



AUS DEM INHALT:

HERAUSGEBER
IM AUFTRAG DES VORSTANDES DER GAMM E.V.:
PROF. DR.-ING. JÖRG SCHRÖDER
UNIVERSITÄT DUISBURG-ESSEN
PROF. DR. AXEL KLAWONN
UNIVERSITÄT ZU KÖLN

PETER WRIGGERS, FADI ALDAKHEEL UND
BLAŽ HUDOBIVNIK:
APPLICATION OF THE VIRTUAL ELEMENT
METHOD IN MECHANICS

PATRICK HENNING UND DANIEL PETERSEIM:
ANDERSON-LOKALISIERUNG
IN UNGEORDNETEN QUANTENSYSTEMEN

1/2019

JUNGE WISSENSCHAFTLER:
SILVIA BUDDAY
ROBERT ALTMANN

Herausgeber:
 Prof. Dr.-Ing. Jörg Schröder
 Universität Duisburg-Essen
 Prof. Dr. Axel Klawonn
 Universität zu Köln

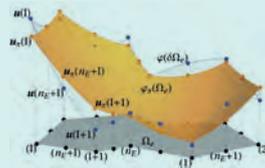
Schriftleitung:
 Prof. Dr.-Ing. Jörg Schröder
 Universität Duisburg-Essen
 Fakultät für Ingenieurwissenschaften
 Abteilung Bauwissenschaften
 Universitätsstraße 15
 45117 Essen
 Tel.: +49 (0)201 / 183-2682
 E-Mail: j.schroeder@uni-due.de

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

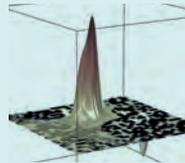
Gestaltung:
 Dr. Hein Werbeagentur GmbH, Köln
 www.heinagentur.de
 Peter Liffers, Dortmund
 www.liffers.de

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

- 4 Application of the Virtual Element Method in Mechanics**
 Peter Wriggers, Fadi Aldakheel und Blaž Hudobivnik



- 12 Anderson-Lokalisierung in ungeordneten Quantensystemen**
 Patrick Henning und Daniel Peterseim



- 21 Steckbrief Silvia Budday**



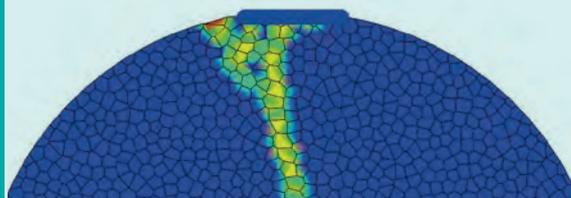
- 23 Steckbrief Robert Altmann**



- 27 GAMM-Junioren Rückblick 2018 und Ausblick 2019**
 Rafael Reisenhofer

Berichte aus den Fachausschüssen:

- 28 Angewandte Operatortheorie**
28 Optimierung mit partiellen Differentialgleichungen
29 Analysis partieller Differentialgleichungen
30 Analysis von Mikrostrukturen
31 Dynamik und Regelungstheorie
32 Mathematische Signal- und Bildverarbeitung (MSIP)
32 Angewandte und Numerische Lineare Algebra (ANLA)
33 Uncertainty Quantification
34 Computational Science and Engineering (CSE)
35 Phasenfeldmodellierung
35 Data-driven modeling and numerical simulation of micro-structured materials (AG Data)
36 Stochastische Optimierung in der Technik
36 Experimentelle Festkörpermechanik
37 Modellierung, Analysis und Simulation molekularer Systeme
38 Computational Biomechanics
38 Numerische Analysis
39 Wissenschaftliche Veranstaltungen
41 Ausschreibung: Richard-von-Mises-Preis 2017
42 Vorstand der GAMM
43 Ehrenmitglieder der GAMM





LIEBE LESERIN, LIEBER LESER,
LIEBE GAMM-MITGLIEDER,

die Methode der finiten Elemente stellt einen Standard-Diskretisierungsansatz für partielle Differentialgleichungen dar, insbesondere für kontinuumsmechanische Anwendungen. Bekanntermaßen wird hierbei das zugrundeliegende Gebiet in einfache geometrische Formen unterteilt, wie z. B. Dreiecke oder Vierecke bzw. Tetraeder oder Hexaeder. Die Methode der virtuellen Elemente (VEM) ist ein Ansatz, bei dem die zugrunde liegende geometrische Form des Elements ein Polygon oder ein Polyeder sein kann. Obwohl dieser Ansatz erst vor etwas mehr als fünf Jahren von Brezzi, Beirão da Veiga und Koautoren vorgestellt wurde, hat er inzwischen eine breite Anwendung gefunden. Im ersten Beitrag stellen Peter Wriggers, Fadi Aldakheel und Blaz Hrdubivnik verschiedene Anwendungen der Methode der virtuellen Elemente in der Mechanik vor.



Der zweite Beitrag trägt den Titel „Anderson-Lokalisierung in ungeordneten Quantensystemen“, benannt nach dem Nobelpreisträger für Physik Philip W. Anderson, der in den 1950er Jahren die Leitfähigkeit in kristallinen Festkörpern untersuchte. Daniel Peterseim und Patrick Henning führen zunächst kurz in die Problematik ein und betrachten dann als Modell für eine mathematische Diskussion der Anderson-Lokalisierung das lineare Schrödinger-Eigenwertproblem.

Die Nachwuchswissenschaftlerin und der Nachwuchswissenschaftler, die sich mit ihrem Arbeitsgebiet im vorliegenden Rundbrief vorstellen, sind aus der Mechanik Silvia Budday von der Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg und aus der Mathematik Robert Altmann von der Universität Augsburg.

Über die Aktivitäten der GAMM-Juniors im Jahr 2018 berichtet ihr Sprecher Rafael Reisenhofer. Hierzu gehören u. a. die Organisation der Poster-Session und des Young Academics Meet Mentors (YAMM) lunch auf der GAMM-Jahrestagung im Frühjahr in München, aber auch die Gründung des GAMM Archive for Students (GAMMAS), einer online frei verfügbaren Zeitschrift für studentische Forschung.

Traditionell berichten in der Frühjahrsausgabe des GAMM-Rundbriefes die derzeit existierenden GAMM-Fachausschüsse über ihre Aktivitäten des vergangenen Jahres. Derzeit hat die GAMM sechzehn aktive Fachausschüsse. Hinweisen möchten wir auch wieder auf die Ausschreibung des Richard-von-Mises-Preises (S. 41).

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 Email an j.schroeder@uni-due.de (Mechanik) oder axel.klawonn@uni-koeln.de (Mathematik).

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

Köln und Essen im Dezember 2018

Jörg Schröder und Axel Klawonn

APPLICATION OF THE VIRTUAL ELEMENT METHOD IN MECHANICS

BY PETER WRIGGERS, FADI ALDAKHEEL AND BLAŽ HUDOBIVNIK

Abstract

Computational Mechanics has many applications in science and engineering. Its range of application has been enlarged widely in the last decades. Still new developments are necessary in this area in order to treat specific and new applications. A new discretization scheme, the virtual element method (VEM), will be discussed in this contribution. Despite being only 5 years under development the application range in engineering of VEM has been enlarged such that it includes large strain formulations for hyperelastic and elasto-plastic responses as well as contact and fracture mechanics. Some of these applications are discussed by means of examples.

Introduction

During the last sixty years methods like the finite difference method, the finite element method, the boundary element method were developed and are now quite mature for application in engineering design problems. Many of these methods cover the problem ranges that are described above (e.g., small/large strains, different constitutive equations or coupled field equations). Additionally new approaches like meshless methods for arbitrary deformations, isogeometric analysis and the extended finite element method (XFEM) for fracture mechanics problems evolved and can be efficiently used within a specific problem range. Thus the art of modelling in engineering means to pick the right numerical solution method that provides accurate results in the most time efficient way.

Each of the methods described above has its own specifications and thus needs experts for a correct and efficient application. As an example: within the finite element method there are hundreds of different finite element formulations for different applications that even can fail when applied to an inadequate problem. The same is true for the other methods.

A relatively new method - the virtual element method - will be presented in this contribution that can be an alternative for specific problems. The method was firstly developed by F. Brezzi, L. Beirão da Veiga and coworkers, see [2] and [3].

Virtual Element Method (VEM)

The virtual element method was developed during the last years and applied to problems in elasticity for small strains and other areas in the linear range, see [2], and inelastic deformations, see [4]. Extensions of the virtual element method to problems of compressible and incompressible nonlinear elasticity and finite plasticity are recent, see, e.g., [5]. There mainly low-order formulations for problems in two and three dimensions were applied, with elements being arbitrary polygons or polyhedrons. The formulations considered are based on minimization of energy for finite elasticity and on pseudo-energy for inelastic applications. For this classes of problems a novel construction of the stabilization energy was introduced, see, e.g., [10] and [11]. The virtual element method typically replaces in the weak formulation or an energy functional the displacement u_h (with the nodal degrees of freedom U_I) by a projection u_π onto a polynomial space, see Fig. 1.

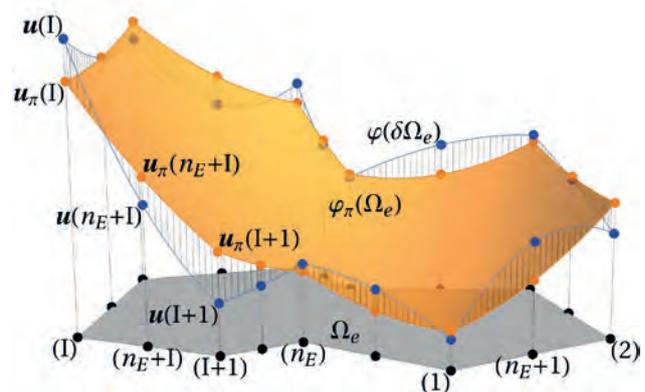


Fig. 1: Projection of an arbitrarily shaped element onto an ansatz space using a quadratic polynomial.

The result of this projection is a rank-deficient element, such that it is necessary to add a stabilization term to the formulation. The stabilization term is generally a function of the difference $u_h - u_\pi$ between the original variable and its projection. In order to adhere to a fundamental idea

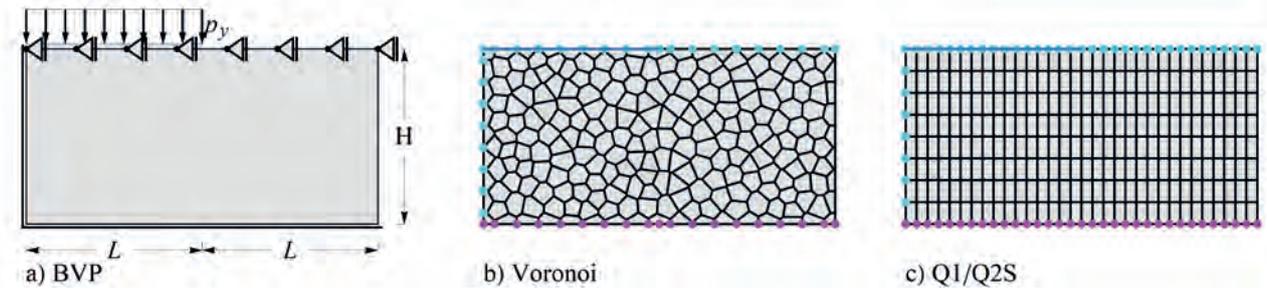


Fig. 2: Punch problem and different mesh types.

of VEM in which all integrations take place on element boundaries, the stabilization will assume the form of a sum of a function of nodal variables, see, e.g., [3]. This is the approach adopted in some nonlinear investigations in which the scalar stabilization parameter of the linear case being replaced by one that depends on the trace of the fourth-order elasticity tensor, see [5].

Another formulation of VEM that uses a different stabilization technique was developed in [10]. The essence of the method is the addition of a positive-definite energy to the positive semidefinite mean strain energy ψ . The energy term $\hat{\psi}$ is evaluated using full quadrature, and for consistency a term involving as a function of the mean strain is subtracted. Thus the strain energy is the sum of

$\psi(u_\pi) + [\hat{\psi}(u_h) - \hat{\psi}(u_\pi)]$, which includes the original energy as a function of the projected displacement, and a term in which a positive definite stabilization energy is added and subtracted as a function of the displacement and its projection. The second term vanishes when the element size goes to zero.

The methodology can be applied for compressible and incompressible elastic and inelastic materials. In the latter case the energy has to be replaced by a pseudo energy in which the history variables are fixed during the first variation.

The application of this new methodology to engineering examples are shown by means of examples which are discussed next.

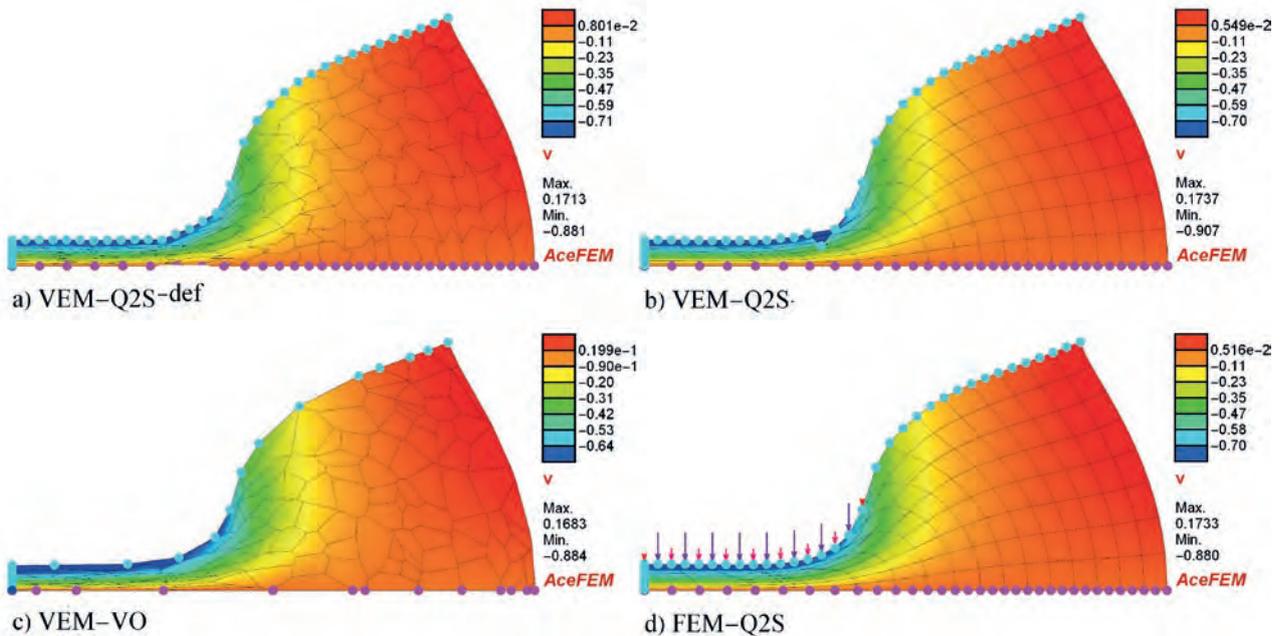


Fig. 3: Comparison of different discretizations.

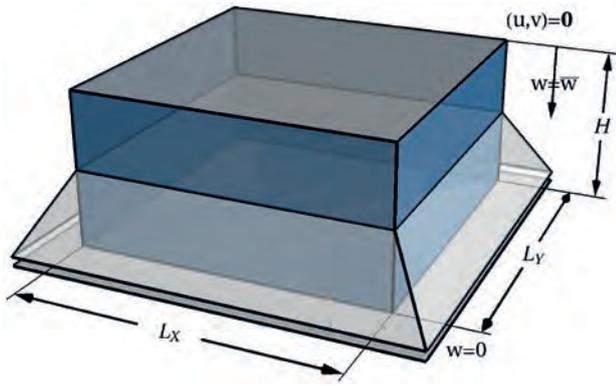


Fig. 4: Initial configuration of punch problem.

VEM for hyperelasticity

Once the projection of the virtual element method is known, which in case of linear polynomials can be computed directly, see [10] and [11], it is simple to compute the constant deformation gradient $F_\pi = \text{Grad } u_\pi$ related to the projection u_π within a virtual element. This computation only involves an integral over the boundary of the virtual element. Once the deformation gradient is known quantities like the right Cauchy Green tensor $C_\pi = F_\pi^T F_\pi$ and its invariants that enter the strain energy function can easily be obtained. With this the strain energy $\psi(u_\pi) - \psi(C_\pi)$ can be computed and by using the software tool AceGen, see [9], the residual and tangent stiffness related to that strain energy function follow.

Additionally a stabilization of the element is needed which is obtained by evaluating the strain energy difference $\hat{\psi}(u_\pi) - \hat{\psi}(u_\pi)$, see [10]. This yields a virtual element with correct rank. The second term can be computed in the same way as $\psi(u_\pi)$. For the first term of the stabilization part an internal triangularization is used that involves only the boundary nodes of the virtual element. Here linear triangles or tetrahedrons are used which again lead to constant strains per internal element and yield an efficient formulation of the virtual element. The stabilization strain energy $\hat{\psi}$ depends on a parameter which is computed for low order VEM by comparing the bending energy of a virtual element with the exact bending energy leading to a low order element with good bending behaviour. Note that incompressible behaviour can be incorporated as in linear quadrilateral and hexahedra elements by using a constant pressure per element leading to a VE-P0 element, see [10].

As example we consider the punch problem depicted on the left side in Fig. 2. The punch is on rollers at the bottom and the left side. The displacement at the top is restricted such that it can only deform vertically. A uniform load is applied at the top on the left half of the punch. A Neo-Hookean strain energy is used with a Young's modulus of $E = 240 \text{ kN/mm}^2$ and a Poisson ratio of $\nu = 0.3$. The length

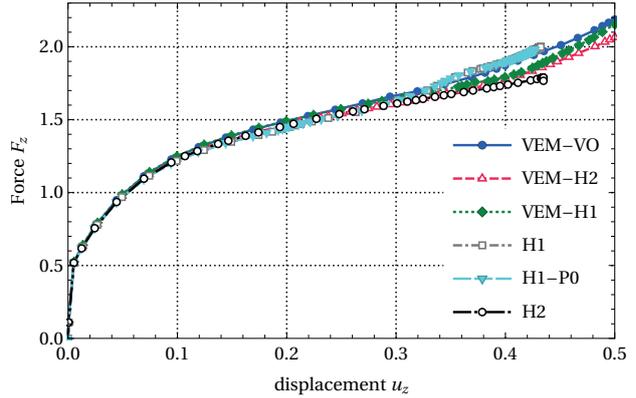


Fig. 5: Load deflection curves of the punch problem for different element formulations.

