dem Zahnschmelz, dessen hierarchische Struktur zwar gut dokumentiert ist, aber dessen Mechanik bis heute nicht vollständig verstanden ist [10]. Fokus der Forschung ist dabei die Modellierung des Einflusses von Grenzflächen und Strukturierungselementen auf die mechanischen Eigenschaften in verschiedenen Systemen. Diese Arbeiten erfolgen in enger Zusammenarbeit u.a. mit Wissenschaftlern an der Universität Bremen, der Montanuniversität Leoben, Österreich, dem Conservatoire National des Arts et Métiers, Frankreich, der Sungkyunkwan University, Südkorea, der Nanyang Technological University, Singapur, und der Brown University, USA. Ende 2020 übernahm Frau Wilmers die Vertretung der Professur im Fachgebiet „Computergestützte Modellierung in der Produktentwicklung“ an der Bergischen Universität Wuppertal. Nun freut sie sich darauf, dass Anfang 2021 die Arbeiten am DFG-geförderten Projekt „Modellierung und Untersuchung der mechanischen Eigenschaften von grenzflächen-strukturierten Mehrschichtkompositen unter großen Deformationen“ unter ihrer Leitung gestartet werden.

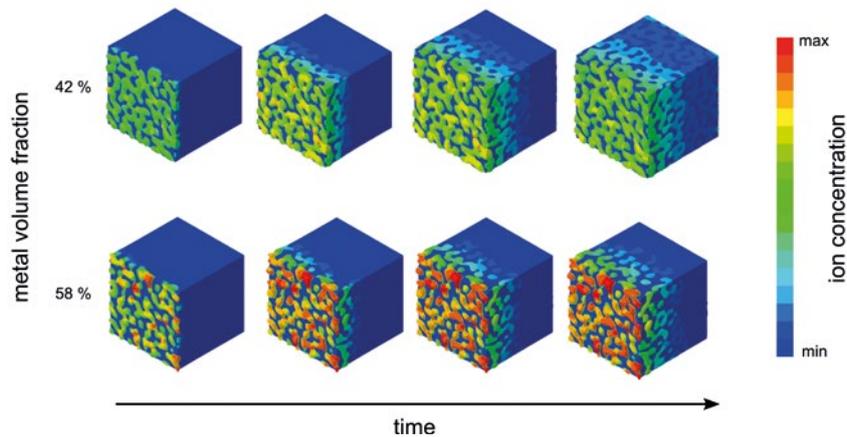


Abb. 2: Multiphysikalisch gekoppelte Modellierung des Nanokomposits erlaubt es, transportlimitierende Effekte resultierend aus der nanoskaligen Mikrostruktur zu simulieren und ihren Einfluss auf Aktuationsamplitude, Reaktionszeiten und Lastpfade im Komposit zu untersuchen.

Literatur

- [1] J. Wilmers, B. Lenhof. Comparison of Different FE-approaches for Modelling of Short Fibre Composites. Technische Mechanik 34 (2), 90–103, 2014.
- [2] J. Wilmers, S. Bargmann. Simulation of non-classical diffusion in polymers. Heat and Mass Transfer 50 (11), 1543–1552, 2014.
- [3] J. Wilmers, S. Bargmann. A continuum mechanical model for the description of solvent induced swelling in polymers. European Journal of Mechanics A/ Solids 53, 10–18, 2015.
- [4] J. Wilmers, A. McBride, S. Bargmann. Interface Elasticity Effects in Polymer-Filled Nanoporous Metals. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 99, 163–177, 2017.
- [5] J. Wilmers, S. Bargmann. Functionalisation of Metal-Polymer-Nanocomposites: Chemoelectromechanical Coupling and Charge Carrier Transport. Extreme Mechanics Letters 21, 57–64, 2018.
- [6] E. Griffiths, J. Wilmers, S. Bargmann, D. Reddy. Nanoporous metal based composites: giving polymers strength and making metals move. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 137, 103848, 2020.
- [7] B. Sarac, J. Wilmers, S. Bargmann. Property optimization of metallic glasses via structural design. Materials Letters 134, 306–310, 2014.
- [8] S. Drücker, J. Wilmers, S. Bargmann. Influence of the microstructure on effective mechanical properties of carbon nanotube composites. Coupled Systems Mechanics 6, 1–15, 2017.
- [9] S. Bargmann, B. Klusemann, J. Markmann, J. Schnabel, K. Schneider, C. Soyarslan, J. Wilmers. Generation of 3d representative volume elements (RVEs) for heterogeneous materials: a review. Progress in Materials Science 96, 322–384, 2018.
- [10] J. Wilmers, S. Bargmann. Nature’s design solutions in dental enamel: Uniting high strength and extreme damage resistance. Acta Biomaterialia 107, 1–24, 2020.

Kontakt

Dr.-Ing. Jana Wilmers
 Fachgebiet für Computergestützte Modellierung in der Produktentwicklung
 Bergische Universität Wuppertal
 Gaußstr. 20, 42119 Wuppertal
 Tel.: +49 (0)202 439 2086
 wilmers@uni-wuppertal.de
<https://www.mechanics.uni-wuppertal.de/>

André Uschmajew

ist Forschungsgruppenleiter am Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften in Leipzig. Er studierte Mathematik an der TU Berlin, wo er 2013 seine Promotion abschloss. Nach einem Postdoc-Aufenthalt an der EPF Lausanne war er von 2014 bis 2017 Bonn Junior Fellow Professor an der Universität Bonn, wo er am Institut für Numerische Simulation tätig war. Seit 2017 leitet er die Forschungsgruppe "Tensors and Optimization" am MPI MiS Leipzig, in welcher er sich mit Optimierungsverfahren für Matrix- und Tensorzerlegungen, insbesondere Niedrigrangmodellen und ihren Anwendungen, beschäftigt.

Matrixzerlegungen und -algorithmen spielen eine zentrale Rolle in beinahe allen anwendungsbezogenen Bereichen der Mathematik. Die Eigenwert- bzw. Singulärwertzerlegung gehört dabei zu den wichtigsten Werkzeugen. In vielen Anwendungen treten Matrizen mit (näherungsweise) niedrigem Rang auf. In solchen Fällen ist es sinnvoll, ein Niedrigrangmodell in die Problemformulierung aufzunehmen. Dies dient sowohl der Dimensionsreduktion als auch der Parameteridentifikation in unterbestimmten Systemen.

Betrachtet man Tensoren als mehrdimensionale Verallgemeinerungen von Matrizen, so ergeben sich mehrere Möglichkeiten der Verallgemeinerung des Rangbegriffs. Neben der minimalen additiven Zerlegung in separable Elementartensoren (Abb. 1) sind dies vor allem (hierarchische) Faktorisierungen in Tensorprodukte von Unterräumen, was auf sog. Tensornetzwerke führt. Beispiele sind das (hierarchische) Tucker-Format und das Tensor-Train-Format (s. Abb. 2). Die Idee ist dabei stets die Separation von Variablen (Indizes) mittels einer multilinearen Parametrisierung. Der Rang bestimmt die Komplexität der Zerlegung. Anwendungen von Tensorzerlegungen finden sich traditionell in der Statistik und Signalverarbeitung [4], verstärkt aber auch bei Näherungsverfahren zur Lösung hochdimensionaler Probleme, etwa partieller Differentialgleichungen und Eigenwertprobleme [1], welche aufgrund des Fluchs der Dimensionen nicht mit Standarddiskretisierungen behandelt werden können. Die multilineare Algebra, Analysis und Numerik von Niedrigrangmodellen sind heute aktive und vielseitige Forschungsgebiete.

Herr Uschmajews Forschungsinteresse an Tensoren war während seiner Promotion in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Harry Yserentant zunächst durch hochdimensionale Approximationsmethoden der Quantenchemie und -physik motiviert. Hierbei bestand auch enger Austausch mit den Arbeitsgruppen von Prof. Dr. Reinhold Schneider (ebenfalls TU Berlin) und Prof. Dr. Wolfgang Hackbusch am MPI Leipzig, welche sich maßgeblich mit der Entwicklung von Tensormethoden zur systematischen Modellierung und Numerik in hochdimensionalen Räumen befassten [2].

Bei Verwendung eines Niedrigrangmodells zur Approximation stellen sich zunächst grundsätzliche Fragen zu

Wohlgestelltheit und a-priori Fehlerabschätzungen. Hierbei ist die zweite Frage die schwierigere und setzt strukturelle Eigenschaften des betrachteten Problems voraus.

Tensoren höherer Ordnung erzeugen verschiedene Bilinearformen (Matrizierungen) durch Gruppierung von Variablen. Erforderlich für eine gute Approximierbarkeit des Tensors durch Tensornetzwerke mit niedrigem Rang ist, dass die Singulärwerte mehrerer dieser Bilinearformen jeweils schnell abklingen. Solche simultanen Abklingeigenschaften können zum Beispiel durch hohe (gemischte) Glattheit einer zugrundeliegenden Funktion impliziert sein [8]. Im Allgemeinen ist der Zusammenhang zwischen den Singulärwerten der verschiedenen Bilinearformen aber noch wenig erforscht [3].

Ein verwandtes Thema ist die Spektraltheorie von Tensoren, welche deutliche Unterschiede zu Matrizen aufweist. Die durch einen Tensor repräsentierte Multilinearform definiert in natürlicher Weise eine Spektralnorm. Das Verhältnis von Spektral- und Frobeniusnorm ist ein (mögliches) Maß für die Abweichung des Tensors von einem separablen Elementartensor (Entanglement). Interessanterweise ist eine genaue Formel für den minimal möglichen Quotienten zwischen Spektral- und Frobeniusnorm (also die Normkonstante) in den meisten (endlichdimensionalen) Tensorräumen nicht bekannt. Diese Frage hat einige überraschende Beziehungen zu klassischen Problemen der Algebra [6].

Neben solch grundsätzlichen Fragen sind vor allem die nichtlinearen Optimierungsverfahren für Niedrigrangmodelle ein Hauptarbeitsgebiet von André Uschmajew. Diese Verfahren spielen bei der praktischen Verwendung solcher Modelle eine zentrale Rolle. Aufgrund der typischen Struktur der Zielfunktion als Komposition einer (oftmals) konvexen Funktion mit einer multilinearen Abbildung, stellen die auftretenden Optimierungsprobleme dabei eine interessante Problemklasse dar. Zwei Arten von Verfahren können grob unterschieden werden. Die erste basiert auf alternierender Optimierung der Blockvariablen in der multilinearen Parametrisierung des Modells. Hier konnte Herr Uschmajew für das sog. Alternating Least Squares (ALS) Verfahren substantielle Beiträge zur lokalen Konvergenz leisten [10,7]. Durch Vorkonditionierung der Subprobleme



STECKBRIEF

und Hinzunahme von Gradienteninformation können solche Verfahren auch beschleunigt werden. So wurde in [5] eine auf lokaler Unterraumkorrektur basierende Modifikation eines Eigenwertlösers im Niedrigrangformat für hochdimensionale Eigenwertprobleme erarbeitet.

Eine zweite Klasse von Optimierungsverfahren, sog. Riemannsche Verfahren, basieren auf der lokalen Geometrie der Niedrigrangmodelle als nichtlinearen Mannigfaltigkeiten. Hierfür ist die effiziente Bestimmung tangentialer Suchrichtungen und Retraktionen erforderlich. Für das hierarchische Unterraumformat wurde die entsprechende Mannigfaltigkeitsstruktur in [13] ausgearbeitet. Bei der theoretischen Konvergenzanalyse dieser Verfahren muss jedoch berücksichtigt werden, dass die Mannigfaltigkeiten Singularitäten in den Randpunkten besitzen, in denen der Rang fällt [9]. Die Betrachtung von Niedrigrangmatrizen und -tensoren als Mannigfaltigkeiten erlaubt auch die natürliche Formulierung dynamischer Approximationsprobleme, etwa zur Lösung zeitabhängiger Gleichungen. Im Übersichtsartikel [11] wird die geometrische Sichtweise auf Niedrigrangmodelle und ihre Anwendungen dargelegt.

Von entscheidender Bedeutung beim Einsatz nichtlinearer Approximationsmodelle ist nicht zuletzt, ob die zugehörigen Optimierungsverfahren die gesuchte globale Lösung finden können, vorausgesetzt sie ist im Modell enthalten. Dieses wichtige Problem steht für viele Modelle aus dem Bereich des maschinellen Lernens, etwa neuronale Netze, zunehmend im Fokus. Mögliches Ziel solcher Untersuchungen ist es, die lokalen Minima der Zielfunktion auf der Mannigfaltigkeit einzugrenzen und, wenn möglich, gegen die globalen Minima abzuschätzen. Bemerkenswerterweise ist dies für einige Matrixmodelle unter bestimmten Voraussetzungen möglich [12]. In der Zukunft möchte sich Herr Uschmajew verstärkt solchen Fragen der Geometrie und globalen Konvergenz für nichtlineare Modelle widmen. Darüberhinaus interessieren ihn die Anwendungen von Tensoren in Data Science und Statistik.

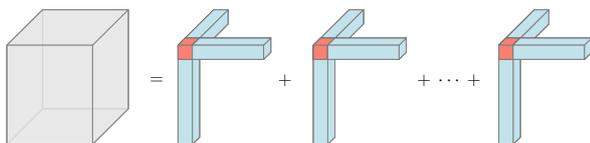


Abb. 1: Kanonische Zerlegung eines Tensors in Rang-1 Tensoren

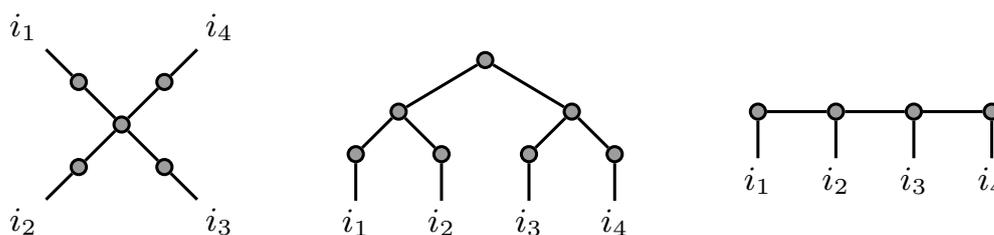


Abb. 2: Beispiele für Tensornetzwerke für Tensoren vierter Ordnung (v.l.n.r.): Tucker-Format, hierarchisches Unterraumformat, Tensor-Train-Format. Die inneren Knoten sind selbst Tensoren, die Kanten entsprechen Summationen über gemeinsame Indizes. Jeder Kante kann ein Rang zugeordnet werden.

Literatur

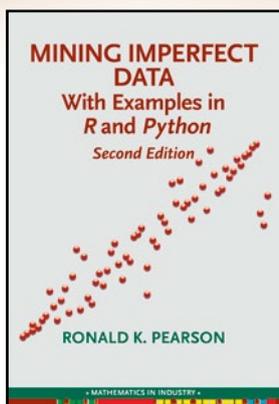
- [1] M. Bachmayr, R. Schneider and A. Uschmajew. Tensor networks and hierarchical tensors for the solution of high-dimensional partial differential equations. *Found. Comput. Math.*, 16 (2016) 6, p. 1423-147
- [2] W. Hackbusch. *Tensor Spaces and Numerical Tensor Calculus*. 2nd edition, Springer, 2019
- [3] W. Hackbusch and A. Uschmajew. On the interconnection between the higher-order singular values of real tensors. *Numer. Math.*, 135 (2017) 3, p. 875-894
- [4] T. Kolda and B. Bader: *Tensor decompositions and applications*. *SIAM Rev.*, 51 (2009) 3, p. 455-500
- [5] D. Kressner, M. Steinlechner and A. Uschmajew. Low-rank tensor methods with subspace correction for symmetric eigenvalue problems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 36 (2014) 5, p. A2346-A2368
- [6] Z. Li, Y. Nakatsukasa, T. Soma and A. Uschmajew. On orthogonal tensors and best rank-one approximation ratio. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 39 (2018) 1, p. 400-425
- [7] T. Rohwedder and A. Uschmajew. On local convergence of alternating schemes for optimization of convex problems in the tensor train format. *SIAM J. Numer. Anal.*, 51 (2013) 2, p. 1134-1162
- [8] R. Schneider and A. Uschmajew. Approximation rates for the hierarchical tensor format in periodic Sobolev spaces. *J. Complexity*, 30 (2014) 2, p. 56-71
- [9] R. Schneider and A. Uschmajew. Convergence results for projected line-search methods on varieties of low-rank matrices via Łojasiewicz inequality. *SIAM J. Optimal.*, 25 (2016) 1, p. 622-646
- [10] A. Uschmajew. Local convergence of the alternating least squares algorithm for canonical tensor approximation. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 33 (2012) 2, p. 639-652
- [11] A. Uschmajew and B. Vandereycken. Geometric methods on low-rank matrix and tensor manifolds. In: P. Grohs et al. (eds.), *Handbook of variational methods for nonlinear geometric data*. Springer, 2020. - P. 261-31
- [12] A. Uschmajew and B. Vandereycken. On critical points of quadratic low-rank matrix optimization problems. *IMA J. Numer. Anal.*, 40 (2020) 4, p. 2626-2651
- [13] A. Uschmajew and B. Vandereycken. The geometry of algorithms using hierarchical tensors. *Linear Algebra Appl.*, 439 (2013) 1, p. 133-166

Kontakt

Dr. André Uschmajew
 Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften
 Inselstr. 22
 04103 Leipzig
 uschmajew@mis.mpg.de

Rundbrief Readers

Save up to 30% on these titles & more!

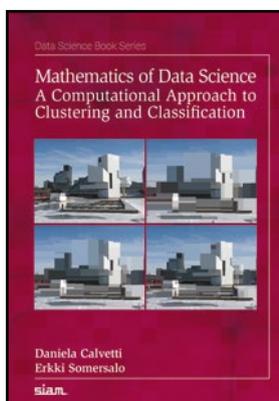


Mining Imperfect Data With Examples in R and Python, Second Edition

Ronald K. Pearson

It has been estimated that as much as 80% of the total effort in a typical data analysis project is taken up with data preparation, including reconciling and merging data from different sources, identifying and interpreting various data anomalies, and selecting and implementing appropriate treatment strategies for the anomalies that are found. This book focuses on the identification and treatment of data anomalies, including examples that highlight different types of anomalies, their potential consequences if left undetected and untreated, and options for dealing with them. The book also emphasizes the range of open-source tools available for identifying and treating data anomalies, mostly in *R* but also with several examples in *Python*.

2020 · x + 481 pages · Softcover · 978-1-611976-26-7
List \$94.00 · SIAM Members \$65.80 · Rundbrief Readers \$75.20 · MN04

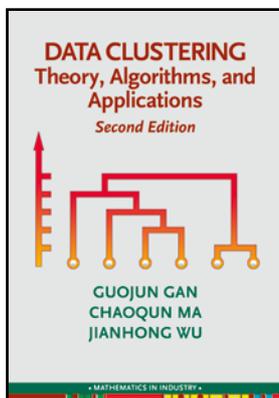


Mathematics of Data Science A Computational Approach to Clustering and Classification

Daniela Calvetti and Erkki Somersalo

This self-contained textbook provides a solid mathematical basis for understanding popular data science algorithms for clustering and classification and shows that an in-depth understanding of the mathematics powering these algorithms gives insight into the underlying data. It presents a step-by-step derivation of these algorithms, outlining their implementation from scratch in a computationally sound way. The book proposes different ways of visualizing high-dimensional data to unveil hidden internal structures and includes graphical explanations and computed examples using publicly available data sets.

2020 · x + 189 pages · Softcover · 978-1-611976-36-6
List \$64.00 · SIAM Members \$44.80 · Rundbrief Readers \$51.20 · DI01



Data Clustering Theory, Algorithms, and Applications, Second Edition

Guojun Gan, Chaoqun Ma, and Jianhong Wu

Data clustering, also known as cluster analysis, is an unsupervised process that divides a set of objects into homogeneous groups. Development in the area has exploded, especially in clustering algorithms for big data and open-source software for cluster analysis. This second edition reflects these new developments, covers the basics of data clustering, includes a list of popular clustering algorithms, and provides program code that helps users implement clustering algorithms.

2020 · xxiv + 406 pages · Softcover · 978-1-611976-32-8
List \$94.00 · SIAM Members \$65.80 · Rundbrief Readers \$72.50 · MN05

To order, visit bookstore.siam.org

Use coupon code **BKGM21** to receive **20%** off all books in the SIAM bookstore. SIAM members automatically receive **30% off**. Members and customers outside North and South America can order at eurospanbookstore.com/siam and save on shipping.

siam
Society for Industrial and
Applied Mathematics



GAMM Archive for Students

An Open-Access Online Journal run by the GAMM Juniors



STUDY

DISCOVER

PUBLISH RESULTS



Submission of student research results at
www.gamm-ev.de ▶ Publications ▶ GAMMAS



AKTIVITÄTEN DER GAMM JUNIOREN ZUR FÖRDERUNG JUNGER NACHWUCHSWISSENSCHAFTLER/INNEN

VON PETER GANGL, CARMEN GRÄSSLE, ARNE HANSEN-DÖRR UND KATHRIN WELKER



Die GAMM Junioren sind eine Gruppe von Promovierenden und Postdocs, welche sich durch herausragende wissenschaftliche Leistungen im Bereich der Angewandten Mathematik oder Mechanik auszeichnen. Die

Gruppe trifft sich jedes Jahr zu mehreren gemeinsamen Workshops und organisiert verschiedenste Aktivitäten, wie beispielsweise die Poster Session und den YAMM Lunch auf der GAMM Jahrestagung. Genauere Informationen finden sich auf der GAMM Junioren Webseite

<https://www.gamm-juniors.de/>

Im Folgenden möchten wir auf zwei besondere Aktivitäten der GAMM Junioren zur Förderung junger Nachwuchswissenschaftler/innen eingehen.

GAMMAS Journal – Best Paper Award

GAMMAS ist ein frei verfügbares Online-Journal für studentische Forschung auf den Gebieten der Angewandten Mathematik und Mechanik, das von den GAMM Junioren mit großzügiger Unterstützung der TU Chemnitz unter

<https://www.bibliothek.tu-chemnitz.de/ojs/index.php/GAMMAS>

betrieben wird. Es gibt jungen Nachwuchstalente die Möglichkeit, erste Forschungsergebnisse oder Literaturrecherchen zu veröffentlichen, die nur geringe Chancen auf eine Veröffentlichung an anderer Stelle haben, obwohl sie von großem Interesse für den wissenschaftlichen Austausch sind. Hierzu zählen beispielsweise ausgewählte Aspekte einer studentischen Seminar- oder Abschlussarbeit. Zusätzlich zu den regulären Artikeln (Research Paper, Technical Brief) gibt es eine Sektion für Lehrmaterial (Educational Article). Dieser Bereich lässt nicht-studentische Autoren zu und ist offen für Tutorials, Lehrbeispiele oder Beschreibungen von wissenschaftlichen Experimenten.