L and height H have the same value of 1 mm. A total load of 800 kN/mm is applied leading to the deformed configurations shown in Fig. 3.

Different types of meshes were used as can be seen in Fig. 2 b) and c) on the right side. The meshes consist of 8 noded quadrilateral elements that are standard for a serendipity finite element mesh, here denoted by Q2S. The results for this type of mesh can be seen in Fig. 3 b) and d) where b) relates to a solution using linear virtual elements with eight nodes and d) depicts the solution when using quadratic serendipity finite elements. In Fig. 3 a) the Q2S mesh is distorted by randomly positioning the nodes of a Q2S serendipity mesh. This leads even to nonconvex elements. The solution is here obtained with virtual elements that directly discretize these elements. Finally in Fig. 3 c) a randomly generated Voronoi mesh was used that consists of elements with different sizes.

All discretizations converge for a mesh size of 32×16 elements to the same solution, however even when the meshes have only 8×4 elements the deviation of the final vertical displacement under the load is less than 1 % with respect to the converged solution. Thus VEM discretizations yield solutions that have the same accuracy as when using finite elements.

VEM for finite strain elasto-plasticity

In the contribution [11] the virtual element method using linear polynomial approximations was applied to finite strain plasticity for two-dimensional problems while in [7] three-dimensional applications were addressed. The elasto-plastic behaviour was described by a standard J2 plasticity model with isotropic hardening which was integrated using exponential mapping algorithms.

A punch problem was considered in [7] and [11] as an example for the application of VEM in finite strain elasto-plasticity. Here a block is subjected to a vertical displacement at the upper side, as shown in Fig. 4. The upper part of the block is fixed in X and Y -directions while the

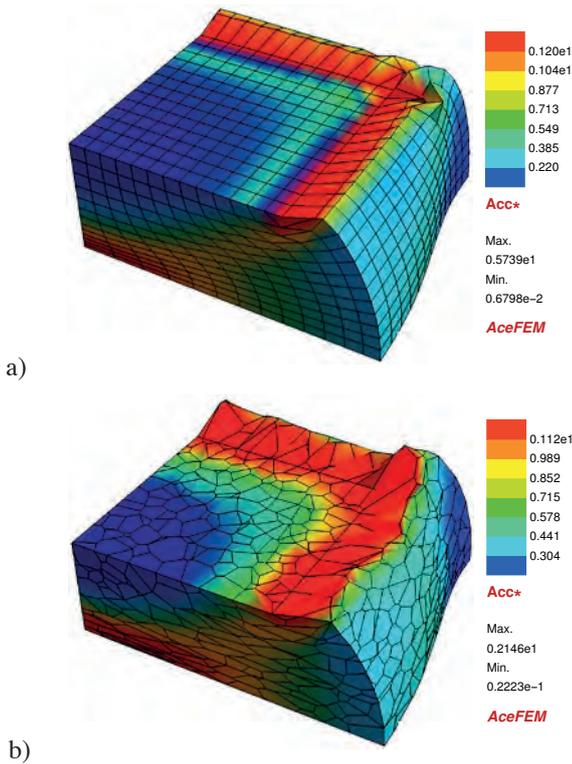


Fig. 6: Distribution of the equivalent plastic strain α at the final deformation state for a mesh with $13 \times 13 \times 13$ elements for a) a FEM-H1 and b) a VEM-VO discretization.

bottom part is on rollers. A total displacement of 50% of the block height H is applied, i.e. $\hat{w} = -0.5 H$. The material data can be found in [9]. The block has dimensions $L_x = 2$ mm, $L_y = 2$ mm and $H = 1$ mm. In the simulation, a quarter of the block was modeled, i.e. $0.5 L_x \times 0.5 L_y \times H$ and the boundary conditions were modified accordingly.

Due to the large vertical displacement, the block is subjected to finite elastic-plastic deformations. Figure 5 demonstrates the load displacement curves computed for different elements: H1, H1-P0, H2, VEM-H2, VEM-VO and VEM-H1, where H1 means standard linear hexahedron element, H1-P0 is the classical mixed form with constant pressure, H2 is the quadratic displacement element with quadratic shape functions and VEM means linear virtual elements that approximate the geometry with the shape and number of nodes of the H1 and H2 elements as well as with Voronoi cells (VEM-VO). A mesh with $13 \times 13 \times 13$ elements was used in the analysis.

It can be observed that all formulations yield the same curve up to a displacement of 0.32 mm, see Figure 5. After that, the resulting vertical force start to slightly diverge.

It is interesting to note that the finite elements H1, H1-P0 and H2 all failed at same level of displacement: $\hat{w} = 0.42$ mm. This is due to the severe distortion of the elements at the upper right corner where the material flows out under the punch. While virtual elements reach the final value of $\hat{w} = 0.5$ mm for all chosen meshes. We additionally note, that the virtual elements did not need a



Fig. 7: Torsion test of a square-section bar. a) Geometry and boundary conditions and b) Voronoi mesh.

refined load steps as was the case for finite elements towards the failure. Thus, here virtual element formulations are more robust when compared with FEM results.

The deformed meshes for solutions with different elements and meshes are depicted in Fig. 6 which depicts the severe deformation related to the application of the full load. It can be seen that the material squeezes out and lifts up on the right side of the block. However this is only the case for this relatively coarse mesh. Since all formulations converge to the same value for finer meshes, as shown in Fig. 5, these differences will disappear for finer meshes. We note that the distribution of the equivalent plastic strain is captured in all formulations. The discretization using the virtual element with a Voronoi mesh converges to the correct solution, even for very fine meshes that usually are very sensitive to high mesh distortions.

Another example is related to the torsion of a column with quadratic cross sectional area, see also [7].

The geometrical setup and the loading conditions of the specimen are depicted in Fig. 7 a).

The height along the third direction Z is chosen to be $H = 5$ mm and the length of the square cross section is set to $L = 1$ mm. At the boundaries, we fixed the bottom end of the bar and applied torsion to the top end, as shown in Fig. 7a). The elongation along the third direction Z at the top surface is linked. In the contribution [7] different element formulations were studied to illustrate the robustness of

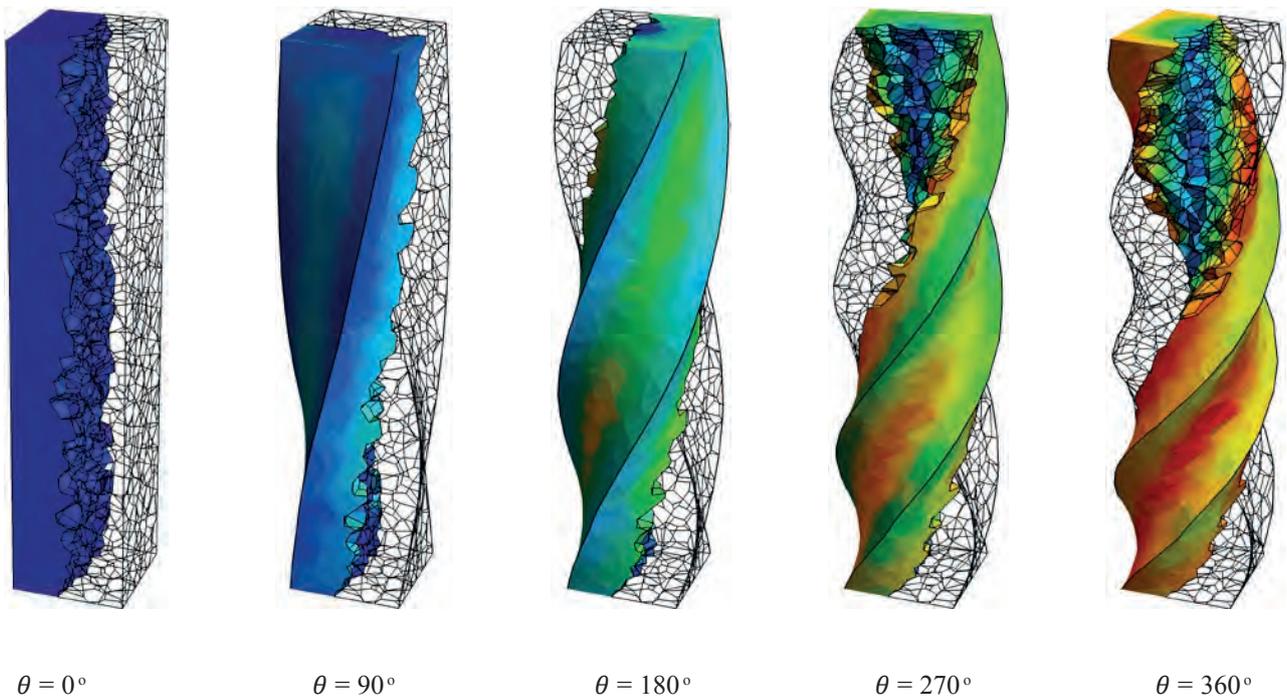


Fig. 8: Torsion test of a square-section bar. Distribution of the equivalent plastic strain for different rotations angles until one cycle $\theta = 360^\circ$ is completed when using a VEM-VO element.

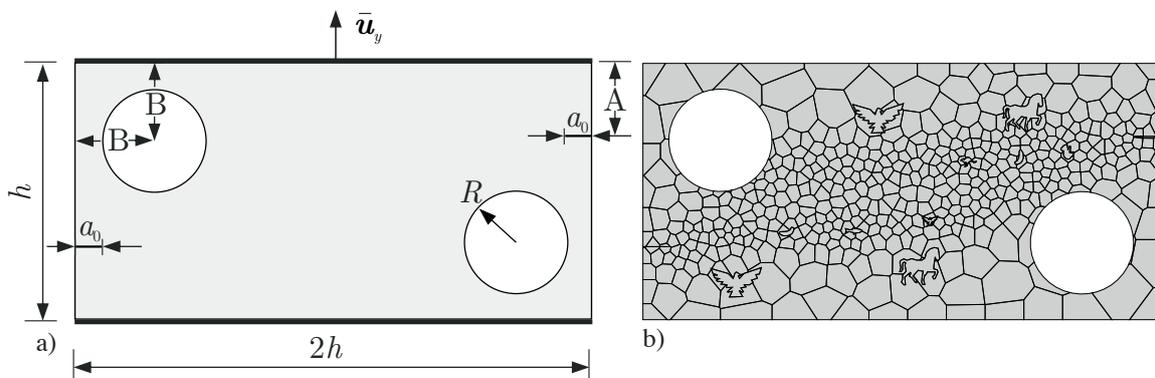
the virtual element method. Here a Voronoi mesh of about $9 \times 9 \times 36$ elements was used which is depicted in Fig. 7 b. Figure 8 demonstrates the distribution of the equivalent plastic strain using VEM-VO for different rotation angles until one cycle $\theta = 360^\circ$ is completed. A cut through the bar was introduced in the contour plots shown in Figure 8 to illustrate the plastic evolution inside the specimen along with the deformed elements.

VEM for crack propagation

The analysis of failure mechanics in brittle and ductile materials play an important role in the safety assessment of various engineering applications. In this regard, several

possibilities exist to model crack propagation problems in solid mechanics.

This work focuses on the virtual element method, developed in [10] and [11]. Due to its flexibility in dealing with complex element shapes and node numbers these can be changed within an element easily during the simulation process. Furthermore, elements can be split in the direction of crack propagation to allow the crack to propagate within the elements by means of VEM. These properties allow to model the crack propagation by evaluating the J -Integral and by computing the stress intensity factors, see [8]. There is a special way how to split the virtual elements by introducing new node. Thus a crack can directly pass through a virtual element which can be observed in Fig. 10. We point out the virtual elements capability by investigating



$h=10 \text{ mm}$ $R=2 \text{ mm}$ $a_0=1 \text{ mm}$ $A=2.85 \text{ mm}$ $B=3 \text{ mm}$ $E=2 \cdot 10^5 \text{ MPa}$ $\bar{u}_y=0.1 \text{ mm}$ $\nu=0.3$

Fig. 9: Tensile test with two notches and holes. Geometry and boundary conditions in a) and VEM-Voronoi mesh with 509 elements in b).

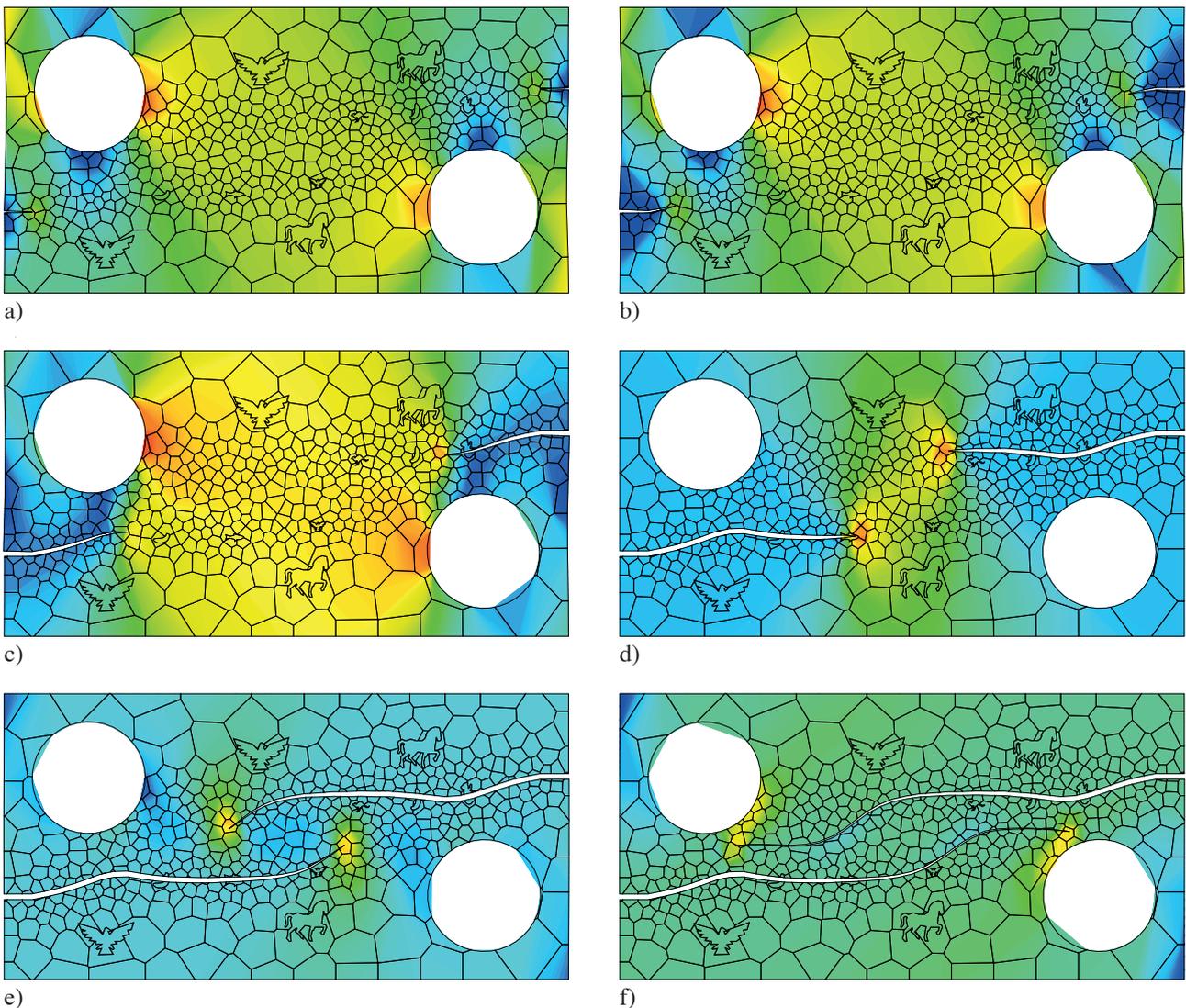


Fig. 10: Tensile test of the notched specimen with two holes. Normal stress σ_{yy} during the crack evolution (a)-(f) using VEM-Voronoi mesh with 509 elements at the beginning with (a).

a tensile test with two notches and holes to illustrate their effect on the crack-initiation and curved-crack-propagation. The geometrical setup and the mesh are depicted in Figure 9. Herein, the virtual element formulation with various animals-shaped Voronoi cells (bird, fish, kangaroo, ...) are employed in the expected fracture zones (i.e. an area of interest). The animal shapes were used to show that the virtual element method can deal with polygons of arbitrary size and non-convex shapes. The material parameters used in the simulation can be found in the reference work [8]. Figure 10 depicts the crack path evolution along with the stress σ_{yy} distribution for different deformation stages. The cracks initiate at the two notches-tip, see Figure 10 a). Thereafter, the left and the right cracks tends to propagate towards the holes as shown in Figure 10 b). Once the cracks passed the holes Figure 10 c), they continue to propagates horizontally till final failure in Figure 10 f), resulting with a mixed-mode fracture. Red and blue colors correspond to the maximum and the minimum tensile stresses, respectively.

By using the cutting techniques in VEM, less elements (about 96 elements) are required to track the crack path accurately during the simulation. Note that the crack trajectory depicted in Figure 10 has even the possibility to change its direction within a virtual element. Due to that, a kinked crack can easily be modeled using the efficient virtual element formulation without any restriction.

Open challenges and future directions

Discretization methods are applied in the design of structures, components and processes. In mechanics this means that models have to be solved for more complex tasks including contact, finite strains, nonlinear material response and multi-physics. There exists not one numerical method which can solve all problems in a robust and efficient way. Instead a wide range of methods exists, like finite elements, finite differences, finite volumes, boundary elements, least square methods, fast Fourier transforms spectral methods

and now also virtual element methods. The application range of virtual element methods has still to be explored for specific applications in nonlinear mechanics. These are related to internal constraints, stability of formulations for finite deformations and others. Some application like non-local damage mechanics and contact have already been successfully explored in [6] and [12] using VEM. Further developments in the range of higher order VEM and multi-physics applications are still under development including nonlinear effects.