Als Neuerung ist hervorzuheben, dass es ab kommenden Jahr einen *Best Paper Award* geben wird. Zur Auswahl stehen alle GAMMAS Publikationen, die ab der ersten Ausgabe des Journals 2019 bis zum Jahresende 2021 veröffentlicht sein werden. Der Award wird von der GAMM unterstützt und ist mit einem Preisgeld in Höhe von 300 € dotiert, welches zweckgebunden für eine wissenschaftliche Veranstaltung oder einen Forschungsbesuch zur Verfügung gestellt wird. Die Entscheidung wird durch die GAMM Junioren anhand der wissenschaftlichen Qualität, der Darstellung der Ergebnisse und dem Mehrwert für die Community getroffen und zu Beginn des Jahres 2022 verkündet.

Sommerschule 2021 der GAMM Junioren

Die GAMM Junioren organisieren regelmäßig Sommerschulen zu ausgewählten Themen aus der Angewandten Mathematik und Mechanik, genannt SAMM. Ein Ziel dieser Sommerschulen ist es, junge Nachwuchswissenschaftler/innen eines Themenkomplexes zusammenzubringen und somit ihr Kooperationsnetzwerk zu erweitern. Die SAMM 2021 zum Thema *Shape and Topology Optimization* findet vom 26. bis 30. Juli 2021 an der TU Graz statt und wird von Peter Gangl (TU Graz) und Kathrin Welker (HSU/ UniBw Hamburg) organisiert. Geplant sind Vorlesungen von Kevin Sturm (TU Wien), Benedikt Wirth (U Münster) und Michael Stingl (FAU Erlangen-Nürnberg) zu theoretischen und praktischen Aspekten aus den Gebieten Form-, Topologie- sowie Materialoptimierung. Die Vorträge werden durch praktische Übungseinheiten abgerundet. Den Abschluss bilden weitere eingeladene Vorträge von führenden Expertinnen und Experten auf dem Gebiet (u.a. Grégoire Allaire, École Polytechnique Paris), in welchen auch das große Potential dieser Methoden in praktischen Anwendungen hervorgehoben wird. Die SAMM richtet sich an Nachwuchswissenschaftler/innen aus der Mathematik und Mechanik, die auf dem Gebiet arbeiten oder daran interessiert sind. Aktuell ist geplant, dass die Sommerschule in Präsenz an der TU Graz stattfindet. Falls es die Situation erfordert, kann auf ein hybrides oder rein virtuelles Format ausgewichen werden.

Genauere Informationen finden sich auf der Webseite

<https://www.applied.math.tugraz.at/tagungen/samm21>

welche laufend aktualisiert wird.

JAHRESBERICHT 2020 DES
GAMM-FACHAUSSCHUSSES

ANGEWANDTE
OPERATORTHEORIE



Martin Grothaus



Birgit Jacob



Christian Seifert



Christiane Tretter

Viele mathematische Modelle der Natur- und Ingenieurwissenschaften lassen sich operatortheoretisch beschreiben. Dies ermöglicht einen Zugang zur strukturellen Analyse der zugrunde liegenden Problemstellungen. Der Fachausschuss Angewandte Operatortheorie fördert die Kommunikation und Zusammenarbeit von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern, deren Arbeitsgebiet in der Theorie und Anwendung von operatortheoretischen Methoden liegt. Hauptanliegen sind sowohl die Weiterentwicklung der Techniken, als auch deren effiziente Umsetzung in konkreten Anwendungen, zum Beispiel bei zeitabhängigen partiellen Differentialgleichungen, in der mathematischen Systemtheorie, sowie bei Approximationsverfahren und dem Langzeitverhalten von Lösungen zu partiellen und stochastischen Differentialgleichungen.

Aktivitäten des Fachausschusses 2020:

- QGraph2020, via Zoom, Stockholm, December 08-09, 2020
Organisation: Pavel Kurasov (Stockholm), Annemarie Luger (Stockholm), Jonathan Rohleder (Stockholm)
Webseite: <https://staff.math.su.se/kurasov/QGRAPH/Meeting1220.html>
- ISem 23 „Evolutionary Equations“ Abschlussworkshop, via Zoom, June 22-26, 2020
Organisation: Christian Seifert (Hamburg), Sascha Trostorff (Kiel), Marcus Waurick (Strathclyde)
Webseite: <https://www.mat.tuhh.de/isem23>

Geplante Aktivitäten des Fachausschusses 2021:

- 3rd Workshop on Stability and Control of Infinite-Dimensional Systems (SCINDIS 2020), Wuppertal, September 27-29, 2021.
Organisation: Sergey Dashkovskiy (Würzburg), Birgit Jacob (Wuppertal), Andrii Mironchenko (Passau) und Fabian Wirth (Passau).
Webseite: <https://www.fan.uni-wuppertal.de/de/scindis-2020.html>
- Workshop of the GAMM Activity Group Applies Operator Theory, Stockholm University, May 20-22, 2021
Organisation: Sabine Bögli (Durham), Jonathan Rohleder (Stockholm)
Webseite: <https://staff.math.su.se/jonathan.rohleder/gamm-ot21/>

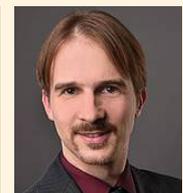
Sektion „Angewandte Operatortheorie“, Jahrestagung der GAMM 2021 in Kassel
Organisation: Birgit Jacob und Hafida Laasri (Bergische Universität Wuppertal).

JAHRESBERICHT 2020 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

OPTIMIERUNG MIT PARTIELLEN
DIFFERENTIALGLEICHUNGEN



Anton Schiela



Winnifried Wollner

Der Fachausschuss fördert die Kommunikation und Zusammenarbeit aller Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler sowie Industrievertretern, die an der Optimierung mit partiellen Differentialgleichungen interessiert sind. Er vertritt außerdem das Fachgebiet innerhalb der GAMM.

Das Treffen des FA fand 2020 Corona bedingt virtuell statt. Ein geplanter gemeinsamer Workshop mit dem Fachausschuss „Dynamik und Regelungstheorie“ in Bayreuth ist auf 2021 verschoben.

Mitglieder des FA haben an zahlreichen Konferenzen und Workshops teilgenommen und ebensolche Veranstaltungen mit organisiert. Zu nennen sind hier insbesondere

- das Chemnitzer Seminar zur Optimalsteuerung
- die (virtuelle) DMV-Jahrestagung

Eine erweiterte Liste von Veranstaltungen sowie bevorstehende Tagungsaktivitäten für 2021 werden über die Homepage des Fachausschusses <http://www.gamm.optp-de.net> bekanntgegeben. Das nächste Jahrestreffen soll im Rahmen eines gemeinsamen Workshops mit dem Fachausschuss 'Dynamik und Regelungstechnik' stattfinden.

JAHRESBERICHT 2020 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

ANALYSIS PARTIELLER
DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

Helmut Abels



Dorothee Knees



Carolin Kreisbeck

Der Fachausschuss „Analysis partieller Differentialgleichungen“ fördert den wissenschaftlichen Austausch von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern, die in unterschiedlichen Bereichen der Analysis partieller Differentialgleichungen arbeiten, verstärkt und koordiniert diesen. Insbesondere soll die Interaktion zwischen unterschiedlichen Forschungsgemeinschaften und Anwendungsgebieten intensiviert werden und damit ein wichtiger Wissenstransfer geschaffen werden. Der Vorstand besteht aus: Helmut Abels (stellvertretender Vorsitzender), Dorothee Knees (Vorsitzende), Carolin Kreisbeck (stellvertretende Vorsitzende), Martin Kružík, Matthias Röger, Marita Thomas und Mathias Wilke. Der Fachausschuss hat eine erfreuliche Entwicklung bezüglich der Mitgliederzahlen genommen, die mittlerweile auf 70 angestiegen ist, darunter zahlreiche Postdocs und NachwuchswissenschaftlerInnen. Anträge auf Aufnahme in den Fachausschuss können jeder Zeit an die Vorsitzende (Dorothee Knees, e-mail: gammanapde@mathematik.uni-kassel.de) gestellt werden. Genauere Informationen findet man auf der WWW-Seite des Fachausschusses (<http://www.uni-regensburg.de/mathematics/partial-differential-equations/index.html>).

Im vergangenen akademischen Jahr waren unsere Mitglieder an der Organisation diverser Konferenzen, Workshops und Schulen beteiligt, wobei leider einige davon abgesagt bzw. auf das Jahr 2021 verschoben werden mussten: Vom 30. September bis 2. Oktober 2020 fand das durch Julian Fischer (Institute of Science and Technology Austria, Klosterneuburg) organisierte achte Jahrestreffen des Fachausschusses in Form eines online-Treffens mit ca. 60 Teilnehmenden statt. Neben den drei Hauptvorträgen von Helge Dietert (CNRS in Paris), Karoline Disser (U Kassel)

und Tim Laux (U Bonn) bestand das Programm aus 17 weiteren wissenschaftlichen Vorträgen aus verschiedenen Bereichen der partiellen Differentialgleichungen. E. Titi organisierte einen zweiwöchigen Minikurs über „Mathematical Analysis of Geophysical Models and Data Assimilation“, E. Davoli und J. Pietschmann leiteten das Minisymposium „Recent advances on evolutionary phase-transition problems“ auf der DMV-Tagung und vom 25.-29. November 2019 gab es an der Universität Ulm eine Winterschule zum Thema „Gradient flows and variational methods in PDEs“. Die verschiedenen neu entstandenen „One World Seminars“ mit ihren vielfältigen Themen wurden über den Email-Verteiler des Fachausschusses beworben (<https://www.owprobability.org/other-worlds>).

Auch für das nächste Jahr sind zahlreiche Aktivitäten mit Beteiligung von Mitgliedern des Fachausschusses geplant, wobei einige für 2020 geplante Workshops und Sommer Schulen in das Jahr 2021 verschoben werden. Im Folgenden werden nur Veranstaltungen genannt, bei denen schon ein Termin feststeht:

Das neunte Jahrestreffen des Fachausschusses findet im Oktober 2021 statt (Organisation: P. Dondl, Freiburg). Bei der GAMM-Jahrestagung 2020/2021 in Kassel werden D. Knees und M. Thomas die Sektion „Applied Analysis“ leiten. Die „15th International Conference on Free Boundary Problems“ (HU Berlin) wird auf 13.-17. September 2021 verschoben. Von Oktober 2020 bis Februar 2021 finden verschiedene Workshops und Winterschulen im Rahmen des „Thematic Einstein Semester on Energy Based Methods for Reactive Multiphase Flows“ (MATH+, Berlin) statt.

JAHRESBERICHT 2020 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

DYNAMIK UND REGELUNGSTHEORIE



Rolf Findeisen



Robert Seifried



Karl Worthmann

Der interdisziplinäre Fachausschuss „Dynamik und Regelungstheorie“ ist vom Zusammenspiel der drei Forschungsfelder Dynamik, Mathematische Systemtheorie und Regelungstheorie geprägt. Er schlägt erfolgreich Brücken zwischen angewandter Mathematik und Mechanik. Der Fachausschuss vereint Mitglieder verschiedenster Fachdisziplinen: Von der Mathematischen Systemtheorie, der Regelungstechnik, der Nichtlinearen Dynamik- und Schwingungstheorie, der Mehrkörperdynamik, dem Maschinellen Lernen, bis hin zu unterschiedlichsten Anwendungsfeldern wie Mechatronik, Energietechnik, Robotik, autonomen Systemen und autonomen Fahrzeugen oder der Luft- und Raumfahrttechnik. Verbindende Klammer ist das mathematische Verständnis der Dynamik bei Steuerungen und Regelungen. Neben klassischen Fragestellungen spielen vermehrt Fragen der Analyse, Synthese und Beeinflussung dynamischer Systeme über Kommunikationsnetzwerke, Cyberphysische Systeme, die Betrachtung großer Systeme bestehend aus einer Vielzahl an Einzelsystemen, sowie die Verschmelzung klassischer Verfahren mit Techniken des Maschinellen Lernens und der Künstlichen Intelligenz eine Rolle.