References

- [1] Aldakheel, F., Hudobivnik, B., Hussein, A. & Wriggers, P.: Phase-Field Modeling of Brittle Fracture Using an Efficient Virtual Element Scheme, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 341, 443-466, 2018
- [2] Beirao da Veiga, L., Brezzi, F., Cangiani, A., Manzini, G., Marini, L.D. & Russo, A.: Basic principles of virtual element methods, *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 23, 199-214, 2013
- [3] Beirao Da Veiga, L., Brezzi, F. & Marini, L.D.: Virtual Elements for linear elasticity problem, *SIAM Journal on Numerical Analysis* 51(2), 794-812, 2013
- [4] Beirao Da Veiga, L., Lovadina, C. & Mora, D.: A Virtual Element Method for elastic and inelastic problems on polytope meshes, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 295, 327-346, 2015
- [5] Chi, H., Beirao Da Veiga, L. & Paulino, G.H.: Some basic formulations of the virtual element method (VEM) for finite deformations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 318, 148-192, 2017
- [6] De Bellis, M.L., Wriggers, P., Hudobivnik, B. & Zavarise, G.: Virtual element formulation for isotropic damage, *Finite Element Analysis and Design* 144, 38-48, 2018
- [7] Hudobivnik, B., Aldakheel, F. & Wriggers, P.: Low order 3D virtual element formulation for finite elasto-plastic deformations, *Computational Mechanics*, (doi.org/10.1007/s00466-018-1593-6), 2018
- [8] Hussein, A., Aldakheel, F., Hudobivnik, B., Wriggers, P., Guidault, P.-A. & Allix, O.: A Computational framework for brittle crack propagation based on an efficient virtual element method, *Finite Elements in Analysis and Design*, submitted
- [9] Korelc, J. & Wriggers, P.: *Automation of Finite Element Methods*, Springer, Berlin, 2016
- [10] Wriggers, P., Reddy, B.D., Rust, W. & Hudobivnik, B.: Efficient virtual element formulations for compressible and incompressible finite deformations, *Computational Mechanics* 60, 253-268, 2017
- [11] Wriggers, P. & Hudobivnik, B.: A low order virtual element formulation for finite elasto-plastic deformations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 327, 459-477, 2017
- [12] Wriggers, P., Rust, W. & Reddy, B.D.: A virtual element method for contact, *Computational Mechanics* 58, 1039-1050, 2016



Peter Wriggers, Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h.c. mult. Dr.-Ing E.h., is the director of the Institute of Continuum Mechanics at the Leibniz Universität Hannover. Before he had research appointments at UC Berkeley, TU Darmstadt, University of Newcastle, Australia, and a chair in Civil Engineering at Leibniz Universität Hannover. He is member of several Scientific Academies. He was president of GAMM and GACM and acts as Editor-in-Chief for "Computational Mechanics" and "Computational Particle Mechanics". His research interest in solid and contact and interface mechanics led to the development of numerical methods in these areas as well as in fluid-interaction problems using different discretization schemes.



Fadi Aldakheel, Dr.-Ing., is since August 2017 group leader of the section material modelling and damage mechanics at the Institute of Continuum Mechanics at the Leibniz Universität Hannover. He finished his PhD in 2016 at the Universität Stuttgart at the Institute for Mechanics in Civil Engineering. His supervisor was the late Prof. Christian Miehe. He worked as a Postdoc in the group of Jun.-Prof. Marc-André Keip after his PhD exam at the Universität Stuttgart. His research interests are modelling of material behaviour, phase field approaches and the virtual element methods for multi-physics fracture problems.



Blaž Hudobivnik, Dr.-Ing., is since November 2016 Postdoc at Institute of Continuum Mechanics at the Leibniz Universität Hannover. He studied Civil Engineering at the University of Ljubljana and finished his Phd in 2016 under the supervision of Prof. J. Korelc. His research interests are related to developments of the virtual element method and its application to coupled (thermo-hydro-mechanics) in the nonlinear range including inelastic material behaviour. He is expert for the Software-Tool AceGen/AceFEM, which was developed by Prof. Korelc.

GAMM MEMBERS:

Join SIAM
for 30% off and
reduce your GAMM
fees to 65£

There are lots of reasons to JOIN SIAM



More than 14,500 mathematicians, computer scientists, engineers, physicists, and other scientists enjoy the many benefits of belonging to the Society for Industrial and Applied Mathematics. SIAM members are researchers, educators, practitioners, and students from more than 100 countries working in industry, laboratories, government, and academia.

YOU ARE INVITED TO JOIN SIAM AND BE A PART OF OUR INTERNATIONAL AND INTERDISCIPLINARY COMMUNITY.

YOU'LL EXPERIENCE:

- Networking opportunities
- Access to cutting edge research
- Visibility in the applied mathematics and computational science communities
- Career resources

YOU'LL HELP SIAM TO:

- Increase awareness of the importance of applied and industrial mathematics
- Support outreach to students
- Advocate for increased funding for research and education

YOU'LL GET:

- *SIAM News* and *SIAM Review*
- Discounts on SIAM books, journals, and conferences
- Eligibility to join SIAM activity groups
- SIAM Unwrapped (member e-newsletter)
- The ability to nominate two students for free membership
- Eligibility to vote for or become a SIAM leader
- Eligibility to nominate or to be nominated as a SIAM Fellow



“ With name recognition and worldwide visibility, SIAM is the ideal platform for promoting applied mathematics...in academia, industry, government, and sister organizations around the world.... SIAM will continue to play a leading role in fostering collaborations between all users of mathematics, from students to teachers to professional scientists, because of the exceptional quality of its conferences and publications. ”

— René Carmona, Paul M. Wythes '55
Professor of Engineering and Finance, Bendheim Center for Finance, ORFE, Princeton University

JOIN TODAY: www.siam.org/joinsiam

GAMM members who live outside the United States can become members of SIAM at a special reciprocal rate that is 30% less than the regular member rate!



siam[®]
Society for Industrial and Applied Mathematics

3600 Market Street, 6th Floor, Philadelphia, PA 19104-2688 USA
Phone: +1-215-382-9800 · Fax: +1-215-386-7999 · membership@siam.org · www.siam.org

ANDERSON-LOKALISIERUNG IN UNGEORDNETEN QUANTENSYSTEMEN

VON PATRICK HENNING UND DANIEL PETERSEIM

In den 1950er Jahren machte der amerikanische Physiker und spätere Nobelpreisträger Philip W. Anderson eine der weitreichendsten Entdeckungen zur Ausbreitung von Wellen in Quantensystemen. Anderson betrachtete kristalline Festkörper wie beispielsweise Metalle, und untersuchte, wie sich Defekte in der Kristallgitterstruktur auf die Leitfähigkeit auswirken. In einem idealen Kristall sind die Elektronen regelmäßig verteilt, was diesen zu einem ausgezeichneten elektrischen Leiter macht. Gibt es einen oder wenige Defekte, so kommt es zur Streuung von Elektronen an den Defekten, was zunächst keine wesentlichen Auswirkungen auf die Leitfähigkeit hat. Übersteigt die Anzahl zufällig verteilter Defekte (d.h. der Grad der Unordnung im Kristallgitter) aber eine kritische Grenze, so lässt sich eine starke Konzentration der Elektronen an einigen wenigen Stellen im Kristall beobachten. Das erwartete diffusive Verhalten bleibt in diesem Fall aus und ein ursprünglich sehr gut leitender, kristalliner Festkörper wandelt sich abrupt zu einem Isolator ohne elektrische Leitfähigkeit. Zu dieser damals sehr überraschenden und wenig intuitiven Erkenntnis kam Anderson, indem er den quantenmechanischen Wellencharakter von Elektronen ausnutzte. Die Lokalisierung begründete er damit, dass sich die gestreuten Wellen derart auf unterschiedlichen Pfaden im Kristall ausbreiten, dass die Interferenz statistisch gesehen zu einer großflächigen Auslöschung der Wellen führt. Die damit einhergehende Lokalisierung der Wellen entspricht nun gerade einer Lokalisierung der Elektronen. Eine mathematische Rechtfertigung konnte Anderson 1958 [3] für ein vereinfachtes Modell erbringen, welches heute als Anderson *tight-binding model* bekannt ist. Dabei handelt es sich um eine spezielle diskrete Schrödinger-Gleichung, in der Elektronen nur in benachbarte Zellen des Kristallgitters springen können und in dem die Defekte im Gitter durch ein Unordnungspotential beschrieben werden.

Dieses heute nach Anderson benannte Lokalisierungsphänomen ist keineswegs auf Elektronen in einem Kristall beschränkt, sondern stellt vielmehr ein grundlegendes Phänomen der Wellenausbreitung in stark ungeordneten Medien dar. In den vergangenen Jahrzehnten konnte der Effekt unter anderem für akustische und elastische, aber auch elektromagnetische Wellen (und insbesondere

re Licht) beobachtet werden. Ein weiteres Beispiel bildet die Anderson-Lokalisierung in Materiewellen, welche im Zusammenhang mit der Bose-Einstein-Kondensation ein äußerst aktuelles und aktives Forschungsgebiet der modernen Quantenphysik darstellt.

Längst sind aber nicht alle Aspekte des *Anderson'schen Lokalisierungsphänomens* verstanden. Zahlreiche Fragen sind noch immer Gegenstand aktueller Forschung, insbesondere auch in der Mathematik. Wegen des weitreichenden Interesses an diesem Effekt möchten wir in diesem Artikel den zugrunde liegenden mathematischen Mechanismus mit einfachen Mitteln der Numerischen Analysis veranschaulichen. Für diesen Zweck eignet sich die kontinuierliche Schrödinger-Gleichung als Modellproblem. Selbstredend bedingt diese Wahl, dass andere Modellprobleme und deren spezifische Eigenschaften ausgeklammert werden. Es sei zum Beispiel erwähnt, dass Anderson-Lokalisierung auch in mathematisch motivierten Fragestellungen wie der Theorie der Zufallsmatrizen eine große Rolle spielt. Hierfür sei exemplarisch auf [6] verwiesen.

Anderson-Lokalisierung von Schrödinger-Eigenfunktionen

Als Modell für eine mathematische Diskussion der Anderson-Lokalisierung betrachten wir das lineare Schrödinger-Eigenwertproblem. Dieses beschreibt den stationären Quantenzustand (Wahrscheinlichkeitsverteilung) eines einzelnen Teilchens, welches in einem Potential V gefangen ist. Wir entfernen uns also fortan von Anderson's ursprünglicher Anwendung. Es bezeichne $Hu = -\Delta u + Vu$ den Schrödinger-Operator mit dem d -dimensionalen Laplace-Operator Δ und einem reelwertigen nichtnegativen Potential V . Dann suchen wir normierte Eigenfunktionen u und zugehörige positive Eigenwerte λ , sodass

$$Hu = \lambda u \quad (1)$$

gilt. Die Dichte $|u|^2$ beschreibt die erwartete Wahrscheinlichkeitsverteilung. Wir betrachten das Eigenwertproblem

im Folgenden entweder im Ganzraum \mathbb{R}^d oder im d -dimensionalen Einheitswürfel zusammen mit periodischen Randbedingungen. In diesem Modell entspricht die Anderson-Lokalisierung einem exponentiellen Abfall (gegen Null) der Eigenfunktionen am unteren Ende des Spektrums des Schrödinger-Operators, welches niedrige Energieniveaus repräsentiert. Beispiele solcher exponentiell abklingender Eigenfunktionen (für $d=2$) sind in Abbildung 1 dargestellt. Ein solcher Abfall kann auf beschränkten Gebieten nur

dann beobachtet werden, wenn das Potential V hinreichend ungeordnet und genügend stark ist. Zur Illustration betrachten wir zunächst den eindimensionalen Fall ($d=1$) mit einem stückweise konstanten Potential im Einheitsintervall, das auf einem regelmäßigen Gitter der Weite ϵ zwischen den beiden Werten $\alpha = 1$ und $\beta = 1/\epsilon^2$ oszilliert. Wir unterscheiden zwei unterschiedliche Typen von Oszillation: eine 2ϵ -periodische Oszillation, bei der sich α und β stets abwechseln und eine zufällige Oszillation, bei der

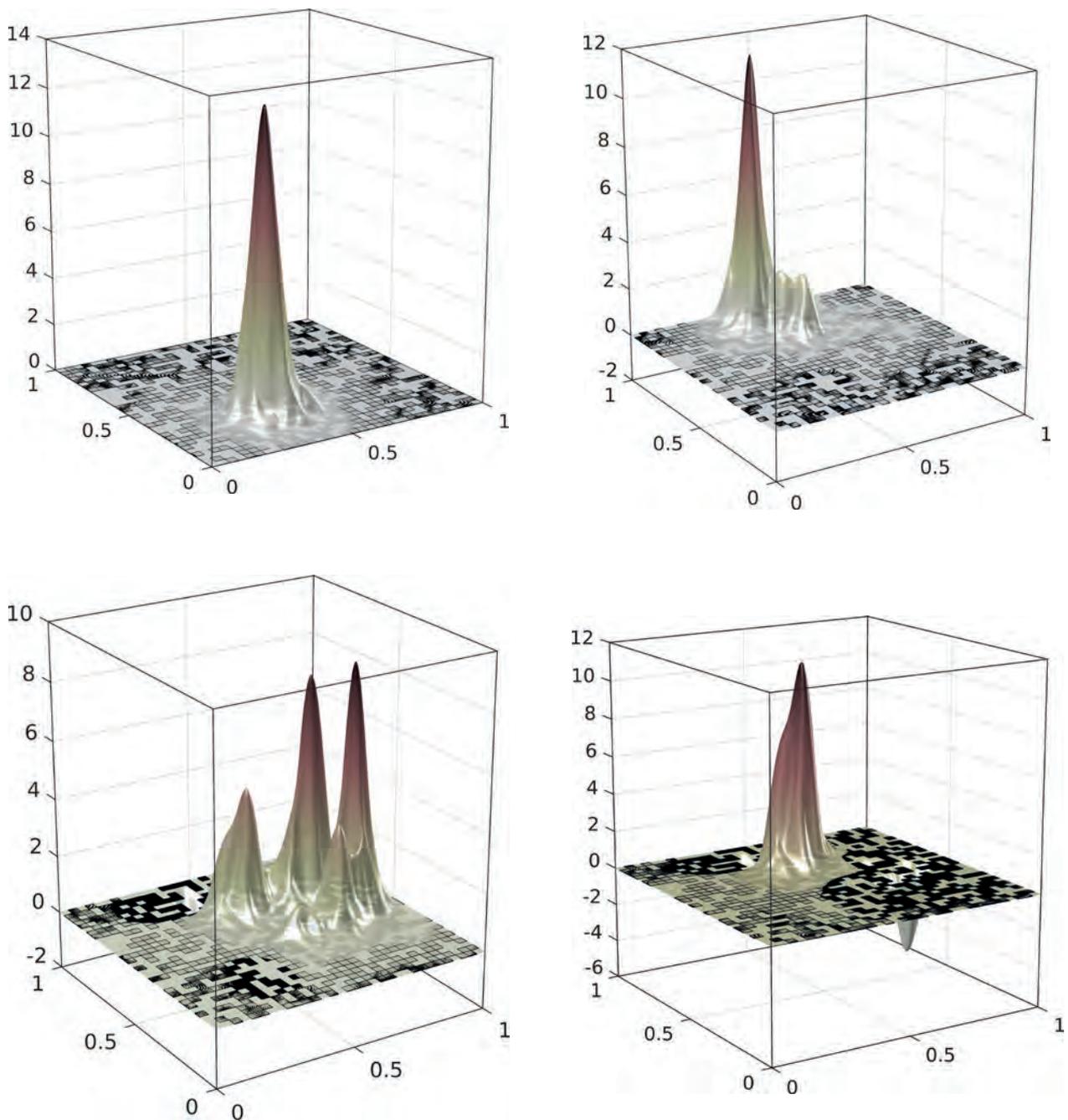


Abb. 1: Schrödinger-Eigenfunktionen im Unordnungspotential in zwei Raumdimensionen zu den vier kleinsten Eigenwerten, absteigend von oben links nach unten rechts. Das Unordnungspotential ist das Ergebnis unabhängiger Münzwürfe in den Zellen eines Kartesischen Gitters der Weite $\epsilon = 1/32$. Schwarze Felder entsprechen einem Potentialwert $\beta = 1/\epsilon^2$. Weiße Felder repräsentieren Potentialwerte $\alpha = 1$;

wir in jeder Zelle des Gitters unabhängig per Münzwurf zwischen α und β entscheiden. Wir betrachten zunächst den periodischen Fall. Wie in Abbildung 2 zu sehen ist, haben die ersten vier Eigenfunktionen jeweils einen globalen Träger. Das oszillierende Potential erzeugt zwar eine hochfrequente Oszillation, die die übliche niederfrequente Oszillation der Eigenfunktionen überlagert. Das Potential ist in diesem Skalierungsregime aber nicht stark genug, um ein schnelles Abklingen zu erzeugen oder die Eigenfunktionen zumindest an den Potentialmaxima annähernd zum Verschwinden zu zwingen. Gleiches gilt auch für weitere Eigenfunktionen im Spektrum. Im Gegensatz dazu beobachtet man für ein Unordnungspotential (siehe Abbildung 2) der gleichen maximalen Stärke, dass die Eigenfunktionen am unteren Ende des Spektrums exponentiell schnell gegen Null abfallen, was gerade der Anderson-Lokalisierung entspricht. Dazu sei bemerkt, dass Anderson-Lokalisierung nicht zwangsläufig bedeutet, dass sich stets nur ein einzelner „Peak“ ausbildet und die Eigenfunktion außerhalb dieses Peaks gegen Null abfällt. Im Allgemeinen können mehrere lokalisierte und räumlich getrennte Peaks koexistieren.

Die Stärke des Potentials relativ zur mittleren Frequenz des Potentials spielt für die Beobachtung der Anderson-Lokalisierung eine entscheidende Rolle, da es die exponentielle Abfallrate maßgeblich bestimmt. Für die obige Parameterwahl ist die Abfallrate proportional zu $1/\epsilon$. Bevor wir diesen quantitativen Abfall näher beschreiben, werden wir im nächsten Abschnitt zunächst sehen, dass es auch in schwächeren, hinreichend ungeordneten Potentialen exponentiellen Abfall geben kann. Dieser fällt aber langsamer aus und ist für festes ϵ auf endlichen Gebieten dann gegebenenfalls nicht mehr beobachtbar.

Asymptotische Lokalisierung im Ganzraum

Betrachten wir das Schrödinger-Eigenwertproblem (1) für einen Moment im Ganzraum \mathbb{R}^d und stellen die Frage unter welchen Annahmen an das Potential V eine exponentielle Lokalisierung zu erwarten ist. In diesem speziellen Szenario verstehen wir unter Lokalisierung einen exponentiell schnellen, asymptotischen Abfall von $u(x)$ gegen Null, wenn man sich nur hinreichend weit vom Koordinatenursprung entfernt, d.h. für $|x| \rightarrow \infty$. An dieser Stelle sei daher daran erinnert, dass die Energie einer (L^2 -normierten) Welle u gerade durch den zugehörigen Eigenwert λ gegeben ist. Die obige Kopplung von Anderson-Lokalisierung an den unteren Teil des Spektrums von H (siehe auch Abbildung 2) bedeutet daher nichts anderes, als dass sich das Phänomen auf Wellen niedriger Energie beschränkt.

Als erstes diskutieren wir den Fall eines allgemeinen, glatten Potentials, welches nicht zwangsläufig ungeordnet ist. In diesem Fall lässt sich klassische mathematische Agmon-Theorie [1] anwenden. Wenn die Energie λ der Eigenfunktion u in großen Distanzen vom Koordinatenursprung gegenüber dem Potential vernachlässigbar ist, d.h. $\lambda < V(x)$, dann lässt sich zeigen, dass die Eigenfunktion in diesen Regionen exponentiell schnell gegen Null abfallen muss (siehe auch [15]). Physikalisch anschaulich garan-

tiert die Bedingung $\lambda < V(x)$, dass die Energie des Teilchens (repräsentiert durch die Wellenfunktion u) nicht groß genug ist, um ins Unendliche zu entfliehen. Wir verzichten auf mathematische Details, möchten aber erwähnen, dass die Geschwindigkeit des Abfalls in einer sogenannten Agmon-Metrik quantifiziert werden kann und von V und λ abhängt. Insbesondere lässt sich daraus hinreichend weit weg vom Ursprung eine isotrope exponentielle Abfallrate ableiten (siehe auch [1,7,14,22]).

Etwas überraschend ist nun, dass man derlei asymptotische Lokalisierungsergebnisse in ungeordneten Potentialen auch ohne Bedingungen an die Stärke des Potentials erzielen kann. Solche Fragen wurden bereits in den 70er Jahren mathematisch beleuchtet. Seither sind wesentliche Einsichten gewonnen worden, welche Andersons Beobachtungen auch für den Fall der kontinuierlichen Schrödinger-Gleichung bestätigen. Ein Großteil dieser Resultate ist von stochastischer Natur und wurde unter statistischen Annahmen an Potentiale mit Zufallswerten bewiesen. Die ersten rigorosen Beweise zur Lokalisierung der Eigenfunktionen von kontinuierlichen Schrödinger-Operatoren mit Unordnungspotential gehen auf die Arbeiten von Ilya Goldsheid, Stanislav Molchanov und Leonid Pastur 1976/77 zurück [11,12]. Für den eindimensionalen Fall betrachteten die Autoren eine bestimmte Klasse positiver Zufallspotentiale, die durch reguläre Markov-Prozesse erzeugt werden. Für diese Klasse konnten sie zeigen, dass alle Eigenfunktionen im Spektrum des Schrödinger-Operators exponentiell lokalisiert sind und eine Orthonormalbasis des $L^2(\mathbb{R})$ bilden. Unabhängig von der Stärke des Potentials wird also die Existenz exponentiell schnell abfallender Eigenzustände garantiert. Wie so oft ist aber auch hier der Fall $d=1$ nicht repräsentativ für höhere Dimensionen, zumindest solange man beschränkte Potentiale betrachtet. Im allgemeinen Fall $d > 1$ ist die Lokalisierung der Eigenfunktionen für alle genügend großen Energien nicht länger beobachtbar (siehe auch [6]). Für verschiedene Potentialklassen gibt es aber zumindest immer ein Intervall am unteren Ende des Spektrums, in dem Lokalisierung garantiert werden kann. Unter den zahlreichen mathematischen Resultaten zur Anderson-Lokalisierung im Ganzraum (siehe [5,10,13,16,17,18] um nur einige zu nennen) für den physikalisch relevanten Fall $d > 1$ und spezielle Klassen von Potentialen möchten wir jenes von François Germinet und Abel Klein [9] hervorheben. Hier werden periodische Potentiale mit einer additiven Zufallsstörung betrachtet, d.h. die Potentiale sind von der Form $V = V_p + V_\omega$, wobei V_p den (deterministischen) periodischen Anteil bezeichnet und $V_\omega(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \omega_k w(x-k)$ die stochastische Störung (vom sogenannten „Alloy-Typ“). Hierbei bilden die $\{\omega_k\}$ eine spezielle Familie von nicht-degenerierten, unabhängigen, gleichverteilten Zufallsvariablen mit beschränktem Träger. Die als „Single-site“ Potential bezeichnete beschränkte Funktion w definiert die Form der Störung und besitzt ebenfalls einen kompakten Träger. Unter diesen und wenigen weiteren strukturellen Annahmen lässt sich nun zeigen, dass die ersten niedrigsten Eigenwerte endliche Vielfachheit haben und die zugehörigen Eigenfunktionen im Sinne von Anderson exponentiell lokalisieren. Dieses Resultat beruht auf der Annahme, dass die Zufallsvariablen

nicht degenerieren. So wird gewährleistet, dass auch in Rechengebieten unendlicher Ausdehnung die periodische Struktur des Potentials sicher (mit Wahrscheinlichkeit 1) immer wieder gestört wird. Diese wiederkehrende Störung garantiert wiederum eine endliche Vielfachheit der Eigenwerte und damit relevante Lücken im Spektrum, wie man sie auch in unserer einführenden eindimensionalen Illustration beobachten kann (siehe Abb. 3). Später werden wir den logischen Zusammenhang zwischen der Existenz derartiger spektraler Lücken und dem Phänomen der Anderson-Lokalisierung noch etwas deutlicher herausarbeiten. Bis hierher stellen wir fest, dass Teilchen nicht nur durch genügend hohe „Potentialwände“ gefangen werden können, sondern prinzipiell auch durch hinreichende Unordnung im System. Letzterer Mechanismus wirkt aber nur asymptotisch, also im Ganzraum, da die Welle dann selbst bei schwachen Unordnungspotentialen „unendlich viel Zeit“ hat, um abzuklingen. Die Vorhersage von Anderson-Lokalisierung in beschränkten Gebieten, der Lage und der Anzahl der Peaks, welche die Lokalisierungszentren bilden, sowie eine Quantifizierung der Abfallgeschwindigkeit in Abhängigkeit charakteristischer Parameter des Potentials V ist mit derlei asymptotischer Analysis aber kaum zu leisten. Um in dieser Hinsicht Abhilfe zu schaffen, werden wir diese Fragen in den nächsten Abschnitten aus der Perspektive der Numerischen Analysis in drei Schritten detaillierter beleuchten. Zunächst werden wir das quantitative Abfallverhalten der Green'schen Funktion des Schrödinger-Operators in Abhängigkeit geometrischer Parameter des Potentials mittels der Theorie iterativer Löser für lineare Gleichungen studieren. Darauf aufbauend lässt sich zeigen, dass sich das Abfallverhalten auf die Basis eines N -dimensionalen Unterraums überträgt, der die erste Eigenfunktion enthält. Der Parameter N erlaubt schließlich Aussagen über Anderson-Lokalisierung, denn wenn die Dimension N des Unterraums klein genug ist, so impliziert dies Lokalisierung. Praktisch hängt N von der Größe des ersten Eigenwertclusters ab und ist damit typischerweise umso kleiner, je ungeordneter das Potential ist.

Gebietszerlegung und die exponentielle Lokalisierung der Green'schen Funktionen

Um das Phänomen der Anderson-Lokalisierung besser zu veranschaulichen und zu quantifizieren, untersuchen wir zunächst das Verhalten der Green'schen Funktion des linearen Schrödinger-Operators. Während die zum Laplace-Operator gehörende Green'sche Funktion lediglich einen (vergleichsweise langsamen) algebraischen Abfall hat, kann ein zusätzlicher Potentialterm den Abfall exponentiell schnell beschleunigen. Geht man beispielsweise von einem konstanten Potential V aus, so ist der Abfall exponentiell, wenn man in der Distanzeinheit $1/\sqrt{V}$ misst, sprich von der Form $\exp(-k)$ wenn man sich in k Schritten der Größenordnung $1/\sqrt{V}$ vom Ort des Nadelimpulses entfernt. Dieses Resultat lässt sich beispielsweise bei der numerischen Simulation von Evolutionsgleichungen mit impliziter Zeitdiskretisierung beobachten. Für hinreichend kleine Zeitschrittweite ist die in jedem Zeitschritt zu invertierende

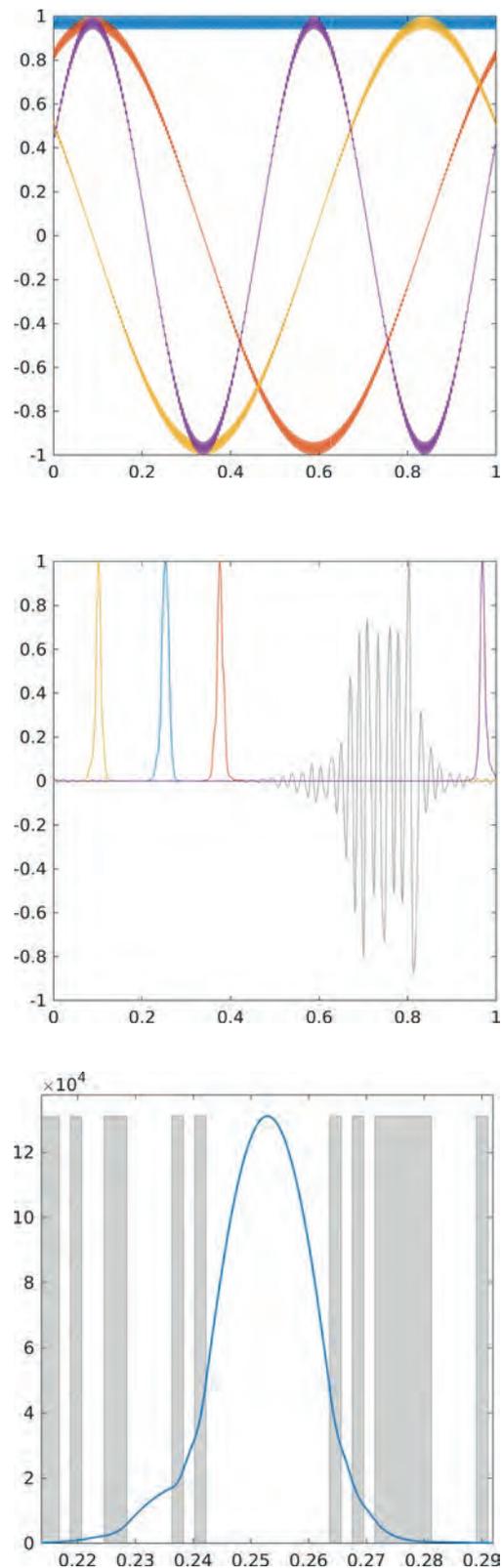


Abb. 2: Schrödinger-Eigenfunktionen in einer Raumdimension. (Oben) Eigenfunktionen zu den vier kleinsten Eigenwerten im periodischen Potential (Parameter: $\epsilon=2^{-9}$, $\alpha=1$, $\beta=2^{17}$). (Mitte) Eigenfunktionen zu den vier kleinsten Eigenwerten (farbig) und zum Eigenwert 91 (grau) im zufälligen Münzwurf-Potential (gleiche Parameter wie im periodischen Fall). (Unten) Detailansicht der ersten Eigenfunktion (andere Skalierung) im grau dargestellten Münzwurf-Potential.

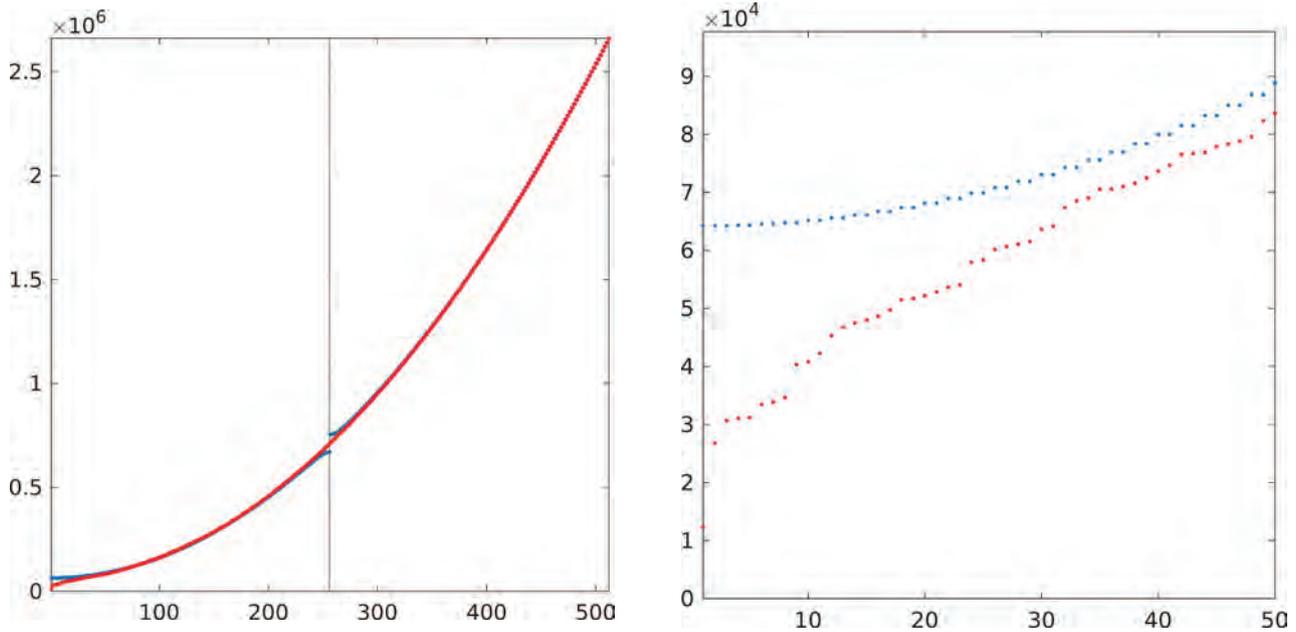


Abb. 3: Schrödinger-Eigenwerte in einer Raumdimension für periodisches Potential (blau) und Unordnungspotential (rot). Parameter: $\epsilon=2^{-9}$, $\alpha=1$, $\beta=2^{17}$. (Links) Eigenwerte 1 bis $512=1/\epsilon$. (Rechts) Eigenwerte 1 bis 50.

Systemmatrix so gut konditioniert, dass sie sich mit iterativen Lösern ohne Vorkonditionierung in wenigen Schritten invertieren lässt.

Interessant ist, dass sich der exponentielle Abfall der Green'schen Funktion auch auf oszillierende Potentiale übertragen lässt, wenn man nur sicherstellt, dass die Bereiche, in denen hohe Potentialwerte angenommen werden, hinreichend häufig und gleichmäßig im Rechengebiet verteilt sind [2]. Zur präziseren Erklärung dieses Zusammenhangs schränken wir uns auf die Schrödinger-Gleichung im d -dimensionalen Einheitswürfel mit periodischen Randwerten ein und betrachten eine Verallgemeinerung des Unordnungspotentials aus unserer eindimensionalen Illustration. Wir nehmen also an, dass dem Potential eine regelmäßige Gitterstruktur mit Gitterweite $\epsilon \ll 1$ zugrunde liegt, wobei jedem Feld dieses Gitters unabhängig und mit gleicher Wahrscheinlichkeit entweder der Wert α oder der Wert β zugeordnet wird, hierbei ist $0 < \alpha \leq 1/\epsilon^2 \leq c\beta$ für eine generische Konstante c der Ordnung 1. Betrachtet man nun die zugehörige Green'sche Funktion, so lässt sich zeigen, dass der Abfall (ähnlich wie im Fall konstanter Potentiale) exponentiell in der Distanzeinheit ϵ ist. Diese Beobachtung erlaubt es nun die Wirkung des inversen Schrödinger-Operators, welcher global ist, durch einen lokalen Operator zu approximieren. Dieser lokale Operator setzt sich aus mehreren Teiloperatoren zusammen, die jeweils auf einem kleinen Gebiet mit Durchmesser der Ordnung ϵ operieren. Mit anderen Worten, man er-

setzt die Inverse durch wenige Schritte eines linearen iterativen Löserns mit additivem Schwarz-Vorkonditionierer für eine überlappende Gebietszerlegung auf der Skala ϵ . Die Optimalität des Vorkonditionierers gewährleistet schnelle Konvergenz, sodass wenige Iterationsschritte ausreichen, die den Träger einer Argumentfunktion (etwas eines Nadelimpulses) nur um wenige ϵ -Schichten abhängig von der gewünschten Genauigkeit vergrößern. Mit dieser Argumentation lässt sich der exponentielle Abfall sehr präzise quantifizieren. Die Idee hierfür ist der numerischen Homogenisierung entlehnt [20,19], wo eine solche Argumentation einen neuen eleganten Beweis für den exponentiellen Abfall sogenannter numerischer Korrektoren liefert und damit numerische Homogenisierungsmethoden jenseits von Periodizität und Skalenseparation rechtfertigt [21].