Ein Ziel des Ausschusses ist es, die interdisziplinäre Zusammenarbeit zwischen Mathematik und den Ingenieurwissenschaften zu fördern. Hierzu finden unter anderem halbjährlich Workshops statt, an denen Professorinnen und Professoren, Promovierende, Studierende sowie Vertreterinnen und Vertreter aus der Industrie teilnehmen. Diese Workshops erlauben es, aktuelle Forschungsergebnisse zu diskutieren, auf Trends und Neuentwicklungen einzugehen und gemeinsame wissenschaftliche Kooperation anzustoßen und voranzubringen. Neben dem interdisziplinären Austausch liegt dem Ausschuss insbesondere die Einbindung des wissenschaftlichen Nachwuchses am Herzen. Der Fachausschuss interagiert mit zahlreichen anderen Organisationen, insbesondere der Gesellschaft Mess- und Automatisierungstechnik (GMA) des VDI/VDE im Rahmen der Fachausschüsse 1.30 „Modellbildung, Identifikation und Simulation in der Automatisierungstechnik“, 1.40 „Theoretische Verfahren der Regelungstechnik“ und 1.50 „Grundlagen vernetzter Systeme“.

Aktivitäten des Fachausschusses

Der Fachausschuss „Dynamik und Regelungstheorie“ tagte am 20. November 2020 in einer virtuellen Sitzung. Das Programm umfasste Vorträge von Frau Prof. Jacqueline M. A. Scherpen (University of Groningen, the Netherlands), Herrn Prof. Remco Leine (U Stuttgart), Frau Janine Matschek (OvGU Magdeburg) und Herrn Leo Dostal (TU Hamburg). Aufgrund der aktuellen Situation wird der ursprünglich für April 2020 in Bayreuth geplante, von den

Kollegen Grüne und Schiela organisierte Workshop, mit einer aktuell für September 2021 geplanten gemeinsamen Sitzung mit dem Fachausschuss „Optimierung mit partiellen Differentialgleichungen“ kombiniert. Ebenso wurde das für September 2020 geplante gemeinsame Treffen mit den GMA Fachausschüssen 1.30 und 1.40 abgesagt, das traditionell alle zwei Jahre in Anif, Österreich, stattfindet. Besonders hervorzuheben ist die 2019 beschlossene neue Struktur mit drei Vorsitzenden, um die Zusammenarbeit der verschiedenen Bereiche zu untermauern: Rolf Findeisen (OvGU Magdeburg) für die Regelungstheorie, Robert Seifried (TU Hamburg) für die Dynamik und Karl Worthmann (TU Ilmenau) für die Mathematische Systemtheorie. Die Mitglieder des Fachausschusses waren an der Organisation zahlreicher Veranstaltungen, die in engem Zusammenhang zu den Themen des Fachausschusses stehen, beteiligt:

Vom 12. bis 17. Juli fand der erste rein virtuelle IFAC World Congress – der V-IFAC 2020 (<https://www.ifac2020.org/organization/>) statt, welcher durch zahlreiche Mitglieder des Fachausschusses unterstützt wurde (u. a. IFAC Präsident Frank Allgöwer (U Stuttgart), IPC Chair Rolf Findeisen (OvGU Magdeburg), Workshop Chair Lars Grüne (U Bayreuth), Student Activities Chair Thomas Meurer (U Kiel), Tutorials Chair Carsten Scherer (U Stuttgart), ...). Es ging eine Rekordzahl von mehr als 4.200 Beiträgen ein, von denen 2.956 Beiträge im finalen Programm erschienen. Der Kongress fand rein virtuell statt und gliederte sich um den sogenannten Global Live Track, in dem die Plenarbeiträge und Semiplenarbeiträge, Tutorials, Wettbewerbe und Workshops live übertragen wurden. Die normalerweise in mehr als 30 parallelen Sessions präsentierten „regulären“ Beiträge wurden in einer rein virtuellen Variante den Interessenten als aufgezeichnete Videos zur Verfügung gestellt. Diskussionen zu diesen Beiträgen wurden mittels Diskussionsforen ermöglicht. Trotz der Herausforderungen eines rein virtuellen Kongresses stieß der Kongress mit mehr als 3.600 Teilnehmern auf reges Interesse und es fanden zahlreiche Interaktionen zwischen den Teilnehmern statt.

Der Elgersburg Workshop „Mathematische Systemtheorie“ wird vom 1. März bis zum 4. März 2021 von Lars Grüne (U Bayreuth), Achim Ilchmann (TU Ilmenau) und Eva Zerz (RWTH Aachen) organisiert. Als Sprecher sind Sara Grunzel (MPI Magdeburg), Tobias Damm (TU Kaiserslautern), Enrique Zuazua (FAU Erlangen-Nürnberg), Thomas Lorenz (HS Rhein-Main), Michel Fliess (EP Palaiseau), Robert Altmann (U Augsburg), Klaus Röbenack (TU Dresden), Christian Mehl (TU Berlin), Carsten Scherer (U Stuttgart), Jörg Müller (U Bayreuth) und Lars Grüne (U Bayreuth) eingeladen. Der Workshop wurde leider am 14.12.2020 pandemiebedingt abgesagt.

Vom 9. bis 15. Mai 2021 ist der Mini-Workshop „Mathematics of Dissipation – Dynamics, Data and Control“ am Mathematischen Forschungsinstitut Oberwolfach auf Initiative von Tobias Breiten, Timm Faulwasser, Sara Grundel, Felix Schwenninger und Karl Worthmann geplant. Organisatorinnen und Organisatoren sind Sara Grundel, Volker Mehrmann, Jacquelin Scherpen und Felix Schwenninger. Der Fachausschuss gratuliert Manuel Schaller (TU Ilmenau) zu seiner Ernennung als GAMM Junior herzlich. Herr Schal-

ler promoviert bei Lars Grüne (U Bayreuth) zur Sensitivitätsanalyse für die modellprädiktive Regelung (MPC) partieller Differentialgleichungen und gewann 2020 den Preis für den besten Doktorandenvortrag während des 14. Elgersburg Workshops zur mathematischen Systemtheorie. Aktuell forscht Herr Schaller am Fachgebiet Optimization-based Control (TU Ilmenau; Karl Worthmann) unter anderem zu Dissipativität, Turnpike-Eigenschaften und effizienter Numerik für MPC.

JAHRESBERICHT 2020 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

MATHEMATISCHE SIGNAL- UND BILDVERARBEITUNG (MSIP)



Gitta Kutyniok



Felix Kraemer



Stefan Kunis

Der Fachausschuss MSIP wurde im April 2012 ins Leben gerufen und hat zur Zeit etwa 200 Mitglieder aus ca. 25 verschiedenen Ländern. Zur Förderung des Gebietes der „Mathematischen Signal- und Bildverarbeitung“, zur Unterstützung von Nachwuchswissenschaftlern/innen und zur Verbesserung von interdisziplinärer Forschung dient die Webseite <http://gamm-msip.math.lmu.de> als zentrale Kommunikationsplattform, neben u.a. einem regelmäßigen Newsletter und einem Job-Forum.

Für das Jahr 2020 wurden von den Mitgliedern des Fachausschusses u.a. folgende Veranstaltungen geplant:

- Sektion “ Mathematical Signal and Image processing”, Jahrestagung der GAMM 2020. Organisation: G. Plonka (Göttingen), M. Möller (Siegen).
- Session “SPP 1798: Compressed Sensing in Information Processing (CoSIP)”, Jahrestagung der GAMM 2020. Organisation: G. Kutyniok (München) und H. Rauhut (Aachen).
- Annual Meeting of the GAMM MSIP, TUM Conference Site, März. Organisation: B. Forster (Passau), F. Kraemer (München), S. Kunis (Osnabrück), B. Schmitzer (Göttingen).
- First International SIAM Conference on “Mathematics of Data Science”, Cincinnati, USA, 5.-7. Mai. Organisation: G. Kutyniok (München), A. Pinar (Mercury) und J. Tropp (Pasadena).
- 8th International Conference on Computational Harmonic Analysis, München, 14.-18. September. Organisation: H. Boche (München), C. Chui (Hongkong), M. Fornasier (München), F. Kraemer (München), G. Pfander (Eichstätt).
- Mecklenburg Workshop on Approximation Methods and Fast Algorithms, Hasenwinkel, September. Organisation: R. Bergmann (Trondheim), S. Kunis (Osnabrück), T. Ullrich (Chemnitz).

Bedingt durch die COVID19-Pandemie konnte leider keine der Veranstaltungen wie geplant stattfinden, lediglich die SIAM Conference on “Mathematics of Data Science” fand in virtueller Form statt. Die weiteren Konferenzen mussten abgesagt oder auf das Jahr 2021 verschoben werden.

Um trotz der vielen ausgefallenen Veranstaltungen den wissenschaftlichen Austausch am Leben zu halten, wurden unter Beteiligung von Mitgliedern unserer Arbeitsgruppe mehrere internationale Online-Seminare ins Leben gerufen, und zwar insbesondere

- Data, and Signals (1W-MINDS) Seminar, Organisation: M. Hirn, M. Iwen, D. Needell, R. Saab, R. Wang (USA), U. Molter (Argentinien), S. Ling (China), F. Kraemer (Deutschland), A. Bandeira (Schweiz), B. Bah (Südafrika).
- Codes and Expansions (CodEx) Seminar, Organisation: J. Iverson, J. Jasper, E. King, D. Mixon (USA)

Für das Jahr 2021 sind u.a. bereits folgende Aktivitäten geplant:

Von G. Kutyniok aus unserer Fachgruppe wurde ein DFG-Schwerpunktprogramm (SPP 2298) zum Thema „Theoretical Foundations of Deep Learning“, mit Bezug zum Thema des Fachausschusses, initiiert, das im nächsten Jahr anlaufen wird.

Ebenfalls im kommenden Jahr wird koorganisiert von Mitgliedern des Fachausschusses ein Scientific Programme am Newton Institute zum Thema Mathematics of Deep Learning stattfinden. Organisation: P. Bartlett (Berkeley), A. Hansen (Cambridge), A. Jentzen (Münster), G. Kutyniok (München), C. Schönlieb (Cambridge) Zusätzliche Informationen zu diesen und weiteren Aktivitäten des Fachausschusses sind auf der Seite <http://gamm-msip.math.lmu.de> zu finden. Bei Interesse laden wir jeden herzlich dazu ein, Mitglied zu werden.

JAHRESBERICHT 2020 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

ANALYSIS VON MIKROSTRUKTUREN



Kerstin Weinberg



Ben Schweizer

Der Fachausschuss „Analysis von Mikrostrukturen“ fördert die mathematische Modellierung mikromechanischer Phänomene sowie deren Analyse und numerische Simulation. Die Wechselwirkung von Mechanismen auf unterschiedlichen Skalen erfordert eine Zusammenarbeit von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern in den angrenzenden Disziplinen der Ingenieur- und Naturwissenschaften sowie der Mathematik, da einerseits viele Fragen der Modellierung nicht geklärt sind und andererseits die Potentiale moderner mathematischer Methoden wie Homogenisierung und Relaxierung noch nicht angemessen Anwendung finden.

Die Weiterentwicklung und Verfeinerung dieser Modelle und ihre effiziente numerische Umsetzung sowie deren Vergleiche mit experimentellen Befunden stehen im Zentrum der Arbeit dieses Fachausschusses. Sowohl durch koordinierte Forschungsplanung als auch durch Seminare und Tagungen soll die Thematik vorangetrieben werden.

In diesem Jahr haben wir als besonderen Erfolg der Arbeit unseres Fachausschusses den Beginn des Schwerpunktprogramms der DFG „Variationelle Methoden zur Vorhersage komplexer Phänomene in Strukturen und Materialien der Ingenieurwissenschaften (SPP 2256)“ zu berichten. Das Initiatorenteam um Georg Dolzmann (als Sprecher), Dorothee Knees, Jörn Mosler, Klaus Hackl und Bernd Schmidt hat das SPP 2256 in 2019 bewilligt bekommen. Die teilnehmenden Projekte wurden bis Februar 2020 ausgewählt und das Schwerpunktprogramm startete mit dem Auftakttreffen am 14. Juli 2020.

Am 10. und 20. Oktober 2020 fand -virtuell- das erste Jahrestreffen des SPP 2256 statt. Naturgemäß wurden hier noch nicht Ergebnisse präsentiert, sondern das Treffen stand ganz im Zeichen des Austauschs der wissenschaftlichen Aktivitäten, die in den einzelnen Projekten geplant sind. Dazu gab es Fachvorträge aus den einzelnen Teilprojekten die thematisch von „One-scale and multiscale microstructures in shape-memory alloys“ bis „Computational dynamics for solids with fractures“ reichten.

Aktivitäten und Treffen des Fachausschusses

- Das 19. GAMM-Seminar on Microstructures fand unter großer Beteiligung des Fachausschusses im Januar in Freiburg statt (<https://aam.uni-freiburg.de/workshops/micro2020/index.html>). Eingeladene Sprecher waren: Martin Idiart (La Plata), Richard D. James (Minneapolis), Claude Le Bris (Paris), Dirk Praetorius (Wien), Claudia Redenbach (Kaiserslautern)
- Dazu fand zur Unterstützung junger Wissenschaftler im Fachausschuss am 23. Januar 2020 eigenes Junioren-Seminar statt, organisiert wurde es von Annika Bach und Thorsten Bartel.
- Am 23. November 2020 fand das dritte virtuelle „One World Dynamics Seminar“ mit einem Beitrag von Alexander Mielke statt.

Kommende Aktivitäten:

- Das 20th-GAMM-Seminar on Microstructures am 29. und 30. Januar 2021 wird den Fachausschuss dieses Mal online zusammenbringen. Das Jahrestreffen wird organisiert von Dirk Pretorius und Kerstin Weinberg (<https://www.asc.tuwien.ac.at/gamm2021/>)
- Das Treffen unseres GAMM-Fachausschusses wird in diesem Jahr als gemeinsames Treffen mit dem Schwerpunktprogramm „Variationelle Methoden zur Vorhersage komplexer Phänomene in Strukturen und Materialien der Ingenieurwissenschaften“ stattfinden.

Weitere Aktivitäten sind in der Planung, ihre Durchführung hängt von den allgemeinen Rahmenbedingungen ab.

JAHRESBERICHT 2020 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

COMPUTATIONAL AND MATHEMATICAL
METHODS IN DATA SCIENCE

Gitta Kutyniok



Martin Stoll

Der Fachausschuss Computational and Mathematical Methods in Data Science (COMinDS) wurde im März 2019 ins Leben gerufen und hat zur Zeit über 180 Mitglieder aus mehr als 20 verschiedenen Ländern.

Aufgrund der enormen Bedeutung des Fachgebietes Data Science ist es das Ziel des Fachausschusses die enormen Datenmengen aus allen wissenschaftlichen, sowie industriellen Gebieten mit mathematischen Methoden effizient und nachvollziehbar zu untersuchen. Methodiken der künstlichen Intelligenz sind z.B. wichtige Schwerpunkte in der Arbeit von COMinDS. Die Corona Pandemie in diesem Jahr hat dabei gezeigt, wie wichtig der systematische Umgang mit Daten und deren nachvollziehbare Auswertung ist.

Ein wichtiges erklärtes Ziel bleibt die Unterstützung von Nachwuchswissenschaftlern/innen und die Verbesserung von interdisziplinärer Forschung. Dazu dient die Webseite www.tu-chemnitz.de/mathematik/wire/cominds/ als zentrale Kommunikationsplattform, mit einem Job- und Konferenz-Forum.

Im Jahr 2020 hat selbst unter Pandemie-Bedingungen eine beachtliche Anzahl von Veranstaltungen stattgefunden, die von den Mitgliedern des Fach-ausschusses organisiert wurden:

- Annual GAMM-COMinDS Workshop, MPI Leipzig (virtuell), September 10 - 11, 2020. Organisation: Andre Uschmajew (MPI MIS), Max von Renesse (Uni Leipzig). Hauptredner: Marco Cuturi (Google Brain & Institut Polytechnique de Paris), Gitta Kutyniok (LMU), Ivan Oseledets (Skoltech Moscow), Joel Tropp (Caltech)
- SIAM Conference on Mathematics of Data Science, Cincinnati, Organisation: Gitta Kutyniok (LMU), Ali Pinar (Sandia), Joel Tropp (Caltech). Hauptredner: Andrea Bertozzi (UCLA), Jennifer Chayes (Microsoft), Dave Donoho (Stanford), Yann LeCun (Facebook), Michael Jordan (Berkeley), Yurii Nesterov (UC Louvain)

- Workshop on „Scientific Machine Learning“ Köln, 8.-10.01.2020.

Organisation: Gregor Gassner, Alexander Heinlein, Axel Klawonn, Ulrich Lang, Achim Tresch (alle Uni Köln)

Für das Jahr 2021 sind weitere Aktivitäten geplant. Unter anderem haben die Mitglieder des Fachausschusses schon bereits folgende Veranstaltungen geplant:

- Annual GAMM-COMinDS Workshop “Computational and Mathematical Methods in Data Science”, Leipzig, September 2021.

Organisation: Andre Uschmajew, Bernd Sturmfels (MPI MIS).

- Preconditioning 2021, Chemnitz, August 2021, Organisation: Martin Stoll (TU Chemnitz), Roland Herzog (TU Chemnitz), Yousef Saad (U Minnesota), Esmond Ng (Lawrence Berkely Labs), Andy Wathen (U Oxford)

Von G. Kutyniok aus unserer Fachgruppe wurde erfolgreich ein DFG Schwerpunktprogramm „Theoretical Foundations of Deep Learning“ (SPP 2298) beantragt, welches 2021 starten wird. Desweiteren hat sie ein Long-Term Programm am Isaac Newton Institute in Cambridge zum Thema „Mathematics of Deep Learning“ initiiert.

Zusätzliche Informationen zu diesen und weiteren Aktivitäten des Fachausschusses sind auf der Seite www.tu-chemnitz.de/mathematik/wire/cominds/ zu finden. Bei Interesse laden wir jeden herzlich dazu ein, Mitglied zu werden.

JAHRESBERICHT 2020 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

STOCHASTISCHE OPTIMIERUNG IN DER TECHNIK



Thomas Vietor

1. Zusammenfassender Bericht der Aktivitäten

Wie in den vergangenen Jahren berichtet, stellt der BMBF-geförderte Forschungscampus „Open Hybrid LabFactory“ eine Basis für die Zusammenarbeit auch in dem GAMM-Fachausschuss dar. Im Rahmen der durchzuführenden Projekte kommt es zur Weiterentwicklung und Anwendung stochastischer Verfahren in der Optimierung, erster Schwerpunkt ist die Strukturoptimierung. Damit ist für zukünftige Aktivitäten im Rahmen des GAMM FA eine weitere Plattform geschaffen.

Es wurde im laufenden Jahr die nächste 5-Jahres-Förderperiode genehmigt und zum 15.11.2020 ein neues Forschungsvorhaben mit dem Akronym TechnoHyp.

Neben der Erforschung und dem Einsatz von stochastischen Optimierungsverfahren in der Anwendung auf Verkehrssysteme, werden Anwendungen in anderen Disziplinen des Maschinenbaus untersucht. In allem stehen die Grundlagendisziplinen Mechanik und Mathematik im Vordergrund zur Erforschung der benötigten Verfahren.

Im Jahr 2020 wurde die im folgenden Abschnitt aufgeführte Veranstaltung durchgeführt.

2. Publikationen/Konferenzen/Sessions 2020

Conference on Future Production of Hybrid Structures

Geplant für die Durchführung im Mai 2020 musste die Konferenz wegen der Pandemie am 23.09.2020 dann als Online-Veranstaltung durchgeführt werden.

www.fphs2020.com

Die Konferenz bringt führende Wissenschaftler aus Universität und Industrie zum Thema Hybride Werkstoffe zusammen. Von den Mitgliedern des GAMM-FA wurde die Konferenz teilweise und eine Session vollständig organisiert. Die Beiträge werden beim Springer-Verlag veröffentlicht.

3. Weitere Pläne

Für die folgenden Jahre 2021 und 2022 ist ein Antrag bei der DFG mit Beteiligung der am GAMM-FA beteiligten Disziplinen auf Einrichtung einer Forschergruppe geplant.

JAHRESBERICHT 2020 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

ANGEWANDTE UND NUMERISCHE LINEARE ALGEBRA (ANLA)



Jörg Liesen



Stefan Güttel

Der Fachausschuss fördert die Kommunikation und Zusammenarbeit im Bereich der Angewandten und Numerischen Linearen Algebra. Er hat derzeit 88 Mitglieder aus 21 Ländern. Neben seiner Webseite (gammanla.wordpress.com) hat der Fachausschuss einen Twitter-Account (@[gamm_anla](https://twitter.com/gamm_anla)) mit über 370 Followern (Stand Januar 2021). Auf Twitter findet man unter anderem Konferenzankündigungen, Fotos und Berichte unserer Aktivitäten.

Jährlich richtet der ANLA Fachausschuss einen Workshop mit einem speziellen Fokusthema aus. Aufgrund der Corona-Pandemie fand der Workshop 2020 in einem reduzierten Format vollständig online statt. Zum Fokusthema „Numerical Linear Algebra Challenges in Data Assimilation and Computational Inverse Problems“ waren als Hauptvortragende Serge Gratton (Toulouse), Catherine Powell (Manchester) und Daniela Calvetti (Case Western) eingeladen. Organisiert wurde der Online-Workshop am 24. und 25. September von Melina Freitag (Potsdam) und Kirk Soodhalter (Trinity College Dublin).

Nachdem im Frühjahr 2020 die Welle der Corona-bedingten Konferenzabsagen begonnen hatte und die Reiseaktivitäten weltweit stark eingeschränkt wurden, initiierte eine Gruppe von Mitgliedern des ANLA Fachausschusses das e-NLA Seminar zur Numerischen Linearen Algebra (sites.google.com/view/e-nla/home). Die vielen hochkarätigen Vortragenden in diesem Online-Seminar, das live über Zoom und YouTube gestreamt wurde, erreichten stets ein großes internationales Publikum. Dieses erfolgreiche Seminar wird im Jahr 2021 fortgesetzt.

Im September 2020 erschien in zwei Teilen die vierte Applied and Numerical Linear Algebra Topical Issue der GAMM Mitteilungen (nach 2004, 2006 und 2013). Als Herausgeber konnten wir dafür acht Autor*innen bzw. Teams von Autor*innen gewinnen. Leser*innen des Rundbriefs, die sich über den aktuellen Forschungsstand in der Angewandten und Numerischen Linearen Algebra informieren möchten, sei hiermit die ANLA Topical Issue der Mitteilungen wärmstens empfohlen!

JAHRESBERICHT 2020 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES COMPUTATIONAL BIOMECHANICS



Tim Ricken



Silvia Budday



Oliver Röhrle



Der Fachausschuss „Computational Biomechanics“ bündelt die Aktivitäten der GAMM im Bereich der rechnergestützten Biomechanik und schafft damit eine gemeinsame Plattform für den intensiven wissenschaftlichen Austausch.