Inverse Iteration und abstrakte Lokalisierung von Eigenfunktionen

Nun implizieren Abfall-Eigenschaften der Green'schen Funktion keineswegs Abfall-Eigenschaften von Eigenfunktion, wovon man sich im Fall eines konstanten Potentials leicht überzeugt oder wie man im Fall eines periodischen Potentials in Abbildung 2 sofort sieht. Die Unordnung muss also eine entscheidende Rolle spielen. Um das zu verstehen, bleiben wir unserer Argumentationslinie aus dem vorherigen Abschnitt treu und be-

trachten die klassische Inverse Iteration zur Berechnung von Eigenfunktionen. Diese lautet (in idealisierter Form) $v^{(k+1)} = \lambda_1 H^{-1} v^{(k)}$ (mit $k=0,1,2,\dots$). Wenn der Startwert $v^{(0)}$ nicht orthogonal auf der ersten Eigenfunktion u_1 steht, konvergiert die Iteration mindestens mit der Konvergenzrate λ_1/λ_2 gegen ein Vielfaches von u_1 , d.h. es gilt (modulo einer möglichen Normierung) $\|v^{(k)} - u_1\| \leq c (\lambda_1/\lambda_2)^k \|v^{(0)}\|$, wobei $\|\bullet\|$ die von H induzierte Energienorm bezeichnet. Die Anzahl der notwendigen Iterationen, um eine Toleranz tol zu erreichen beträgt somit etwa $k \leq c \log(\lambda_1/\lambda_2)^{-1} \log(tol)$ und hängt damit grundlegend von der Größe der Spektrallücke zwischen λ_1 und λ_2 ab. Ist diese Lücke moderat (z.B. $\lambda_1/\lambda_2 = 1/2$), dann lässt sie sich als Vorfaktor vernachlässigen und die Inverse Iteration konvergiert exponentiell schnell in k . Ersetzt man nun den inversen Operator H^{-1} durch die ϵ -lokale Approximation, wie wir sie schon bei der Green'schen Funktion verwendet haben und wählt man gleichzeitig eine ϵ -lokale Startfunktion $v^{(0)}$, so vergrößert sich der Träger von $v^{(k)}$ in jeder Iteration lediglich um wenige ϵ -Schichten und nach k Iterationen hat er einen Durchmesser der Ordnung ke . Kombiniert man diese Beobachtung mit der exponentiellen Konvergenz bezüglich k , so zeigt sich, dass sich die erste Eigenfunktion durch eine lokalisierte Funktion $v^{(k)}$ approximieren lässt. Hierbei gilt: für eine Approximation mit der Genauigkeit tol ist lediglich eine lokale Funktion auf einem Teilgebiet mit Ausdehnung $|\log(tol)/\epsilon|$ nötig. Dies würde gerade Lokalisierung und exponentiellen Abfall im Sinne von Anderson implizieren. Ein Blick auf die Spektralplots zum eindimensionalen Fall in Abbildung 3 verrät, dass die erste Spektrallücke im periodischen Fall (und auch im konstanten Fall) sehr klein ist, d.h. $\lambda_1/\lambda_2 \approx 1 - \epsilon^2$, da dort das Spektrum des Laplace-Operators im wesentlichen um $1/\epsilon^2$ verschoben ist. Damit bricht die vorangegangene Argumentation zusammen und stellt keinen Widerspruch zu den globalen Eigenfunktionen aus Abbildung 2 dar. Im zufälligen Potential sieht es hingegen etwas anders aus. Hier beobachten wir für unser Sample eine signifikante Lücke und das vorangegangene Iterationsargument beweist Anderson-Lokalisierung. Im Allgemeinen gibt es natürlich keine Garantie dafür, dass es nach dem ersten Eigenwert bereits eine signifikante Lücke gibt. Die Argumentation lässt sich jedoch leicht auf eine Block Inverse Iteration übertragen. Hierbei startet man von einem N -dimensionalen Unterraum $V^{(0)}$ bestehend aus ϵ -lokalen Funktionen, wendet die Inverse Iteration wie oben simultan in Blöcken an und erhält so einen Algorithmus, welcher nun mit der Geschwindigkeit λ_1/λ_N gegen u_1 konvergiert. Dabei muss N so groß gewählt werden, dass sie Spektrallücke λ_1/λ_N eine relevante Größe erreicht. Ist dies gesichert, so liefert die obige Argumentation, dass die erste Eigenfunktion durch die Vereinigung N vieler lokaler Funktionen beliebig genau approximiert werden kann, wobei die lokalen Funktionen jeweils exponentiell in Distanzen von ϵ gegen Null abklingen.

Eigenwertcluster und Anderson-Lokalisierung

Die vorangegangene Diskussion zeigt, dass wir für kleines N (und nur dann) Anderson-Lokalisierung nachweisen können. Wird N zu groß, so formt die Vereinigung aller lokaler Funktionen wieder eine globale Struktur. Dies ist präzise der Fall, dem man für perfekt-periodische Potentiale begegnet. Hier lässt sich zeigen, dass eine relevante Lücke erst nach $N=O(\epsilon^{-d})$ zu erwarten ist. Da die Vereinigung von ϵ^{-d} -vielen ϵ -lokalen Funktionen typischerweise das gesamte Gebiet füllt, ist die Lokalisierung hin-fällig. Das Bild ändert sich grundlegend für Unordnungspotentiale. Hier kann man für verschiedene Klassen von Potentialen das Spektrum analysieren und a priori zeigen, dass eine relevante Spektrallücke bereits nach wenigen Eigenwerten zu erwarten ist. Dies wiederum beweist die Anderson-Lokalisierung. In [2] wurden obere und untere Schranken für die Eigenwerte verschiedener Potentialklassen bewiesen. Im wesentlichen studiert man hierfür Poisson-Eigenwertprobleme in den Potentialtälern und stellt damit einen Zusammenhang zwischen geometrischen Parametern des Potentials (Durchmesser von Potentialtälern) und dem Spektrum her.

Im eindimensionalen periodischen Beispiel lässt sich mit dieser Technik die Spektrallücke nach $1/(2\epsilon)$ Eigenwerten (exakt die Anzahl der Potentialtäler, die alle identisch sind) vorhersagen. Im Fall eines Münzwurf-Potentials, lassen sich die kleinsten Eigenwerte relativ präzise den größten Potentialtälern zuordnen. Die Eigenwerte sind dabei invers proportional zum Quadrat der Durchmesser der Täler. Das Argument trägt, da im Falle des Münzwurfs nur Vielfache von ϵ als mögliche Durchmesser in Frage kommen und wir (mit hoher Wahrscheinlichkeit) nur sehr wenige größte Täler (mit Durchmesser der Größenordnung $|\epsilon \log(\epsilon)|$) erwarten und das für unser Sample auch tatsächlich beobachten. All dies lässt sich mit einigem technischen Aufwand auf bestimmte Klassen mehrdimensionaler Potentiale verallgemeinern. So konnte in [2] sowohl für Potentiale mit einer zufälligen Tensorprodukt-Struktur, als auch für Potentiale mit einer randomisierten Dominostruktur gezeigt werden, dass das Spektrum des zugehörigen Schrödinger-Operators eine hinreichend große Lücke nach den ersten $N=O(1)$ Eigenwerten besitzt. Durch Skalierung sehen wir, dass auf dem Ganzraum jede Wahl von $\epsilon > 0$ zulässig ist und dass damit erwartungsgemäß die maximale Stärke des Potentials keine Rolle mehr spielt.

Zusammenfassend können wir die folgende wesentliche Beobachtung festhalten. Die Anderson-Lokalisierung hängt grundlegend damit zusammen nach wie vielen Eigenwerten eine signifikante Lücke im Spektrum des Schrödinger-Operators auftaucht. Gibt es eine solche Lücke nach N Eigenwerten, so überträgt sich der exponentielle Abfall der Green'schen Funktion auf einen N -dimensionalen Unterraum, der die erste Eigenfunktion enthält. Um daraus zu folgern, dass die Eigenfunktion auch

selbst exponentiell lokalisiert ist, muss N klein sein (d.h. von der Ordnung 7). Für strukturierte Potentiale begegnet man typischerweise großen Eigenwertclustern, sodass N impraktikabel groß wird. In Unordnungspotentialen lassen sich im Allgemeinen aber große Lücken am unteren Ende des Spektrums vorhersagen. Dies führt zu einem kleinen Wert für N und impliziert entsprechend eine exponentielle Lokalisierung mit maximal N Zentren im Sinne von Anderson. Diese Beobachtung gibt auch eine mathematische Begründung für die Rolle der Unordnung beim Phänomen der Anderson-Lokalisierung. Es ist dabei aber nicht zwangsläufig notwendig, dass man sich dem Zufall unterwirft. Eine Störung der periodischen Struktur (zum Beispiel das Entfernen einer Hand voll Potentialpeaks) kann genügen um lokalisierte Eigenfunktionen zu erzeugen.

Landschaftsfunktionen und a posteriori Quantifizierung

Im letzten Abschnitt wollen wir diskutieren, ob es möglich ist die einzelnen Lokalisierungsregionen einer Anderson-lokalisierten Eigenfunktion in irgendeiner Art zu quantifizieren. Typischerweise lässt sich aus einem Blick auf das Potential nicht schließen in welchen Teilgebieten es zur erwarteten Lokalisierung kommt. Jedoch machten Marcel Filoche und Svitlana Mayboroda 2012 [8] eine interessante Entdeckung, in dem sie die Anderson-Lokalisierung mit einer sogenannten Landschaftsfunktion (landscape function) verknüpfen konnten. Die Landschaftsfunktion ψ zu einem gegebenen Schrödinger-Operator H auf einem beschränkten Gebiet $D \subset \mathbb{R}^d$ ist definiert als Lösung der homogenen elliptischen Differentialgleichung $H\psi=1$ mit Nullrandwerten. Filoche und Mayboroda konnten nun zeigen, dass eine gegebene normierte Eigenfunktion u mit Eigenwert (bzw. Energie) λ eine punktweise Ungleichung der Form $|u(x)| \leq \lambda \psi(x) \max|u|$ erfüllt. Aus der Abschätzung lässt sich folgern, dass in Regionen in denen die Landschaftsfunktion klein im Vergleich zur Energie λ ist, der Absolutbetrag der Eigenfunktion nahe bei Null liegen muss. Lokalisierungszentren sind dagegen dort zu erwarten wo $\lambda \psi(x)$ dicht bei 1 liegt. Diese a posteriori Strategie liefert überraschend genaue Vorhersagen. Die Beobachtung, dass ψ das Ergebnis eines Schrittes der Inversen Iteration mit konstantem Startvektor ist, lässt das auch plausibel erscheinen. Eine Erklärung konnte 2016 von Filoche et al. [4] geliefert werden, als sie feststellten, dass das ursprüngliche Schrödinger-Eigenwertproblem in ein modifiziertes Eigenwertproblem transformiert werden kann, in dem ein Potential der Form $1/\psi$ dominiert. Dies erklärt warum u genau dann klein wird, wenn die Landschaftsfunktion klein wird (und entsprechend das effektive Potential $1/\psi$ groß). Im Setting des transformierten Problems ist es nun außerdem wieder möglich Agmon-Theorie [1] anzuwenden um so die Abfallraten zu quantifizieren. Ähnlich wie im asymptotischen Fall (für beliebige Potentiale) lässt sich beweisen, dass die Abfallgeschwindigkeit vom Potential $1/\psi$ und der Energie λ abhängt. Genauer gesagt, $|u(x)|$ zeigt ausgehend von den Lokalisierungszentren einen exponentiellen Abfall, wobei die Abfallgeschwindigkeit von

$\max\{\sqrt{1/\psi - \lambda}, 0\}$ abhängt. Für glatte Potentiale konnte in einer Arbeit von Stefan Steinerberger 2017 [23] dieser Abfall weiter präzisiert werden.

Die Theorie der Landschaftsfunktionen und deren Interpretation als Eigenwertproblem mit effektivem Potential $1/\psi$ stellt somit eine interessante Verbindung zwischen Anderson-Lokalisierung und der klassischen Lokalisierung durch genügend starke Potentiale her. Im Vergleich zu den zuvor diskutierten quantitativen a priori Ergebnissen liefert dieser Ansatz jedoch a posteriori Resultate, da es zuvor die Berechnung der Landschaftsfunktion sowie die Bestimmung der Energieniveaus (Eigenwerte) benötigt. Ohne diese Größen ist es nicht möglich zu entscheiden, wann $1/\psi - \lambda$ strikt positiv wird und entsprechend ob die Abfallgeschwindigkeit nicht gegen Null degeneriert, was nur die triviale Ungleichung $|u(x)| \leq \max|u|$ implizieren würde. Landschaftsfunktionen können daher praktisch für die effektive Berechnung von Anderson-Zuständen eingesetzt werden, sowie für eine empirische Identifikation der einzelnen Lokalisierungszentren. Zugehörige Algorithmen und eine Vertiefung des Ansatzes sind zum Beispiel in [23] zu finden.

Ausblick

Das Phänomen der Anderson-Lokalisierung ist ein höchst interessantes Forschungsthema an der Schnittstelle von (Quanten-)physik, mathematischer Modellierung und Analysis, sowie Numerischer Analysis und Simulation. Auch jenseits der physikalischen (und mathematischen) Grundlagenforschung findet Anderson-Lokalisierung praktische Anwendung, beispielsweise beim Design von optimalen Lichtwellenleitern (optical fibers), wie sie durch nichtlineare Schrödinger-Gleichungen modelliert werden können. Eine effiziente numerische Simulation des Phänomens ist somit auch von praktischer Bedeutung. Neben möglichen zusätzlichen Nichtlinearitäten im Eigenwertproblem sorgen die meistens sehr kleinen Spektrallücken und die großen Eigenwertcluster (und die daraus resultierenden degenerierten Konvergenzraten iterativer Löser) dafür, dass eine praktische Berechnung zu einer ernsthaften Herausforderung werden kann. Die Entwicklung neuer, zuverlässiger und effizienter Lösungsverfahren auf der Basis der hier vorgestellten analytischen Erkenntnisse ist daher von großem Interesse.

Sowohl hinsichtlich des mathematischen Verständnisses, als auch der Simulation von Wellenausbreitungsphänomenen in ungeordneten Medien gibt es unzählige weitere spannende Fragestellungen von ähnlicher (mathematischer) Natur. Exemplarisch sind hier quantenmechanische Phasenübergänge in ultrakalten bosonischen Gasen zu nennen, etwa der Übergang von Suprafluiden zu Anderson- oder Mott-Isolatoren (Mott-Lokalisierung). Innovative numerische Diskretisierungs- und Lösungsverfahren könnten hier durch Simulation, aber auch wie oben als Werkzeug mathematischer Analysis den Erkenntnisgewinn vorantreiben, vielleicht sogar die Vorhersage und Kontrolle neuartiger physikalischer Phänomene ermöglichen.

Literatur

- [1] S. Agmon. Lectures on exponential decay of solutions of second-order elliptic equations: bounds on eigenfunctions of N-body Schrödinger operators. Princeton University Press, Princeton, NJ, 1982.
- [2] R. Altmann, P. Henning, and D. Peterseim. Quantitative Anderson localization of Schrödinger eigenstates under disorder potentials. ArXiv e-print 1803.09950 (submitted), 2018.
- [3] P. W. Anderson. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. Phys. Rev., 109(5), p.1492-1505, 1958.
- [4] D. N. Arnold, G. David, D. Jerison, S. Mayboroda, and M. Filoche. Effective Confining Potential of Quantum States in Disordered Media. Phys. Rev. Lett., 116(5), 2016.
- [5] R. Carmona, A. Klein, and F. Martinelli. Anderson localization for Bernoulli and other singular potentials. Comm. Math. Phys., 108(1), p.41-66, 1987.
- [6] V. Chulaevsky and Y. Suhov. Multi-scale analysis for random quantum systems with interaction. Birkhäuser/Springer, New York, 2014.
- [7] J. M. Combes and L. Thomas. Asymptotic behaviour of eigenfunctions for multiparticle Schrödinger operators. Comm. Math. Phys., 34, p.251-270, 1973.
- [8] M. Filoche and S. Mayboroda. Universal mechanism for Anderson and weak localization. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 109(37), p.14761-14766, 2012.
- [9] F. Germinet and A. Klein. A comprehensive proof of localization for continuous Anderson models with singular random potentials. J. Eur. Math. Soc. (JEMS), 15(1), p.53-143, 2013.
- [10] F. Germinet, P. Müller, and C. Rojas-Molina. Ergodicity and dynamical localization for Delone-Anderson operators. Rev. Math. Phys., 27(9), 2015.
- [11] I. J. Goldsheid and S. A. Molchanov. On Mott's problem. Sov. Math. Dokl., 17, p.1369-1373, 1976.
- [12] I. J. Goldsheid, S. A. Molchanov, and L. A. Pastur. A random homogeneous Schrödinger operator has a pure point spectrum. Funkcional. Anal. i Priložen., 11(1), p.1-10, 1977.
- [13] D. S. Grebenkov and B.-T. Nguyen. Geometrical structure of Laplacian eigenfunctions. SIAM Rev., 55(4), p.601-667, 2013.
- [14] I. Herbst and E. Skibsted. Decay of eigenfunctions of elliptic PDE's, I. Adv. Math., 270, p.138-180, 2015.
- [15] P. D. Hislop and I. M. Sigal. Introduction to Spectral Theory. Springer-Verlag, New York, 1996.
- [16] A. Klein, J. Lacroix, and A. Speis. Localization for the Anderson model on a strip with singular potentials. J. Funct. Anal., 94(1), p.135-155, 1990.
- [17] A. Klein, F. Martinelli, and J. F. Perez. A rigorous replica trick approach to Anderson localization in one dimension. Comm. Math. Phys., 106(4), p.623-633, 1986.
- [18] A. Klein and S. Molchanov. Simplicity of eigenvalues in the Anderson model. J. Stat. Phys., 122(1), 95-99, 2006.
- [19] R. Kornhuber, D. Peterseim, and H. Yserentant. An analysis of a class of variational multiscale methods based on subspace decomposition. Math. Comp., 87 (2018), 2765-2774, 2018.
- [20] R. Kornhuber and H. Yserentant. Numerical homogenization of elliptic multiscale problems by subspace decomposition. Multiscale Model. Simul., 14(3), p.1017-1036, 2016.
- [21] A. Målqvist and D. Peterseim. Localization of elliptic multiscale problems. Math. Comp., 83(290), p.2583-2603, 2014.
- [22] A. J. O'Connor. Exponential decay of bound state wave functions. Comm. Math. Phys., 32, p.319-340, 1973.
- [23] S. Steinerberger. Localization of quantum states and landscape functions. Proc. Amer. Math. Soc., 145(7), p.2895-2907, 2017.



Daniel Peterseim ist seit 2017 Inhaber des Lehrstuhls Numerische Mathematik an der Universität Augsburg. Er studierte von 1999-2004 Mathematik an der Technischen Universität Ilmenau. Nach seiner Promotion an der Universität Zürich 2007, arbeitete er als Postdoktorand und Nachwuchsgruppenleiter im Rahmen des DFG Forschungszentrums Matheon an der Humboldt-Universität zu Berlin, wo er sich später auch habilitierte. Von 2013 bis 2017 arbeitete er als Professor für Numerische Simulation an der Universität Bonn. Seine Forschungsinteressen liegen in der Entwicklung und Analyse numerischer Verfahren für partielle Differentialgleichungen mit Anwendungen in den Natur- und Ingenieurwissenschaften. Einen Schwerpunkt bilden neben den hier beschriebenen Eigenwertproblemen, Mehrskalprobleme und -methoden.