Vergangene Aktivitäten:

- SPP 2311: Erfolgreich war die auch über den Fachausschuss begleitete Initiative zur Einrichtung des Schwerpunktprogramms „Robuste Kopplung kontinuumsbiomechanischer In-silico-Modelle für aktive biologische Systeme als Vorstufe klinischer Applikationen - Co-Design von Modellierung, Numerik und Nutzbarkeit“ (<https://www.spp2311.uni-stuttgart.de/>). Ziel des SPP ist es, methodische Grundlagen aus Modellierung, Numerik und Anwendung in einem starken Co-Design zu entwickeln. Mit dem SPP soll eine methodisch orientierte Qualifizierung biomechanischer Simulationsmodelle für den späteren klinischen Einsatz erreicht werden. Initiatoren sind Oliver Röhrle (Koordinator, Stuttgart), Tim Ricken (stellv. Koordinator, Stuttgart), Rainer Bader (Rostock), Silvia Budday (Erlangen) und Axel Klawonn (Köln).
- Neue DFG Forschungsgruppe QuaLiPerF (FOR 5151): Die neue Forschungsgruppe QuaLiPerF will ein Modell entwickeln, das Durchblutung und Funktion der Leber mit großer räumlicher Auflösung in gesundem und krankem Zustand quantifizieren kann. Ziel ist es, über biomechanische Simulation die Wechselwirkungen zwischen operationsbedingten Veränderungen der Durchblutung der Leber, Perfusion genannt, und ihrer Stoffwechselfunktion aufzuklären. Neben Tim Ricken (Uni Stuttgart) und Ole Schwen (Mevis, Bremen) aus dem Bereich der Mechanik sind noch Kollegen aus der System- und Molekularbiologie, Bioinformatik, Radiologie sowie der experimentellen Chirurgie und Medizin beteiligt (Sprecherin: Professorin Dr. Uta Dahmen, Universität Jena).

- GAMM FA Bio 2020: Der zweite Workshop des GAMM-Fachausschusses „Computational Biomechanics“ fand vom 21. - 22. September 2020 auf Kloster Banz nahe Erlangen statt und wurde von Silvia Budday organisiert. Der Workshop wurde als Hybridveranstaltung durchgeführt, sodass sowohl die Präsenz- als auch die Onlineteilnahme möglich war. Die Resonanz war sehr positiv, sodass auch im nächsten Jahr die Veranstaltung wieder hybrid durchgeführt werden soll.

Für 2021 weisen wir auf folgende Veranstaltungen hin:

- WCCM 2020/21: Minisymposium „Computational Modeling of Active Biological Systems“. Das vom Vorstand des Ausschusses organisierte Minisymposium wurde in digitaler Form auf den 11. - 15. Januar 2021 verlegt. Interessierte sind gerne eingeladen, mit einem eigenen Beitrag am Minisymposium teilzunehmen.
- Workshop Musculoskeletal Systems: Sofern die COVID-19 Situation es zulässt, findet vom 20. - 22. Juli 2021 ein „Musculoskeletal System Workshop“ in Stuttgart statt. Dieser wird von Oliver Röhrle und Syn Schmitt (beide Stuttgart) organisiert und hat das Ziel, die internationale Community auf dem Gebiet der Skelettmuskelmodellierung zusammenzubringen, um aktuelle Arbeiten und Trends aus verschiedenen Blickwinkeln zu diskutieren. Dazu wurden international ausgewiesene Experten als Keynotes eingeladen (https://www.imsb.uni-stuttgart.de/Musculoskeletal_System_Symposium_2020/).
- GAMM FA Bio 2021: Der dritte Workshop des GAMM-Fachausschusses „Computational Biomechanics“ wird vom 28.09. - 29.09.2021 in Stuttgart stattfinden und von Tim Ricken organisiert. Interessierte sind schon jetzt eingeladen, sich für den Workshop per E-Mail anzumelden (office@isd.uni-stuttgart.de).

JAHRESBERICHT 2020 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES COMPUTATIONAL SCIENCE AND ENGINEERING (CSE)



Andrea Walther



Christian Hesch



Matthias Bolten

Der Fachausschuss (FA) „Computational Science and Engineering“ oder kurz „CSE“ wurde 2012 gegründet und widmet sich der Verknüpfung von Mathematik, Ingenieur- bzw. Naturwissenschaften und Informatik bei der Simulation und Optimierung von anwendungsrelevanten Problemen. Zur Erreichung dieses Ziels werden in einem umfassenden Sinn Simulationwissenschaften aus den unterschiedlichen Bereichen der Modellierung, numerische Approximation, Algorithmen und Software eng miteinander verzahnt. Aus diesem Grund stammen die derzeit über 107 vollen und assoziierten Mitglieder des Fachausschusses aus dem ganzen Spektrum der angesprochenen Disziplinen.

Das Jahr 2020 ist wie überall auch im FA CSE durch die Corona Pandemie geprägt. Durch die Verschiebung des Jahrestreffens in Kassel von 2020 auf 2021 und damit dem Wegfall unseres jährlichen Treffens der Mitglieder auf der Jahreshaupttagung der GAMM war begleitet davon, dass wir auch die Planung für unseren jährlichen Workshop ins Jahr 2021 schieben mussten. Wir haben in der Zwischenzeit auf administrativer Ebene unsere Web-

seite auf <http://www.mb.uni-siegen.de/nm/gamm-cse/> weiter gepflegt und die Mitgliederlisten aktualisiert, die ebenfalls auf unserer Webseite einsehbar und – soweit das Einverständnis der gelisteten Mitglieder vorliegt – direkt auf deren Homepages verweist.

Um die Diskussionen innerhalb des FA wieder zu starten, haben wir am 13. November 2020 ein offenes Online-Meeting mit 15 Mitgliedern des FA durchgeführt. Wir haben darin beschlossen, dass wir zur Unterstützung des Nachwuchses einen Online-Workshop an drei Freitagen im Januar (15., 22. und 29.01.2021) durchführen werden, um jungen Doktoranden und Nachwuchsgruppen der GAMM die Gelegenheit zu geben, vor einem Fachpublikum vortragen zu können. Dazu werden noch im November 2020 gezielt die entsprechenden Nachwuchsgruppen sowie die Mitglieder des CSE FA im Hinblick auf deren neu hinzugekommenen Doktoranden, angeschrieben und eingeladen.

JAHRESBERICHT 2020 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES DATA-DRIVEN MODELING AND NUMERICAL SIMULATION OF MICRO- STRUCTURED MATERIALS (AG DATA)



Benjamin Klusemann



Felix Fritzen

Der GAMM Fachausschuss Data-driven modeling and numerical simulation of microstructured materials (AG Data) hat das Ziel die vielfältigen Aktivitäten aus den Bereichen der datengetriebenen Modellierung, des maschinellen Lernens und der Mehrskalen-Simulation von komplexen Materialien und Verbundwerkstoffen innerhalb der GAMM zu bündeln. Pandemiebedingt wurde der 6. GAMM AG Data Workshop virtuell am 20./21. Oktober durchgeführt (Organisation F. Fritzen, B. Klusemann). Mit über 40 Teilnehmern und 17 Vorträgen gab es eine sehr gute Resonanz und mit Prof. Chinesta (Arts et Métiers ParisTech) konnte ein renommierter internationaler Kollege für eine Keynote zum Thema „Data-driven engineering and engineered data“ gewonnen werden. Den Teilnehmerinnen wurde die Möglichkeit zur intensiven Diskussion in Kleingruppen in „Breakout-Sessions“ gegeben. Inhaltlich setzte sich der Trend hinsichtlich einer

Zunahme der Beiträge zur datengetriebenen Modellierung und zum maschinellen Lernen fort. Der intensive fachliche Austausch wurde durch einen eingeladenen Vortrag von Sibylle Hermann (Universität Stuttgart) zum Thema Forschungsdatenmanagement ergänzt. Das Thema Metadaten wurde intensiv diskutiert und nächste Schritte der AG Data definiert. Das nächste Treffen soll in Stuttgart, voraussichtlich am 27./28. Juli 2021, stattfinden. Die Organisation wird erfreulicher Weise von Tim Ricken und Mitarbeitern übernommen. Weitere Informationen werden zeitnah über die Homepage und die Mailingliste bekanntgegeben.

Homepage:
<https://www.mib.uni-stuttgart.de/en/emma/ag-data>
Mailingliste: Mail an fritzen@mib.uni-stuttgart.de.

JAHRESBERICHT 2020 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES PHASENFELDMODELLIERUNG



Laura De Lorenzis



Bernd Markert

Der Fachausschuss Phasenfeldmodellierung ist eine interdisziplinäre Zusammensetzung von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern aus den Bereichen Mathematik, Materialwissenschaft und Mechanik. Das thematische Spektrum umfasst Formulierungen für Erstarrungsvorgänge und allgemeine Phasentransformationen, sowie Modellierungsansätze in Gebieten wie Bruchmechanik, Benetzung und Topologieoptimierung, und deren numerische Umsetzung. Neueste Ergebnisse aus dem Bereich der Phasenfeldmo-

dellierung wurden am 10.-11.2.2020 auf dem „7th GAMM Workshop on Phase Field Modeling“ in Kaiserslautern präsentiert und diskutiert. Das Seminar wurde von Herrn Prof. Ralf Müller und Herrn Dr. Alexander Schlüter (Universität Kaiserslautern) organisiert. Aufgrund der Corona-Pandemie fanden danach keine weiteren Veranstaltungen statt. Aus dem gleichen Grund wurde für das „8th GAMM Workshop on Phase Field Modeling“ noch kein Termin festgelegt.

JAHRESBERICHT 2020 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES UNCERTAINTY QUANTIFICATION (UQ)



Claudia Schillings

Tim Sullivan

Der Fachausschuss Uncertainty Quantification (FA UQ) fördert den wissenschaftlichen Austausch zur Quantifizierung von Unsicherheiten in technisch-wissenschaftlichen Berechnungen und vertritt dieses Fachgebiet innerhalb der GAMM. Die AGUQ zählt aktuell 126 Mitglieder; Mitgliedschaft kann jederzeit beantragt werden per E-Mail an gamm-ug@zib.de.

In 2020 war mit 25 Vorträgen wieder eine grosse Beteiligung des FA UQ bei der Jahrestagung in Kassel geplant. Organisiert wurde die Sektion von Andrea Barth (U Stuttgart) und Philipp Petersen (Universität Wien). Die Jahrestagung wurde aufgrund der Pandemie auf 2021 verschoben. Für das Frühjahr 2020 war zudem die Konferenz SIAM UQ 2020 in Garching in Kooperation mit dem FA UQ geplant. Ko-vorsitzende des Organisationskommittees war FA UQ Mitglied Elisabeth Ullmann (TUM) und vertreten wurde der FA im Komitee durch Lorenzo Tamellini (CNR-IMATI). Insgesamt wurden 24 der 89 Minisymposia von mindestens einem Mitglied des FA UQ organisiert. FA UQ Mitglied Karen Veroy-Grepl (Eindhoven University of Technology) wurde zu einem Plenarvortrag zum Thema 'Optimal experimental design for the quantification of model uncertainty: A functional analysis perspective' eingeladen. Aufgrund der Pandemie wurde die Konferenz abgesagt, einige Minisymposia konnten allerdings erfolgreich digital stattfinden. FA UQ Mitglied Björn Sprungk erhielt den SIAG/Uncertainty Quantification Early Career Prize. Wir gratulieren an dieser Stelle noch einmal herzlich!

Vom 10.8.-14.8.2020 fand die Konferenz MCQMC in digitaler Form statt, bei der viele FA UQ Mitglieder durch Vorträge mitwirkten. Claudia Schillings (U Mannheim) gab einen Plenarvortrag zum Thema 'Optimization approaches for Bayesian inverse problems: Preconditioning integration methods in the small noise or large data limit'.

Termine in 2021

- GAMM Jahrestagung 2021 in Kassel.
- BIRS Workshop 'Optimization under Uncertainty: Learning and Decision Making', Org. Johannes Royset (Naval Postgraduate School), Lars Ruthotto (Emory University), Claudia Schillings (U Mannheim), Thomas Surowiec (Philipps-Universität Marburg)
- 6th ECCOMAS Young Investigators Conference (July 7-9, 2021, <https://yic2021.upv.es>) in Valencia
- CEMRACS 2021 Sommerschule zu 'Data Assimilation and Reduced Modeling for High Dimensional Problems' (July 19-August 27, 2021) in CIRM, Luminy.
- Dagstuhl Seminar zu 'Probabilistic Numerical Methods From Theory to Implementation', Org. Philipp Hennig (Tübingen), Ilse Ipsen (NCSSU), Maren Mahsereci (Amazon), Tim Sullivan (Warwick)

JAHRESBERICHT 2020 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

EXPERIMENTELLE FESTKÖRPERMECHANIK



Stefan Hartmann



Stefan Diebels

Der GAMM Fachausschuss Experimentelle Festkörpermechanik hat sein Jahrestreffen am 18. Februar dieses Jahres an der Universität Stuttgart absolviert. Das Oberthema war die Einbeziehung von μ -CT Daten in Problemstellungen der Mechanik. Mögliche Anwendungsgebiete sind die Mikroskalen-Simulation auf der Basis vollaufgelöster Mikrostrukturen, Mehrskalensimulationen und Homogenisierungskonzepte. Dazu wurden vor allem Untersuchungen von in-situ Messungen bei faserverstärkten Kunststoffen und die Einbindung dieser Datensätze in Homogenisierungskonzepten am Beispiel der Modellierung von kurzfaserverstärkten Kunststoffen vorgestellt. Weiterhin bestand die Möglichkeit zur Kontaktaufnahme mit Industrievertretern.

Das Institut für Mechanik (Bauwesen) der Universität Stuttgart hat zudem eine Führung zur Eigenentwicklung eines μ -CTs mit einer in-situ-Messeinheit geleitet,

so dass reale Problemstellungen aus dem Bereich der Bodenmechanik und für andere mikrostrukturierte Materialien, die dabei vorhandenen technischen Problemstellungen sowie die erreichbaren Genauigkeiten diskutiert werden konnten.

Des Weiteren wird durch die Fachausschüsse Data-driven modeling and numerical simulation for microstructured materials und dem Fachausschuss Experimentelle Festkörpermechanik über die GAMM zukünftig die Aktivitäten des NFDI-Konsortiums NFDI-MatWerk für die Materialwissenschaft & Werkstofftechnik (Nationale Forschungsdateninfrastruktur) unterstützt, um Informationen und Einfluss in dem Konsortium zu erhalten, da eine Reihe der Mitglieder der GAMM mit den Fragestellungen der Datenspeicherung konfrontiert sind. Über die beiden Fachausschüsse ist die GAMM an der Antragstellung beteiligt.

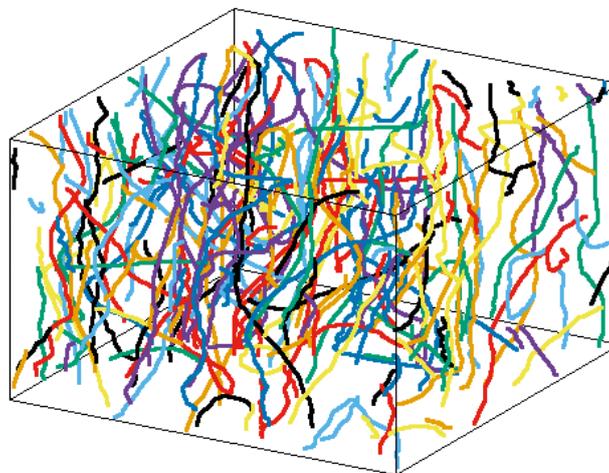


Abb. 1: Rekonstruktion gekrümmter Faser aus m-CT Aufnahmen

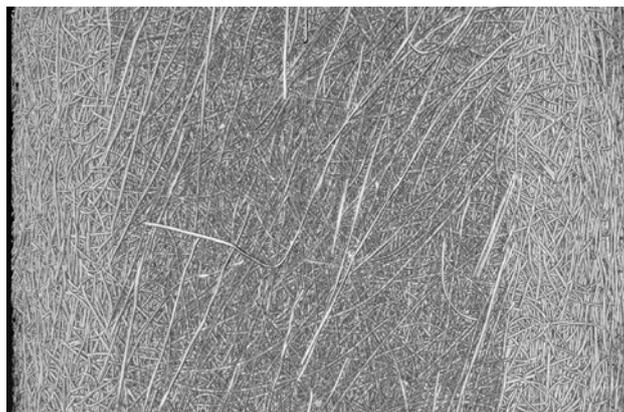


Abb. 2: m-CT Aufnahme eines Cellulose gefüllten Composites

JAHRESBERICHT 2020 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

MODELLIERUNG, ANALYSIS UND SIMULATION MOLEKULARER SYSTEME



Benjamin Stamm



Gero Friesecke



Reinhold Schneider

Unser Jahrestreffen fand dieses Jahr Corona-bedingt virtuell statt. Während zwei Tagen haben wir uns virtuell zu Vorträgen getroffen. Es ergaben sich viele interessante Diskussionen und neue Kontakte.

Bemerkenswert war die hohe Beteiligung von Nachwuchs-Forschenden.

Zudem erfreut sich unser Jahrestreffen vermehrt einer internationalen Beliebtheit. Obwohl die Bilanz unter den Umständen sehr erfreulich war, hoffen wir auf eine Präsenzveranstaltung im nächsten Jahr.

Leider musste auch ein, von diesem Fachausschuss organisiertes großes Mini-Symposium über Elektronenstruktur-Berechnungen an der alle zwei Jahre stattfin-

denden grossen SIAM-Tagung ‚Mathematical Aspects of Materials Science‘ von 2020 auf das nächste Jahr verschoben werden. Wir sind aber guten Mutes, dass unser ‚GAMM-Minisymposium‘ an dieser nun virtuell geplanten Veranstaltung ein wissenschaftlicher Erfolg wird und einen Beitrag zur internationalen Sichtbarkeit des Fachausschusses und der GAMM leistet.

Aktuelle Informationen hierüber sowie über weitere Aktivitäten finden sich auf unserer Website <https://moansi.wixsite.com/gamm>.

JAHRESBERICHT 2020 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

NUMERISCHE ANALYSIS



Lars Grasedyck



Daniel Peterseim

Dieser Fachausschuss beschäftigt sich mit der numerischen Analysis, einer Kerndisziplin der angewandten Mathematik. Ein besonderes Augenmerk liegt auf Anwendungen in den Natur- und Ingenieurwissenschaften. Den inhaltlichen Schwerpunkt des Fachausschusses bildet die Numerik partieller Differentialgleichungen, insbesondere Methoden für mehrskalige, hochdimensionale, datenbasierte oder unsicherheitsbehaftete Probleme. Ausgehend von der engen Verknüpfung von Algorithmenentwicklung und mathematischer Analyse fördert der Fachausschuss zuverlässige und effiziente Computersimulationen als Schlüsseltechnologie für den wissenschaftlichen und industriellen Erkenntnisgewinn.

Viele der ursprünglich für das vergangene Jahr geplanten Konferenz-Aktivitäten konnten leider nicht stattfinden. Dafür haben wir uns kurzfristig in digitalen Initiativen engagiert. Hierzu zählt insbesondere die virtuelle Seminarreihe „One World Numerical Analysis

Series“, die seit dem Sommer vom International Institute for Mathematical Sciences in Edinburgh veranstaltet wird. Interessierte finden Informationen hierzu unter https://www.icms.org.uk/V_OWNumAnal.php Für das Jahr 2021 planen wir das Jahrestreffen zur Numerischen Analysis in Hannover nachzuholen und auch die von Robert Altmann (Augsburg) organisierte Reihe von Nachwuchs-Workshops in den Räumlichkeiten der Kurt-Bösch-Stiftung in Sion/Schweiz mit einer Veranstaltung zum Thema „Maxwell, Stokes und Schrödinger“ fortzusetzen.

Für aktuelle Information zum Ausschuss sei auf die Webseite https://www.igpm.rwth-aachen.de/gamm_numerical_analysis verwiesen.

WISSENSCHAFTLICHE VERANSTALTUNGEN

GAMM

Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik

<http://www.gamm-ev.de>

Tagungsjahr 2021

91. GAMM Jahrestagung in Kassel
15.-19.03.2021

<https://jahrestagung.gamm-ev.de/index.php/2020/2020-annual-meeting>

Weitere interessante Veranstaltungen können Sie auf den Seiten der Fachausschüsse der GAMM direkt einsehen.

Angewandte Operatortheorie
<http://www.gamm-ot.uni-wuppertal.de/>

Stochastische Optimierung in der Technik
<http://gamm-sc.mathematik.uni-karlsruhe.de/index.html>

Dynamik und Regelungstheorie
<http://ifatwww.et.uni-magdeburg.de/syst/GAMMFA/gammfa.shtml>

Analysis von Mikrostrukturen
<http://www.iam.uni-bonn.de/aaa2/gamm-fa/>

Optimierung mit partiellen Differentialgleichungen
<http://www.gamm.optpde.net>

Computational Science and Engineering (CSE)
<http://www.uni-stuttgart.de/gamm/fa-cse>

Mathematische Signal- und Bildverarbeitung
<http://www3.math.tu-berlin.de/numerik/GAMM-MSIP/>

Uncertainty Quantification
<http://www.tu-chemnitz.de/gamm-uv>

Angewandte und Numerische Lineare Algebra
<https://gammanla.wordpress.com/>

Phasenfeldmodellierung
http://www.mv.uni-kl.de/lm/forschung/GAMM-FA_PFM

Analysis partieller Differentialgleichungen
<http://www.uni-regensburg.de/mathematics/partial-differential-equations/index.html>

Data-driven Modeling and Numerical Simulation for Microstructured Materials
<http://www.mechbau.uni-stuttgart.de/EMMA/ag-data>

Modeling, Analysis and Simulation of Molecular Systems
<https://moansi.wixsite.com/gamm>

Experimentelle Festkörpermechanik
<https://www.itm.tu-clausthal.de/institut/abteilungen/abteilung-festkoerpermechanik/gamm-fa-experimental-solid-mechanics/home/>

Numerische Analysis
https://www.igpm.rwth-aachen.de/gamm_numerical_analysis

Computational Biomechanics
Computational and Mathematical Methods in Data Science
<https://www.tu-chemnitz.de/mathematik/wire/cominds>

Weitere Tagungen sind auf der GAMM-Homepage
<http://www.gamm-ev.de> einzusehen.

IUTAM

International Union of Theoretical and Applied Mechanics
<http://www.iutam.net>

ECCOMAS

European Community on Computational Methods in Applied Sciences
<http://www.cimne.com/eccomas>

EUROMECH

European Mechanics Society
<http://www.euromech.org>

EMS

European Mathematical Society
<http://www.euro-math-soc.eu/>

MFO

Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach
<http://www.mfo.de>

CISM

International Centre for Mechanical Sciences
<http://www.cism.it>

Weitere interessante wissenschaftliche Veranstaltungen können Sie auf den Links der einzelnen Organisationen einsehen.



Foto: Peter Ulrich Hehn

GM MITGLIED WERDEN!

AUSSCHREIBUNG DES RICHARD-VON-MISES-PREISES DER GAMM 2022

CALL FOR NOMINATIONS FOR THE RICHARD VON MISES PRIZE OF THE INTERNATIONAL ASSOCIATION OF APPLIED MATHEMATICS AND MECHANICS (GAMM) 2022

Seit dem Jahr 1989 verleiht die GAMM jährlich den Richard-von-Mises-Preis für hervorragende wissenschaftliche Leistungen auf dem Gebiet der Angewandten Mathematik und Mechanik.