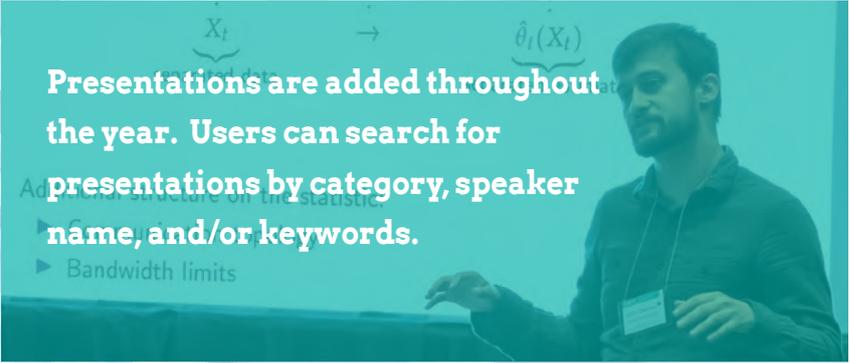
Patrick Henning arbeitet seit 2015 als Assistant Professor an der KTH Stockholm. Sein Studium in Mathematik absolvierte er von 2002 bis 2007 an der Universität Freiburg. Nach seiner Promotion an der Universität Münster 2011 folgten Aufenthalte als Postdoktorand an der Universität Uppsala und der EPFL Lausanne. Im Jahr 2015 habilitierte er sich an der Universität Münster zum Thema numerische Mehrskalmethoden in den Geowissenschaften und der Physik. In seiner aktuellen Forschungsausrichtung beschäftigt er sich mit numerischen Problemen in der Quantenmechanik und hierbei insbesondere mit Verfahren zur effizienten Simulation von Suprafluiden und Supraleitern.

siam® PRESENTS

Featured lectures & videos from conferences



The collection includes talks by invited and prize speakers, select minisymposia, and minitutorials.



Presentations are added throughout the year. Users can search for presentations by category, speaker name, and/or keywords.

The audio-visual archive contains more than 2,000 presentations posted in 40+ searchable topics, including:

algebraic geometry / atmospheric and oceanographic science / computational science / data mining / geophysical science / uncertainty quantification / and more



siam®

Society for Industrial and Applied Mathematics

3600 Market Street, 6th Floor, Philadelphia, PA 19104-2688 USA

Phone: +1-215-382-9800 · Fax: +1-215-386-7999 · membership@siam.org · www.siam.org

siam.org/presents

11/18

Dr.-Ing. Silvia Budday studierte Maschinenbau am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) und verbrachte ein Jahr ihres Masterstudiums an der Purdue University, IN, USA. Anschließend promovierte sie an der Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg (FAU) bei Prof. Paul Steinmann in Kooperation mit Prof. Ellen Kuhl von der Stanford University, CA, USA, und untersuchte dabei mechanische Aspekte der Gehirnentwicklung. Forschungsaufenthalte zur experimentellen Untersuchung tierischen und menschlichen Gehirngewebes führten sie während ihrer Promotion zu Prof. Timothy Ovaert an die Notre Dame University, IN, USA, und zu Prof. Gerhard A. Holzappel an die Technische Universität Graz, Österreich. Seit Januar 2018 ist sie als Postdoktorandin am Lehrstuhl für Technische Mechanik an der FAU tätig.

Die Entscheidung, Maschinenbau zu studieren, traf Silvia Budday ganz bewusst nach einem einwöchigen Praktikum in der Berechnungsabteilung eines Achterbahnkonstruktors in München. Ihre Begeisterung für die Mechanik wuchs durch die Vorlesung von Prof. Thomas Böhlke. Sie arbeitete schon bald als Tutorin im Fach (Elasto-)Statik und schrieb ihre Bachelorarbeit über die „Modellierung und Simulation des Rad-Schiene-Kontakts in Achterbahnfahrzeugen“ unter der Betreuung von Prof. Wolfgang Seemann in Kooperation mit der Firma Maurer. Während des Auslandsjahres an der Purdue University wurde dann ihr Interesse für die Biomechanik geweckt. Anschließend schrieb sie ihre Masterarbeit über „Modeling and simulation of cortical folding during brain development“ bei Prof. Thomas Böhlke in Kooperation mit Prof. Ellen Kuhl in Stanford. Das extrem spannende Thema der Gehirnmechanik ließ Frau Budday auch während ihrer Promotion nicht los. Unter der Betreuung von Prof. Paul Steinmann an der FAU und Prof. Ellen Kuhl an der Stanford University untersuchte sie die mechanischen Aspekte der Gehirnentwicklung.

Die Entwicklung des Gehirns wurde lange Zeit als rein morphogenetischer Prozess betrachtet, der unabhängig von mechanischen Kräften oder Verformungen abläuft. Neueste Untersuchungen deuten jedoch darauf hin, dass physikalische Kräfte eine entscheidende Rolle für die strukturelle Entwicklung des Gehirns spielen. Die charakteristisch gefaltete Oberfläche steht dabei in engem Zusammenhang mit der Hirnfunktion und ist daher ein wertvoller Indikator für normale oder abnormale Gehirnentwicklung. Verschiedene Forschungsansätze hatten bislang versucht, die Entstehung dieser charakteristischen Struktur zu erklären. Ein zufriedenstellendes Modell konnte aber noch nicht gefunden werden. Frau Budday entwickelte während ihrer Promotion einen kontinuumsmechanischen Ansatz für die Gehirnentwicklung, der auf biologischen bzw. zellulären Vorgängen beruht (siehe Abbildung a) [1,2]. Mithilfe analytischer, experimenteller und numerischer Methoden gelang es ihr, zu zeigen, dass die Gehirnfaltung zum Großteil durch

mechanische Instabilitäten induziert wird. Die entstehende Struktur hängt hierbei wesentlich von geometrischen Größen, wie der Dicke des Kortex (der äußeren Schicht unseres Gehirns) und der Form des Gehirns, sowie von der Steifigkeit und den Wachstumsraten in den unterschiedlichen Schichten ab [1,3]. Die Gemeinsamkeiten und Variationen der Hirnstruktur verschiedener Säugetier-Spezies wie in Abbildung 1b dargestellt, aber auch verschiedener Individuen derselben Art, lassen sich durch diese Mechanismen erklären. Das Modell zeigt, warum Tiere mit größerem Gehirn aber ähnlicher Kortexdicke ein höheres Maß an Faltung aufweisen. Bei diesem Phänomen handelt es sich also im Wesentlichen um einen rein mechanischen Effekt, der nicht direkt mit der Intelligenz des Säugetiers oder der Gehirnevolution zusammenhängt. Desweiteren können irreguläre, sekundäre und tertiäre Faltungsmuster wie Periodenverdopplung und -verdreifachung erklärt werden [4,5]. Gemeinsam mit ihren Co-Autoren gelang es Silvia Budday erstmals, diese Muster nicht nur numerisch vorherzusagen, sondern ihr Auftreten auch experimentell mithilfe geeigneter Polymerver-suche zu validieren [6].

Die Vorhersagen des mechanischen Modells stimmen mit klassischen Fehlbildungen des Gehirns wie beispielsweise Polymikrogyrie und Lissenzephalie überein [7]. Auch die übermäßige Faltenbildung bei Schizophrenie- und Autismus-Patienten kann erklärt werden. So gelingt es, durch Modellierung und Simulation die Verbindung zwischen mikroskopischen Veränderungen auf Zellebene und der makroskopisch erkennbaren Form des Gehirns herzustellen [2]. Es wird deutlich, dass nur die gemeinsame Betrachtung physikalischer und biologischer Prozesse signifikant dazu beitragen kann, die Gehirnentwicklung besser zu verstehen, Krankheiten schneller zu diagnostizieren und somit auch Behandlungsmethoden zu optimieren.

Eine große Herausforderung bei der mechanischen Modellierung von Gehirngewebe ist die extreme Weichheit des Gewebes. Traditionelle Testmethoden gelangen an ihre Grenzen, so variierten bisherige experimentelle Daten

STECKBRIEF



nicht nur quantitativ sondern auch qualitativ. Unter anderem gab es widersprüchliche Befunde bezüglich des Steifigkeitsverhältnisses zwischen grauer und weißer Substanz – ein aus mechanischer Sicht entscheidender Faktor für die Gehirnfaltung. Um diesen Widersprüchen auf den Grund zu gehen, führte Frau Budday in Zusammenarbeit mit Prof. Timothy Ovaert [8] an der Notre Dame University und Prof. Gerhard Holzapfel [9] an der TU Graz gezielte Tests an tierischem und menschlichem Gehirngewebe durch. Das Testsetup in Graz ermöglichte es, erstmals dieselbe Probe unter verschiedenen Belastungsbedingungen zu testen, um die Verfälschung der Ergebnisse aufgrund der hohen Inhomogenität des Materials zu minimieren. Gemeinsam mit ihren Kollaborationspartnern gelang es Silvia Budday, zu zeigen, dass das mechanische Verhalten des Gewebes richtungsunabhängig (isotrop) ist, jedoch signifikante lokale Unterschiede aufweist [9]. Auf Basis der generierten Daten konnten Stoffgesetze entwickelt und deren Parameter für verschiedene Gehirnregionen identifiziert werden [9,10]. Da die Mechanik des Gehirns nicht nur während der Entwicklung, sondern auch bei später auftretenden Krankheiten oder Verletzungen eine wichtige Rolle spielt,

sind die erarbeiteten Stoffgesetze ebenso von zentraler Bedeutung für die simulative Planung von Operationstechniken oder z.B. die Analyse von Schädel-Hirn-Traumata. Für ihre Dissertation wurde Silvia Budday mit dem GACM Best PhD Award und dem ECCOMAS Best PhD Award ausgezeichnet. Außerdem erhielt sie den Bertha-Benz Preis der Daimler und Benz Stiftung als Anerkennung visionärer Leistungen einer Frau in den Ingenieurwissenschaften. Neben der Mechanik des Gehirns gilt ihre große Leidenschaft ihrer Familie, Teddybären und dem Segeln. In Zukunft möchte Frau Budday weitere spannende Aspekte der Gehirnmechanik, aber auch der Mechanik anderer weicher biologischer Gewebe, erforschen. Erste experimentelle Befunde zeigen zum Beispiel, dass Nervenzellen ihre mechanische Umgebung spüren und von ihr beeinflusst werden. So kontrolliert die Mechanik des Gewebes indirekt das Wachstum und Migrationsverhalten der Zellen und sorgt dafür, dass die für die Hirnfunktion so wichtigen Verbindungen und Synapsen ausgebildet werden. Dies ist nur einer der vielen Aspekte, die es in Zukunft noch genauer zu untersuchen und zu modellieren gilt.

Literatur

[1] S. Budday, P. Steinmann, and E. Kuhl. The role of mechanics during brain development. *J. Mech. Phys. Solids*, 72:75–92, 2014.

[2] S. Budday, P. Steinmann, and E. Kuhl. Physical biology of human brain development. *Front. Cell. Neurosci.*, 9, 2015.

[3] S. Budday, P. Steinmann, A. Goriely, and E. Kuhl. Size and curvature regulate pattern selection in the mammalian brain. *Extreme Mech. Lett.*, 4:193–198, 2015.

[4] S. Budday, E. Kuhl, and J. W. Hutchinson. Period-doubling and period-tripling in growing bilayered systems. *Philos. Mag.*, (95):3208–3224, 2015.

[5] S. Budday, P. Steinmann, and E. Kuhl. Secondary instabilities modulate cortical complexity in the mammalian brain. *Philos. Mag.*, 95(28–30):3244–3256, 2015.

[6] S. Budday, S. Andres, B. Walter, P. Steinmann, and E. Kuhl. Wrinkling instabilities in soft bilayered systems. *Philos. Trans. A Math. Phys. Eng. Sci.*, 375(2093), 2017.

[7] S. Budday, C. Raybaud, and E. Kuhl. A mechanical model predicts morphological abnormalities in the developing human brain. *Sci. Rep.*, 4, 2014.

[8] S. Budday, R. Nay, R. de Rooij, P. Steinmann, T. Wyrobek, T. C. Ovaert, and E. Kuhl. Mechanical properties of gray and white matter brain tissue by indentation. *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.*, 46:318–330, 2015.

[9] S. Budday, G. Sommer, C. Birkl, C. Langkammer, J. Haybaeck, J. Kohnert, M. Bauer, F. Paulsen, P. Steinmann, E. Kuhl, and G. A. Holzapfel. Mechanical characterization of human brain tissue. *Acta Biomater.*, 48:319–340, 2017.

[10] S. Budday, G. Sommer, J. Haybaeck, P. Steinmann, G. A. Holzapfel, and E. Kuhl. Rheological characterization of human brain tissue. *Acta Biomater.*, 60:315–329, 2017.

Kontakt:

Dr.-Ing. Silvia Budday
 Lehrstuhl für Technische Mechanik
 Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg
 Egerlandstr. 5
 91058 Erlangen
 silvia.budday@fau.de
<https://www.youtube.com/watch?v=bPDPiPrupJM>

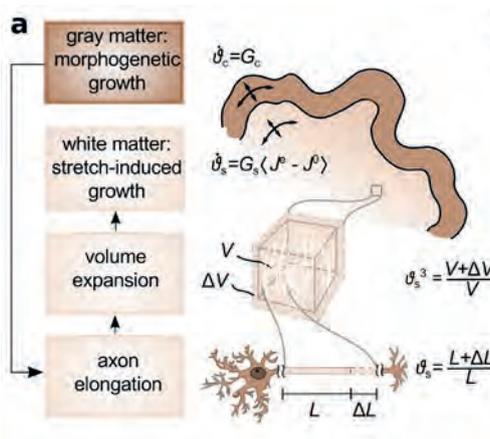


Abb.a: Modell für das Gehirnwachstum

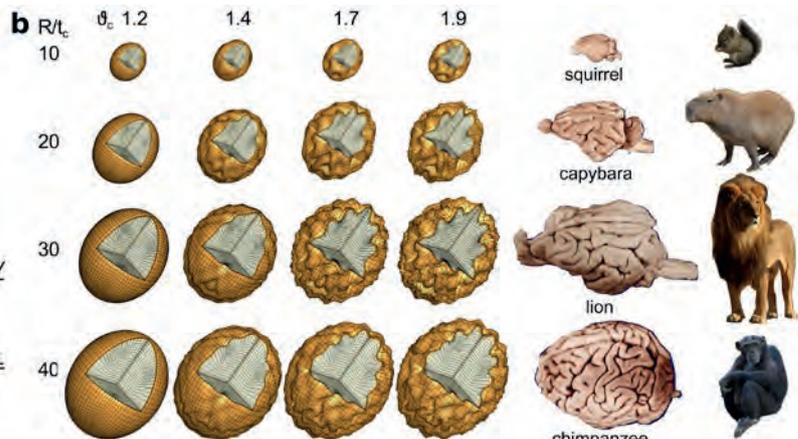


Abb.b: Vergleich der Gehirnfaltung verschiedener Säugetiere

Dr. Robert Altmann ist Akademischer Rat am Lehrstuhl für Numerische Mathematik an der Universität Augsburg. Er studierte Mathematik an der Humboldt-Universität zu Berlin und promovierte von 2011 bis 2015 bei Prof. Dr. Volker Mehrmann an der Technischen Universität Berlin im Rahmen des ERC Grants „Modellierung, Simulation und Regelung von Multi-Physik-Systemen“. In der mit dem Dr.-Klaus-Körper-Preis der GAMM ausgezeichneten Dissertation beschäftigte er sich speziell mit Partiell-differential-algebraischen Gleichungen. Nach einem vom DAAD geförderten PostDoc Aufenthalt an der Universität Innsbruck wechselte er 2017 nach Augsburg, wo er sich nun vermehrt mit mehrskaligen Problemen beschäftigt. Robert Altmann war bis 2016 GAMM Junior und ist Mitglied des GAMM Fachausschusses „Numerische Analysis“.

Praxisorientierte Anwendungen führen auf immer komplexere Modelle und fast immer auf gekoppelte Systeme. Die effiziente und zuverlässige Simulation solcher Systeme

stellt noch immer eine große Herausforderung dar und erfordert das Zusammenspiel verschiedener mathematischer Bereiche. Dazu zählen u.a. die Linearisierung, eine adaptive Zeit- und Ortsdiskretisierung sowie Vorkonditionierer für schnelle Löser. Gekoppelte Systeme verbinden nicht nur verschiedene physikalische Komponenten mit unterschiedlichen charakteristischen Längen- und Zeitskalen sondern auch verschiedene Arten von Gleichungen (oder sogar Ungleichungen). Elektrische Schaltkreise lassen sich beispielsweise durch gewöhnliche Differentialgleichungen beschreiben, die zusätzlich den Kirchhoff'schen Gesetzen unterliegen. Letztere sind durch algebraische Nebenbedingungen gegeben, was insgesamt zu einer Differential-algebraischen Gleichung (DAE) führt. Im Bereich flexibler Mehrkörpersysteme betrachtet man Kopplungen von elastischen Körpern. Solche Systeme beinhalten also auch partielle Differentialgleichungen und führen daher auf sogenannte Partiell-differential-algebraische Gleichungen (PDAE).

Ganz allgemein bieten PDAEs einen vielversprechenden Modellierungsansatz, bei dem alle verfügbaren Informationen in Form von Systemgleichungen agieren. Dies ermöglicht eine automatisierte und modulare Modellbildung mittels automatisierter Simulationstools wie Modelica oder Matlab Simulink. Alternativ könnte man auch entsprechende Variablen eliminieren und ein reduziertes System von Differentialgleichungen (in sogenannten Minimalkoordinaten) erhalten. Dies ist aber nicht immer einfach zu realisieren und führt mitunter zum Verlust wertvoller Informationen des Systems wie etwaiger Erhaltungsgrößen. Zudem kann durch den Übergang zu Minimalkoordinaten die Systemstruktur (z.B. Symmetrie, Sattelpunkt-Struktur) zerstört werden [3]. Im PDAE Modell dagegen behalten

alle Variablen ihre physikalische Bedeutung und bleiben somit auch Teil des Diskretisierungsprozesses.

Die genannten Vorteile gehen aber oft mit einer Verkompli-

zierung der dazugehörigen mathematischen und numerischen Analysis einher. So leiden DAEs und PDAEs an speziellen Instabilitäten und sind nur selten wohlgestellt im ursprünglichen Sinne. Ein bekanntes Phänomen ist der Drift der numerischen Lösung von der Lösungsmannigfaltigkeit: So führt eine unbedachte Simulation eines einfachen Pendels dazu, dass sich der Massenpunkt linear von der Kreisbahn entfernt. Im endlich-dimensionalen Fall von DAEs ist ein möglicher Ausweg die Anwendung einer sogenannten Indexreduktion. Dabei wird das System äquivalent umformuliert bis ein wohlgestelltes Problem mit besseren numerischen Eigenschaften entsteht. Während meiner Promotionszeit an der Technischen Universität Berlin habe ich eine entsprechende Regularisierung für PDAEs entwickelt [1]. Daraus resultieren PDAE-Systeme mit verbesserten Stabilitätseigenschaften. Dies ist nicht nur in Bezug

auf die Diskretisierung wichtig, sondern spielt auch bei Anwendungen mit unsicheren Parametern oder fehlerbehafteten Systemeingängen eine wichtige Rolle.

Die Regularisierung ermöglicht auch eine Rothe-Diskretisierung, d.h. die Diskretisierung zuerst in der Zeit und dann im Ort und somit die Anwendung adaptiver Finite-Elemente-Verfahren [5, 6]. Dabei ist die spezielle Wahl der Diskretisierung unerheblich. Die resultierenden positiven Effekte wurden in den Arbeiten [2, 6] anhand der Navier-Stokes Gleichungen nachgewiesen, welche man aufgrund der Inkompressibilitätsbedingung auch als PDAE interpretieren kann. Ein weiterer wichtiger Aspekt ist die Konvergenz der Zeitdiskretisierung [4, 7]. Dies entspricht genau dem Grenzfall, dass in jedem Zeitschritt die resultierende stationäre partielle Differentialgleichung exakt gelöst wird. Entsprechende Konvergenzergebnisse sind entscheidend für die Konstruktion robuster Diskretisierungsverfahren,

STECKBRIEF



die auch beim Übergang ins Kontinuierliche konvergieren. Aktuell beschäftige ich mich mit weiteren Anwendungen, die sich durch PDAEs beschreiben lassen. Ein Beispiel ist die numerische Simulation von Gasnetzwerken, die auf natürliche Weise Kopplungsbedingungen beinhalten [11]. Eine weitere Anwendung bilden parabolische Probleme mit dynamischen Randbedingungen. Hier ist es möglich, die Verbindung aus Gebiets- und Randdynamik als gekoppeltes System zu interpretieren [10].

Seit meinem Wechsel an die Universität Augsburg befasse ich mich verstärkt mit Mehrskalensproblemen. So beschäftige ich mich u.a. mit partiellen Differentialgleichungen mit ungeordneten Mikrostrukturen wie sie beispielsweise in der Geomechanik auftreten [8]. Einen weiteren Themenkomplex bildet die mathematische Analysis von Lokalisierungseffekten. Für das Phänomen der Anderson-Lokalisierung [9] kombinierten wir Methoden der Gebietszerlegung und der numerischen Homogenisierung, um zu beweisen, dass die ersten Eigenfunktionen des linearen Schrödinger-Operators lokalisieren, wenn das entsprechende Potential hinreichend Unordnung aufweist, vgl. Abb. 1. Dieses zunächst theoretische Resultat kann nun auch bei der numerischen Approximation der Eigenfunktionen ausgenutzt werden.

Mein Ziel ist es, auch in der Zukunft mithilfe der Numerischen Analysis die Entwicklung effizienter Simulationsverfahren für reale Prozesse voranzutreiben.

Literatur

- [1] R. Altmann. Index reduction for operator differential-algebraic equations in elastodynamics. *Z. Angew. Math. Mech. (ZAMM)*, Vol. 93, 2013, pp. 648–664.
- [2] R. Altmann and J. Heiland. Finite element decomposition and minimal extension for flow equations. *ESAIM Math. Model. Numer. Anal.*, Vol. 49, 2015, pp. 1489–1509.
- [3] R. Altmann, P. Betsch, and Y. Yang. Index reduction by minimal extension for the inverse dynamics simulation of cranes. *Multibody Syst. Dyn.*, Vol. 36, 2016, pp. 295–321.
- [4] R. Altmann and A. Ostermann. Splitting methods for constrained diffusion-reaction systems. *Computers and Mathematics with Applications*, Vol. 74, 2017, pp. 962–976.
- [5] R. Altmann. Convergence of the Rothe method applied to operator DAEs arising in elastodynamics. *Comput. Methods Appl. Math.*, Vol. 17, 2017, pp. 533–552.
- [6] R. Altmann and J. Heiland. Regularization and Rothe discretization of semi-explicit operator DAEs. *Int. J. Numer. Anal. Model.*, Vol. 15, 2018, pp. 452–478.
- [7] R. Altmann and C. Zimmer. Runge-Kutta methods for linear semi-explicit operator differential-algebraic equations. *Math. Comp.*, Vol. 87, 2018, pp. 149–174.
- [8] R. Altmann, E. Chung, R. Maier, D. Peterseim, and S.-M. Pun. Computational multiscale methods for linear heterogeneous poroelasticity. *ArXiv Preprint 1801.00615*, 2018.
- [9] R. Altmann, P. Henning, and D. Peterseim. Quantitative Anderson localization of Schrödinger eigenstates under disorder potentials. *ArXiv Preprint 1803.09950*, 2018.
- [10] R. Altmann. A PDAE formulation of parabolic problems with dynamic boundary conditions. Accepted for publication in *Applied Mathematics Letters*, 2018.
- [11] R. Altmann and C. Zimmer. Time discretization schemes for hyperbolic systems on networks by ϵ -expansion. *ArXiv Preprint 1810.04278*, 2018.

Kontakt:

Dr. Robert Altmann
 Lehrstuhl für Numerische Mathematik
 Universität Augsburg
 Universitätsstr. 14
 86159 Augsburg
 Email: robert.altmann@math.uni-augsburg.de

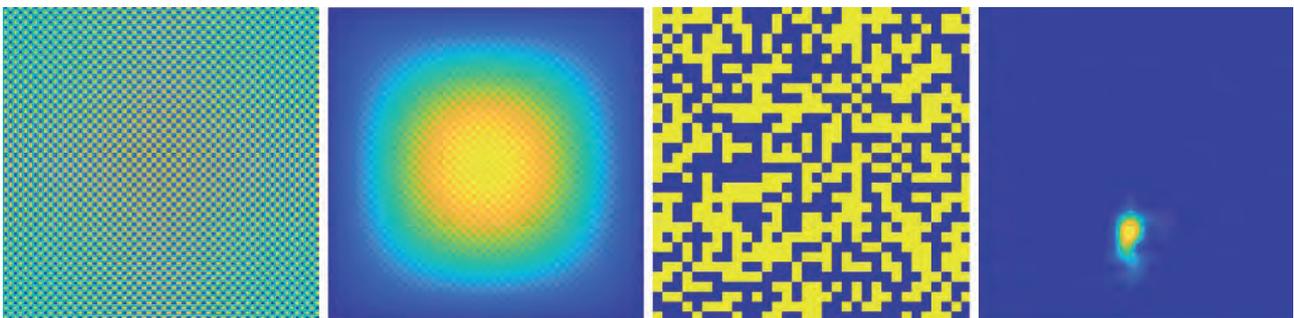


Abb. 1: (von links nach rechts) periodisches Potential mit dazugehöriger Eigenfunktion zum kleinsten Energiezustand und ein Unordnungs-Potential mit lokalisierter Eigenfunktion.



GAMM Archive for Students (GAMMAS)

An Open-Access Online-Journal run by the GAMM Juniors



LERNEN

FORSCHEN

PUBLIZIEREN

Einreichung studentischer Forschungsergebnisse unter:

www.gamm-ev.de ▶ Publikationen ▶ GAMMAS

GAMM Members: STAY CONNECTED

SIAM NEWS

HOME | HAPPENING NOW | GET INVOLVED | RESEARCH | CAREERS | ANNOUNCEMENTS | CURRENT ISSUE

Make *SIAM News* part of your daily check-ins.

SIAM News online brings you convenient access to all SIAM information channels in one place—articles from the print newsjournal plus online-exclusive blog posts, important announcements, concise updates on cutting-edge research, and in-depth articles on new discoveries and applications.

Submissions from members of the community are welcome for consideration!

Email ideas to sinews@siam.org

Featured Sections: Nuggets

Select articles from SIAM journals are boiled down to a popular science level, making current high-level research more accessible to a larger audience.

sinews.siam.org/nuggets

Unwrapped

SIAM's free monthly member e-newsletter provides timely updates and announcements of interest to our computational communities.

sinews.siam.org/unwrapped

Videos

Bite-sized informative and explainer videos on a range of computational science topics shed light on real-world applications of mathematics.

sinews.siam.org

Recent Issue:

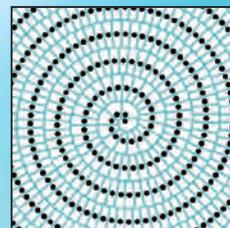
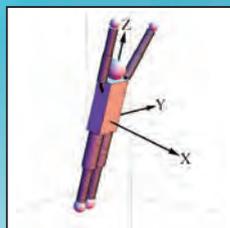
SIAM NEWS

Information Theory in Earth and Space Science

 Wormlike Micellar Solutions, Polymers, and Micelles
 By Paul Davis
 An expert address to explore the...
 SIAM News online brings you convenient access to all SIAM information channels in one place—articles from the print newsjournal plus online-exclusive blog posts, important announcements, concise updates on cutting-edge research, and in-depth articles on new discoveries and applications.

Untangling DNA with Knot Theory
 By Stephen J. Gamblin
 L...
 SIAM News online brings you convenient access to all SIAM information channels in one place—articles from the print newsjournal plus online-exclusive blog posts, important announcements, concise updates on cutting-edge research, and in-depth articles on new discoveries and applications.

ARCHIVES >
SUBSCRIBE >



sinews.siam.org

siam

Society for Industrial and Applied Mathematics

3600 Market Street, 6th Floor, Philadelphia, PA 19104-2688 USA

Phone: +1-215-382-9800 · Fax: +1-215-386-7999 · membership@siam.org · www.siam.org



GAMM-JUNIOREN RÜCKBLICK 2018 UND AUSBLICK 2019

VON RAFAEL REISENHOFER

Die GAMM-Junioren sind eine Gruppe von 30 Doktorand*innen und Postdocs, die sich durch die Organisation unterschiedlicher Veranstaltungen und die Mitsprache in Gremien der GAMM für die Interessen des wissenschaftlichen Nachwuchses einsetzen.

Im Jahr 2018 organisierten die GAMM-Junioren neben der mittlerweile traditionellen Poster Session auf der Jahrestagung in München bereits zum zweiten Mal den sogenannten Young Academics Meet Mentors (YAMM) lunch. Bei diesem Event hatten etwa 50 Nachwuchswissenschaftler*innen die Möglichkeit, in einem ungezwungenen Rahmen mit bereits etablierten Professor*innen Fragen zur akademischen Laufbahn zu erörtern. Insbesondere die Vereinbarkeit von Karriere und Familie war im Vorhoelzer Forum, das auch einen großartigen Ausblick über die Stadt München bot, eines der bestimmenden Themen.

Einer der Höhepunkte 2018 war die Gründung des GAMM Archive for Students (GAMMAS). Nach jahrelanger Vorarbeit und mit großzügiger Unterstützung von Seiten der GAMM und der Bibliothek der TU Chemnitz konnte die online frei verfügbare Zeitschrift für studentische Forschung endlich aus der Taufe gehoben werden. GAMMAS soll ein Forum für ausgezeichnete studentische Arbeiten sein, die einen wichtigen Beitrag zum wissenschaftlichen Diskurs liefern, aber aus unterschiedlichen Gründen in regulären Publikationen nicht berücksichtigt werden würden. Beispiele hierfür können etwa negative Resultate sein, Arbeiten, die in der Literatur bereits bekannte Ansätze miteinander vergleichen, oder didaktisch orientierte Artikel, die den aktuellen Forschungsstand zu einem Thema besonders anschaulich vermitteln. Neue Artikel können jederzeit auf der GAMMAS-Website zur Begutachtung eingereicht werden (siehe Weblinks).

Ein fixer Bestandteil im Kalender der GAMM-Junioren ist das jährliche Herbsttreffen, welches in diesem Jahr von Robert Martin an der Universität Duisburg-Essen organisiert wurde. Am ersten Tag des Treffens hatten alle Teilnehmer*innen die Gelegenheit, kurze Überblicksvorträge zu ihren jeweiligen Forschungsgebieten zu halten. So konnten alle Junior*innen einen Einblick in die grundsätzlichen Fragestellungen und Methoden anderer Felder erhalten und dabei oft erstaunliche Verbindungen zu ihrer eigenen Arbeit entdecken. Die beiden verbleibenden Tage wurden vor allem zur Organisation und Vorbereitung verschiedener Aktivitäten genutzt. Im Mittelpunkt standen hierbei der letzte Feinschliff für die Website von GAMMAS, die Planungen zur dritten YAMM in Wien und die Erstellung eines Konzeptes für ein kurzes Vorlesungsprogramm, welches erstmals direkt vor Beginn der Jahrestagung 2020 in Kassel stattfinden soll.

Wie jedes Jahr freuen wir uns auch in diesem Herbst darüber, 10 neue Mitglieder begrüßen zu dürfen.

GAMM-Junior*innen werden auf Vorschlag der lokalen GAMM-Repräsentant*innen für jeweils drei Jahre von einer eigens dafür eingerichteten Auswahlkommission ernannt und sind für diese Zeit auch vom GAMM-Mitgliedsbeitrag befreit. Die Liste aller neuen, aktuellen und bereits ausgeschiedenen Junior*innen kann auf der GAMM-Website eingesehen werden. Wer selbst GAMM-Junior*in werden, oder jemand anders nominieren möchte, kann hierfür die lokalen GAMM-Repräsentant*innen kontaktieren.

Im Ausblick auf das Jahr 2019 sticht vor allem die von Philipp Morgenstern organisierte Sommerschule zum Thema „Space-time Finite-Element Methods for Parabolic and Hyperbolic Conservation Laws“ hervor. Diese wird vom 7. bis zum 9. August 2019 an der Leibniz Universität Hannover stattfinden. Weitere Informationen finden Sie auf der unten angeführten Website.

Als ausscheidender Sprecher der GAMM-Junioren möchte ich mich bei allen Junior*innen und insbesondere bei meinen beiden Stellvertretern, Benjamin Unger und Robert Martin, herzlich für die tolle Zusammenarbeit im vergangenen Jahr bedanken. Die Jahre als Junior haben mir wertvolle Einblicke und spannende Bekanntschaften geschenkt und ich freue mich bereits auf ein Wiedersehen auf der Jahrestagung in Wien!

Links:

Offizielle Website: <http://www.gamm-juniors.de/>

Liste aller GAMM-Junior*innen:

www.gamm-ev.de/index.php/de/organisation/gamm-junioren/junior-mitglieder.html

GAMM Archive for Students (GAMMAS):

www.bibliothek.tu-chemnitz.de/ojs/index.php/GAMMAS/index

Sommerschule „Space-time Finite-Element Methods for Parabolic and Hyperbolic Conservation Laws“: <https://www.ifam.uni-hannover.de/2154.html>



Einige Mitglieder der GAMM-Junioren auf dem diesjährigen Herbsttreffen in Essen. v.l.n.r.

(hinten): Christoph Meier, Svenja Otto, Lutz Pauli,

(vorne): Philipp Morgenstern, Tobias Kaiser, Johanna Eisenträger.

JAHRESBERICHT 2018 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

ANGEWANDTE OPERATORTHEORIE



Birgit Jacob



Christiane Tretter

Der Fachausschuss Angewandte Operatortheorie fördert die Kommunikation und Zusammenarbeit von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern, deren Arbeitsgebiet in der Anwendung und Theorie von operatortheoretischen Methoden liegt. Ein Hauptanliegen ist die Weiterentwicklung und Vertiefung operatortheoretischer Methoden in Hinblick auf ihre effiziente Umsetzung und Anwendbarkeit in konkreten physikalischen und ingenieurwissenschaftlichen Problemstellungen.

Aktivitäten des Fachausschusses 2018:

- Sektion „Angewandte Operatortheorie“, Jahrestagung der GAMM 2018.
Organisation: András Bátkai (PH Vorarlberg) und Felix Schwenninger (U Hamburg).
- Special Session „Spectral Theory and Differential Operators“ at IWOTA 2018, Shanghai, China, 23.-27. Juli 2018.
Organisatoren: Jussi Behrndt (Graz), Olaf Post (Trier) and Carsten Trunk (Ilmenau).
- Sommerschule „Control of Infinite-Dimensional Systems“, 1.-4. Oktober 2018, Wuppertal.
Organisation: Birgit Jacob (Wuppertal) und Julia Kaiser (Wuppertal).
- Workshop „Stability and Control of Infinite-Dimensional Systems“ SCINDIS'18, 9.-11. Oktober 2018.
Organisatoren: Sergey Dashkovskiy (Würzburg), Birgit Jacob (Wuppertal), Andrii Mironchenko (Passau) und Fabian Wirth (Passau).

- Special issue on Applied Operator Theory in den GAMM Mitteilungen. Gasteditoren: Jussi Behrndt (Graz), Birgit Jacob (Wuppertal), Christiane Tretter (Bern) und Carsten Trunk (Ilmenau).
- Conference: Advances in Operator Theory with Applications to Mathematical Physics, Orange, Kalifornien. 12.-16. November 2018. Organisatoren: Jussi Behrndt (Graz), D. Alpay (Orange, USA), F. Colombo (Milano) und D. Struppa (Orange, USA)

Geplante Aktivitäten des Fachausschusses 2019:

- Sektion „Angewandte Operatortheorie“, Jahrestagung der GAMM 2019. Organisation: Olaf Post (Trier) und Jonathan Rohleder (Stockholm).
- Conference: Differential Operators on Graphs and Waveguides, TU Graz, 25. February- 1. März 2019. Organisatoren: Jussi Behrndt (Graz) und A. Khrabustovskiy (Graz)
- Special Session „Spectral Theory and Differential Operators“ at IWOTA 2019, Lisboa, Portugal, 22.-26.7.2019
Organisatoren: Andrii Khrabustovskiy (Graz), Olaf Post (Trier) and Carsten Trunk (Ilmenau).
- Special Session „Spectral Theory“ at QMath14, Aarhus, Denmark, 12.-16. August 2019. Organisatoren: Jussi Behrndt (Graz) und B. Helffer (Nantes).
- Conference: 6th Najman Conference on Spectral Theory and Differential Equations, Croatia, 24.-28. September 2019. Organisatoren: Jussi Behrndt (Graz), L. Grubisic (Zagreb), I. Nakic (Zagreb) und Ivan Veselic (Dortmund).

JAHRESBERICHT 2018 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.