Traditionsgemäß erfolgt die Verleihung dieses Preises im Rahmen der Eröffnungsveranstaltung der Jahrestagung der GAMM.

Der Preisträger oder die Preisträgerin wird dazu seine/ihre Forschungsergebnisse in einem Hauptvortrag präsentieren. Der Preis dient der Förderung jüngerer Wissenschaftler/-innen, deren Forschungsarbeiten wesentliche Fortschritte im Bereich der Angewandten Mathematik und Mechanik darstellen. Der Preis beinhaltet eine Urkunde, eine kostenlose 2jährige Mitgliedschaft sowie ein Preisgeld in Höhe von 2000 Euro. Um die Breite des Bereichs der Angewandten Mathematik und Mechanik gerecht zu werden, kann das Preiskomitee eine Aufspaltung des Preises (und damit des Preisgeldes) zu gleichen Teilen auf zwei Personen beschließen.

Der oder die Preisträger/-in soll zum Zeitpunkt der Nominierung weder eine Lebenszeitprofessur bekleiden noch einen Ruf auf eine solche vorliegen haben und nicht älter als 36 Jahre sein. Abweichungen von dem genannten Zeitrahmen infolge von Ausfallzeiten z.B. aus familiären Gründen oder aufgrund einer Behinderung oder Krankheit werden angerechnet. Die GAMM strebt an, dass unter den Richard-von-Mises-PreisträgerInnen die beiden Fachrichtungen Angewandte Mathematik und Mechanik gleichmäßig vertreten sind. Zudem wird eine angemessene Geschlechterverteilung angestrebt.

Vorschlagsberechtigt sind Hochschullehrer/-innen und Personen in entsprechenden Stellungen in der Forschung. Auch die Möglichkeit der eigenen Bewerbung ist gegeben. Vorschläge bzw. Bewerbungen sollten ein Begründungsschreiben und folgende Unterlagen des Kandidaten/ der Kandidatin enthalten:

- Lebenslauf,
- Publikationsliste,
- Kopien der wichtigsten wissenschaftlichen Arbeiten (max. 4).

Die Nominierungen sind an die Geschäftsstelle der GAMM in Dresden, vorzugsweise in elektronischer Form, zu schicken.

Der Einreichungstermin ist der **30. September 2021**.

Der Präsident der GAMM führt den Vorsitz des Richard-von-Mises-Preiskomitees, das folgende Mitglieder hat:

M. Oberlack, Darmstadt	(2019 – 2024)
R. Lammering, Hamburg	(2017 – 2022)
B. Jacob, Wuppertal	(2017 – 2022)
C. Wieners, Karlsruhe	(2017 – 2022)

Präsident der GAMM
Jörg Schröder,
Essen (Vorsitz) (2020-2022).

Since 1989, the Richard-von-Mises Prize is awarded every year by GAMM to a scientist for exceptional scientific achievements in the field of Applied Mathematics and Mechanics.

Traditionally, GAMM will present the prize during the opening ceremony of the GAMM Annual Meeting and the prize winner will present her/his research in a plenary talk.

The aim of the prize is to reward and encourage young scientists whose research represents a major advancement in the field of Applied Mathematics and Mechanics.

The winner should not be older than 36 years, neither hold a lifetime professorship nor have a call on such a position the time of nomination. Deviations from this time frame as a consequence of inactive periods due to sickness or maternity leaves will be taken into account. The GAMM aims at a well-balanced representation of the two fields Applied Mathematics and Mechanics among the Richard-von-Mises award winners as well as at a well-balanced gender distribution.

Nominations can be made by university professors or academic persons in similar positions. Self nomination is accepted.

Nominations should contain a justification letter by the nominating persons and the following material concerning the nominee:

- curriculum vitae,
- list of publications,
- copies of the most important articles (at most 4).

Nominations should be sent to Geschäftsstelle der GAMM in Dresden, preferably in electronic form.

The deadline for nomination is **September 30th, 2021**.

The Richard-von-Mises Prize committee has the following members:

Geschäftsstelle der GAMM
Prof. Dr.-Ing. habil. Michael Kaliske
Institut für Statik und Dynamik der Tragwerke
Fakultät Bauingenieurwesen
01062 Dresden

Telefon: +49(0) 351-463-33448
Telefax: +49(0) 351-463-37086
E-Mail: GAMM@mailbox.tu-dresden.de

Präsident: **Prof. Jörg Schröder**
 Universität Duisburg-Essen,
 Campus Essen, Fakultät für
 Ingenieurwissenschaften,
 Institut für Mechanik,
 Universitätsstraße 15,
 45117 Essen

Vizepräsidentin: **Prof. Heike Faßbender**
 Technische Universität Braunschweig,
 Institut für Numerische Mathematik
 Universitätsplatz 2,
 38106 Braunschweig

Sekretär: **Prof. Michael Kaliske**
 Technische Universität Dresden,
 Institut für Statik und Dynamik der
 Tragwerke, Fakultät Bauingenieurwesen,
 01062 Dresden

Vizesekretär: **Prof. Ralf Müller**
 Technische Universität Kaiserslautern,
 Lehrstuhl für Technische Mechanik,
 Postfach 3049, 67653 Kaiserslautern

Schatzmeisterin: **Prof. Andrea Walther**
 Humboldt-Universität zu Berlin, Unter
 den Linden 6, 10099 Berlin

Weitere Mitglieder des Vorstandsrates

Prof. Helmut Abels
 Universität Regensburg, Fakultät für Mathematik,
 Universitätsstraße 31, 93053 Regensburg

PD Olga Shishkina
 Max Planck Institute for Dynamics and Self-Organization
 Am Fassberg 17
 37077 Goettingen

Prof. Günter Hofstetter
 Universität Innsbruck, Institut für Grundlagen der
 Technischen Wissenschaften,
 Technikerstraße 13,
 6020 Innsbruck, Österreich

Prof. Jörn Sesterhenn
 Universität Bayreuth,
 Fakultät für Ingenieurwissenschaften,
 Universitätsstraße 30,
 95447 Bayreuth

Prof. Barbara Kaltenbacher
 Alpen-Adria-Universität Klagenfurt,
 Institut für Mathematik,
 Universitätsstr. 65-67,
 A-9020 Klagenfurt, Österreich

Prof. Axel Klawonn
 Universität zu Köln,
 Department Mathematik/Informatik,
 Weyertal 86-90, 50931 Köln

Prof. Benjamin Stamm
 RWTH Aachen University
 Mathematics
 Schinkelstr. 2, 52062 Aachen

Prof. Tim Ricken
 Universität Stuttgart,
 Institut für Statik und Dynamik der Luft- und
 Raumfahrtkonstruktionen,
 Pfaffenwaldring 27, 70569 Stuttgart

Prof. Oliver Ernst
 Technische Universität Chemnitz,
 Fakultät für Mathematik,
 Reichenhainer Str. 41,
 09126 Chemnitz

Prof. Kerstin Weinberg
 Universität Siegen
 Maschinenbau
 Paul-Bonartz-Str. 9-11, 57076 Siegen

Prof. Robert Seifried
 Technische Universität Hamburg-Harburg, Mechanik und
 Meerestechnik,
 Eißendorfer Straße 42 (M), 21073 Hamburg

Prof. Roland Herzog
 Technische Universität Chemnitz,
 Numerische Mathematik,
 Reichenhainer Straße 41, 09126 Chemnitz

Beratende Mitglieder des Vorstandsrates

Prof. em. Dr. Götz Alefeld
 Universität Karlsruhe (TH), Fakultät f. Mathematik, Institut f.
 Angewandte Mathematik, Postfach 6980, 76128 Karlsruhe

**o. Prof. i.R. Dr. Ing. Dr.-Ing. E.h. Dr. h.c. mult.
 Friedrich Pfeiffer**
 Technische Universität München, Lehrstuhl B für
 Mechanik, Boltzmannstraße 15, 85748 Garching

Prof. em. Dr.-Ing. Dr. techn. E.h. Dr. h.c. Jürgen Zierep
 Universität Karlsruhe, Institut für Strömungslehre
 und Strömungsmaschinen, 76128 Karlsruhe

Kassenprüfer

Prof. Michael Beitelschmidt
 Technische Universität Dresden,
 Fakultät Maschinenwesen

Prof. Stefan Neukamm
 Technische Universität Dresden,
 Institut für Wissenschaftliches Rechnen

EHRENMITGLIEDER DER GAMM

Ehrenvorsitzender

Prof. Dr. Ludwig Prandtl (1950)
† 15. August 1953

Ehrenmitglieder

Prof. Dr. Theodor von Kármán (1956)
† 7. Mai 1963

Prof. Dr. Aurel Stodola
† 25. Dezember 1942

Prof. Dr. Henry Görtler (1980)
† 31. Dezember 1987

Prof. Dr. Felix Klein (1924)
† 22. Juni 1925

Prof. Dr. Lothar Collatz (1980)
† 26. September 1990

Prof. Dr. Eric Reissner (1992)
† 1. November 1996

Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Wendland (2019)

Prof. Dr. Wolfgang Haack (1992)
† 28. November 1994

Prof. Dr. Klaus Kirchgässner (2011)
† 9. Juli 2011

Prof. Dr. Helmut Heinrich (1993)
† 14. Januar 1997

Prof. Dr.-Ing. Erwin Stein (2011)
† 19. Dezember 2018

Prof. Dr. Klaus Oswatitsch (1993)
† 1. August 1993

Prof. Dr.-Ing. Jürgen Zierep (1999)

Prof. Dr.-Ing. Oskar Mahrenholtz (1997)
† 6. April 2020

Prof. Dr. Kurt Magnus (1993)
† 15. Dezember 2003

PERSONALIA

Todesfälle, wir gedenken:

Prof. Dr. Klaus Böhmer, Marburg

Prof. Dr. Martin Barner, Königfeld im Schwarzwald

Dr. Werner Hofschuster, Wuppertal

Prof. Dr. Hans Obrecht, Bochum

SIAM leads the way in **Data Science**

Data science is a fast-moving and rapidly expanding research area, and SIAM is dedicated to providing ways to get involved.

Here's how:

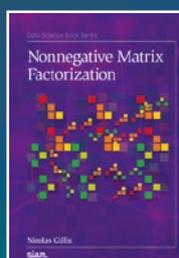
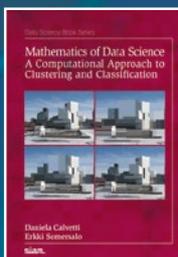
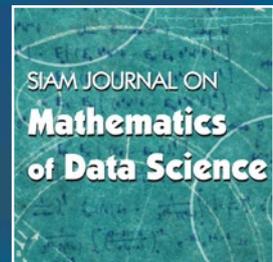


Conference on Mathematics of Data Science

The inaugural MDS20 conference took place virtually in May, with the next conference planned for spring 2022. SIAM members with a research interest in data science should join the **SIAM Activity Group on Data Science (SIAG/DATA)** when they renew their SIAM membership at my.siam.org.

SIAM Journal on Mathematics of Data Science

SIAM's newest journal publishes work that advances mathematical, statistical, and computational methods in the context of data and information sciences. We invite papers that present significant advances in this context, including applications to science, engineering, business, and medicine.



Data Science Book Series

This new SIAM book series covers the mathematical, computational, and scientific aspects of data science, and will publish high-impact research monographs, in-depth essays on emerging trends, tutorials with a broad reach, state-of-the-art surveys, scholarly research retrospectives, and textbooks. The series is seeking proposals for new books—contact SIAM's acquisitions department to discuss your ideas.

siam[®]
Society for Industrial and
Applied Mathematics

Learn more about data science and how you
can get involved:

siam.org/Research-Areas/Data-Science