Der Fachausschuss wurde im Jahr 2018 neu gegründet. Das Treffen des FA fand 2018 im Rahmen der EUCCO in Trier statt. Mitglieder des FA haben an zahlreichen Konferenzen und Workshops teilgenommen und ebensolche Veranstaltungen mitorganisiert. Zu nennen sind hier insbesondere

- die GAMM Jahrestagung 2018 in München
- die IFIP TC7 Conference on System Modelling and Optimization in Essen
- die European Conference on Computational Optimization (EUCCO) in Trier

- die Organisation von Clustern auf der ISMP in Bordeaux, sowie
- von Minisymposia auf der Optimal Control and Dynamic Games in Wien
- sowie die Organisation der Oberwolfach Workshops Challenges in Optimal Control of Nonlinear PDE-Systems
- und Numerical Analysis for Non-Smooth PDE-Constrained Optimal Control Problems

Eine erweiterte Liste von Veranstaltungen sowie bevorstehende Tagungsaktivitäten für 2019 werden über die Homepage des Fachausschusses <http://www.gamm.optpde.net> bekanntgegeben.

JAHRESBERICHT 2018 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 (Vorsitzender), Dorothee Knees (stellvertretende Vorsitzende), Carolin Kreisbeck (stellvertretende Vorsitzende), Martin Kružík, Matthias Röger, Guido Schneider, Marita Thomas und Mathias Wilke. Anträge auf Aufnahme in den Fachausschuss können jederzeit an den Vorsitzenden (Helmut Abels, e-mail: Analysis.PDG@ur.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 folgender Konferenzen, Workshops und Schulen beteiligt:

Vom 19. bis 21. September 2018 fand an der Universität Stuttgart, das sechste Jahrestreffen des Fachausschusses mit 44 Teilnehmern statt (Organisation: G. Schneider). Die Vortragsthemen reichten von neuen Entwicklungen in der Analysis von geometrischen Differentialgleichungen, nichtlokalen inversen Problemen und ratenunabhängigen Systemen über variationelle Methoden und Phasenfeldmodellen in der Strömungsmechanik hin zu Anwendungen im Kontext von Zellmembranen und Ionisation.

Auf der GAMM-Jahrestagung 2018 hielt unser Mitglied Mark Peletier einen Plenarvortrag und Dorothee Knees war im Programm-Komitee vertreten.

Vom 5. bis 8. März 2018 wurde an der Uni Regensburg ein Workshop mit dem Thema „Geometric Evolution Equations“ veranstaltet (Organisation: H. Abels, G. Dolzmann, H. Garcke, A. Pluda).

In Telč wurde vom 2.-5. Mai 2018 das Treffen „Regularity theory for elliptic and parabolic systems and problems in continuum mechanics“ abgehalten. (Organisation: E. Acerbi, M. Bulicek, N. Fusco, J. Malek).

Zum Abschluss des internationalen Graduiertenkollegs 1529 „Mathematical Fluid Dynamics“ gab es vom 7.-11. Mai 2018 einen Workshop in Bad Boll (Organisation: M. Hieber, H. Kozono).

Außerdem fand am CIRM, Frankreich, vom 14.-18. Mai 2018 die Konferenz „Stochastic Partial Differential Equations“ unter Organisation von N. Berglund, A. Debussche, F. Delarue und C. Kühn statt.

Vom 28.-30. Mai 2018 organisierten S. Herr und T. Candy einen Workshop an der Universität Bielefeld zum Thema „Nonlinear Dirac equations and related problems“.

Unter den Organisatoren von „Mathematics & Mechanics: Natural Philosophy in the 21st Century“ (24.-27. Juni 2018 in Oxford) war Anja Schlömerkemper.

Auf der 12. AIMS Konferenz in Taipei (5.-9. Juli 2018) waren zahlreiche Mitglieder des Fachausschusses als Organisatoren von Minisymposia und als Sprecher vertreten.

Zur Feier des 60. Geburtstags von Alexander Mielke fand vom 24.-28. September 2018 der Workshop „Analysis of evolutionary and complex systems“ am WIAS Berlin statt (Organisation: M. Liero, S. Reichelt, G. Schneider, F. Theil, M. Thomas).

Auch für dieses Jahr sind zahlreiche Aktivitäten mit Beteiligung von Mitgliedern des Fachausschusses geplant:

Das siebte Jahrestreffen wird Teil der Konferenz „PDE 2019“ sein, die vom 9.-13. September 2019 in Berlin stattfinden wird (Organisation: M. Thomas und H.-C. Kaiser).

Auf der GAMM-Jahrestagung 2019 in Wien wird die Sektion „Applied Analysis“ von Patrick Dondl und Ulisse Stefanelli organisiert. Dieter Bothe wird einer der Plenarsprecher sein.

Zudem wird am 5./6. November 2019 an der Universität Regensburg der Workshop „Women in Mathematical Materials Science“ abgehalten.

Von Januar bis April 2019 findet unter Organisation von Emanuele Spadaro, László Székelyhidi Jr. und Georg Weiss das Trimester Programm „Evolution of interfaces“ am Hausdorff Institut in Bonn statt.

Im Juli 2019 ist ein Workshop „Calculus of Variations on Schiermonnikoog“ in den Niederlanden geplant (Organisation: C. Kreisbeck).

JAHRESBERICHT 2018 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

ANALYSIS VON MIKROSTRUKTUREN



Carsten Carstensen



Klaus Hackl

Der Fachausschuss fördert die mathematische Modellierung mikromechanischer Phänomene sowie deren Analyse und numerische Simulation. Die Wechselwirkung von Mechanismen auf unterschiedlichen Skalen erfordert eine tiefere Zusammenarbeit von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern in den Disziplinen der Ingenieur- und Naturwissenschaften sowie der Mathematik, da einerseits viele Fragen der Modellierung nicht geklärt sind und andererseits das Potential moderner mathematischer Methoden wie Homogenisierung und Relaxierung noch nicht angemessen in Anwendungen eingeht. Die Kommunikation, Weiterentwicklung und Verfeinerung dieser Methoden werden im Fachausschuss durch koordinierte Forschungsplanung sowie durch Seminare, Tagungen und Vorträge vorangetrieben.

Aktivitäten und Treffen des Fachausschusses

- Das 17. GAMM-Seminar on Microstructures fand unter grosser Beteiligung des FA mit vielen renommierten Sprechern in Florenz statt <http://www.gamm17.unifi.it/>
- Unter starker Beteiligung des FA fand am WIAS in Berlin im September der Workshop „AnaLysis of Evolutionary and compleX systems (ALEX2018)“ zu Ehren von Alexander Mielke mit vielen internationalen Beiträgen zu Mikrostrukturen und ihrer Evolution statt. <http://www.wias-berlin.de/workshops/ALEX2018/>
- Mikromagnetische Phänomene liegen im Fokus des FA und wurden im Wiener Workshop „MANA 2018 - Micromagnetics: Analysis, Numerics, Applications“ im November diskutiert <http://www.asc.tuwien.ac.at/mana2018/>
- Georg Dolzmann und Klaus Hackl koordinierten den Oberwolfach Workshop „Variational methods for the modelling of inelastic solids“ im Februar mit Adriana Garroni (Rom) und Michael Ortiz (Pasadena/Bonn).
- Ben Schweizer schrieb den Artikel „Effective dispersion of waves in heterogeneous media“ auf den Seiten 5-8 im Rundbrief 1/2018
- Patrizio Neff hielt eingeladene Vorträge auf der ETamm Krakau im Juli und auf dem „Workshop thin structures“ in Dresden im September.
- Patrick Dondl co-organisierte ein EPSRC Durham Symposium „Homogenisation in Disordered Media“ im August zusammen mit Pierre Cardaliaguet (Ceremade), Nicolas Dirr (Cardiff), (Freiburg), Panagiotis Souganidis (Chicago), vgl. <http://www.maths.dur.ac.uk/lms/110/index.html>
- Dennis Kochmann organisierte die Minisymposia „Multiscale Modeling“ auf dem (WCCM) http://www.wccm2018.org/MS_1204, „Scale-bridging material modeling“ at the Society of Engineering Science (SES) annual meeting 2018 <http://ses2018.org/?s=track-symposia> und hielt den Plenarvortrag „Microstructure evolution“ at the EMMC in Nantes in March 2018 <https://emmc16.sciencesconf.org/resource/page/id/4>
- Klaus Hackl hielt Vorträge auf dem CISM-Kurs „Thermodynamics of irreversible processes in material systems“ in Udine im September und nominierte Sanjay Govindjee (UC Berkeley) erfolgreich für einen A.v.Humboldt-Preis.
- Kerstin Weinberg koordinierte die Minisymposia „Variational methods in constitutive modelling for multiphysics problems“ auf der ECCM 2018 im März <http://www.esmc2018.org/drupal8/node/1> und das MS 418 „Innovative numerical approaches for multiphysics problems“ auf dem WCCM http://www.wccm2018.org/T_400
- Jörg Schröder koordinierte das „3rd Seminar on the Mechanics of Multifunctional Materials“ (11.-15.6.2018) <https://www.uni-due.de/mechanika/smmm3.php> zusammen mit D.C. Lupascu, H. Wende, und D.Brands

Geplante zukünftige Aktivitäten:

- Das 18th-GAMM-Seminar on Microstructures wird im January 18-19, 2019 in Berlin den FA zusammen bringen. <http://www.wias-berlin.de/workshops/gamm2019/index.jsp>
- Klaus Hackl und Dennis Kochmann organisieren den CISM-Kurs „From patterns to properties of advanced materials: energetics and evolution“ am 22.-26. Juli 2019 in Udine.

JAHRESBERICHT 2018 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

DYNAMIK UND REGELUNGSTHEORIE



Rolf Findeisen



Karl Worthmann

Dynamik und Regelungstheorie ist ein interdisziplinäres Gebiet. Entsprechend umfasst der Fachausschuss Mitglieder aus verschiedensten Disziplinen: von der Mathematischen Systemtheorie, der Regelungstechnik, der Mehrkörperdynamik bis hin zu verschiedensten Anwendungsfeldern von der Mechatronik, der Energietechnik, der Robotik bis hin zum autonomen Fahren. Verbindende Klammer zwischen den Disziplinen 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, 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 der Mathematik und den Ingenieurwissenschaften zu fördern. Hierzu finden unter anderem halbjährlich Workshops statt. Diese Workshops erlauben es, aktuelle Forschungsergebnisse zu diskutieren, auf Trends und Neuentwicklungen einzugehen und gemeinsame wissenschaftliche Kooperation anzubahnen. 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 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 Ausschuss traf sich am 19.09.2018 in Anif im Rahmen des GMA 1.30/1.40 Workshops mit 13 Teilnehmerinnen und Teilnehmern/10 Vorträgen unter der Leitung von T. Meurer (U Kiel), R. Findeisen (OvGU Magdeburg) und F. Woittennek (UMIT). Weiterhin fand ein Workshop am 19. und 20. April 2018 am Einsteinzentrum der TU Berlin mit 22 Teilnehmerinnen und Teilnehmern/14 Vorträgen ausgerichtet durch S. Lucia (TU Berlin und Einstein Center Digital Future) und M. Voigt (TU Berlin) statt. In gewohnter Weise war der Fachausschuss in die Organisation der GAMM-Jahrestagung 2018 in München eingebunden: So waren P. Eberhardt (U Stuttgart) und V. Mehrmann (TU Berlin) Hauptvortragende. Sie sind Mitglieder des Fachausschusses und Ihre Nominierungen wurden durch den GAMM Fachausschuss unterstützt. Die Sektion S1 Multi-body Dynamics wurde durch T. Berger (U Hamburg) und

R. Seifried (TUHH) geleitet. Die Sektion S5 Nonlinear Oscillations organisierten A. Ams (TU Bergakademie Freiberg) und D. Kern (TU Chemnitz). Die Sektion S20 Dynamics and Control verantworteten T. Faulwasser (KIT, Karlsruhe) und O. Junge (TU München). Daneben organisierten T. Berger (U Hamburg) und S. Trenn (U Groningen, the Netherlands) das Minisymposium „Adaptive Control with Performane Guarantees“ und Martin Stoll (TU Chemnitz) das Minisymposium „PDE Constrained Optimization under Uncertainty“.

Die Mitglieder des Fachausschusses waren daneben an der Organisation zahlreicher Veranstaltungen beteiligt, z. B.:

12th Elgersburg Workshop 2018 vom 26.02. bis 01.03. in Elgersburg mit 54 Teilnehmerinnen und Teilnehmern; Organisatoren: L. Grüne (U Bayreuth), A. Ilchmann (TU Ilmenau) und E. Zerz (RWTH Aachen). 10th Elgersburg School vom 4. bis 10. März 2018 in Elgersburg mit 31 Teilnehmerinnen und Teilnehmern aus 5 Ländern; Vortragende: V. L. Khari-tonov (U Saint-Petersburg, Russia) „Time-delay systems: Lyapunov functionals and matrices“ und S. Dashkovskiy (U Würzburg) „Input-tostate stability and interconnected systems“. Organisatoren: A. Ilchmann (TU Ilmenau), T. Reis (U Hamburg), F. Wirth (U Passau).

Geplante zukünftige Aktivitäten:

Lars Grüne, Achim Ilchmann und Eva Zerz organisieren den 13. Elgersburg Workshop vom 24. bis zum 28. Februar 2019 in Elgersburg, siehe

<https://www.tu-ilmenau.de/math/forschung/tagungen/elgersburg-workshops/elgersburg-workshop-2019/>.

In diesem Rahmen findet auch das Kolloquium zu Ehren Diederich Hinrichsens 80. Geburtstages statt.

Dominik Kern und Stefan Streif richten das nächste Treffen am 25. und 26. März 2019 an der TU Chemnitz aus, siehe <https://www.tu-chemnitz.de/etit/control/GAMM/index.php/en>

Die nächste Tagung des GMA 1.50 „Grundlagen vernetzter Systeme“ findet vom 11. bis zum 13. März 2019 statt, siehe <https://www.uni-ulm.de/in/gma-fachausschuss-150-grundlagen-vernetzter-systeme>

Sara Grundel (MPI Magdeburg), Timo Reis (U Hamburg) und Sebastian Schöps (TU Darmstadt) organisieren den neunten Workshop „Differential-Algebraic Equations“ (DESCRIPTOR 2019) in Paderborn vom 17. bis zum 20. März 2019, siehe <http://www.mpi-magdeburg.mpg.de/descriptor2019>

Paul Kotyczka (TU München) organisiert gemeinsam mit Bernhard Maschke (University Claude Bernard Lyon 1, France) eine Frühjahrsschule zum Thema „Port-Hamiltonian Systems“ vom 31. März bis zum 5. April 2019, siehe www.rt.mw.tum.de/phs2019

JAHRESBERICHT 2018 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

MATHEMATISCHE SIGNAL- UND BILDVERARBEITUNG (MSIP)



Gitta Kutyniok



Martin Burger

Der Fachausschuss MSIP wurde im April 2012 ins Leben gerufen und hat zur Zeit bereits fast 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 www.math.tu-berlin.de/GAMM-MSIP als zentrale Kommunikationsplattform, neben u.a. einem regelmäßigen Newsletter und einem Job-Forum.

Im Jahr 2018 wurden von den Mitgliedern des Fachausschusses folgende Veranstaltungen organisiert:

- Sektion “Mathematical signal and image processing”, Jahrestagung der GAMM 2018. Organisation: F. Kraemer (München) und B. Wirth (Münster).
- MIA 2018, Mathematics and Image Analysis, Berlin, Januar, 2018. Organisation: J.F. Aujol (Bordeaux), J. Fadili (Caen), M. Hintermüller, G. Kutyniok (Berlin), G. Peyre (Paris), G. Plonka-Hoch (Göttingen), G. Steidl (Kaiserslautern).
- Kickoff Workshop NoMADS, Münster, März 2018, Organisation: M. Burger, D. Tenbrinck (Münster).

Im Jahr 2018 fand die größte Konferenz des Gebiets, SIAM Imaging, in Bologna stattfinden. Es ist uns gelungen dafür spezielle Tarife für GAMM-Mitglieder zu verhandeln, die GAMM-MSIP war auf dieser Konferenz dementsprechend breit vertreten, als Sprecher und bei der Organisation von Minisymposien.

Für das Jahr 2019 sind u.a. bereits folgende Aktivitäten geplant:

- SSVM 2019, Hofgeismar, Juni 2019, Organisation: J. Modersitzki, J. Lellmann (Lübeck), M. Burger (Erlangen)
- Sektion “Mathematical signal and image processing”, Jahrestagung der GAMM 2019. Organisation: O. Scherzer, K. Kirisits, G. Mercier (Vienna)
- YR Minisymposium “Mathematical Theory of Deep Learning“, Jahrestagung der GAMM 2019. Organisation: P. Petersen (Berlin), R. Reisenhofer (Bremen).
- Annual Meeting of the GAMM MSIP, TUM Conference Site, April 2019. Organisation: F. Kraemer (München), M. Burger (Erlangen).

Zusätzliche Informationen zu diesen und weiteren Aktivitäten des Fachausschusses sind auf der Seite www.math.tu-berlin.de/GAMM-MSIP zu finden. Bei Interesse laden wir jeden herzlich dazu ein, Mitglied zu werden.

JAHRESBERICHT 2018 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 114 Mitglieder aus 23 Ländern.

Neben seiner Webseite (www.maths.manchester.ac.uk/gamm-anla) hat der Fachausschuss seit Anfang 2016 einen Twitter Account (@gamm_anla) mit aktuell 207 „Followern“. Auf Twitter findet man unter anderem Konferenzankündigungen, Fotos und Berichte unserer Aktivitäten. Jährlich richtet der Fachausschuss einen Workshop mit einem speziellen Fokusthema aus. Der Workshop 2018 fand im Oktober in Lund (Schweden) statt und wurde von Philipp Birken (Universität Lund), Elias Jarlebring (KTH Stockholm) und Claus Führer (Universität Lund) organisiert. Zum Fokusthema „Herausforderungen der Linearen Algebra in der Optimierung“ waren als Hauptvortragende Maya Neytcheva (Universität Uppsala), Anders Forsgren (KTH Stockholm) und Pontus Giselsson (Universität Lund) eingeladen.

Die ANLA-Sektion auf der GAMM Jahrestagung 2018 in München wurde organisiert von Iveta Hnětynková (Karlsuniversität Prag) und Robert Luce (Gurobi Optimization) und verzeichnete eine hohe Beteiligung mit insgesamt 36 Sprecherinnen und Sprechern. Unser neuer GAMM ANLA Blog enthält einen Bericht von John Pearson (Universität Edinburgh) über diese Sektion: <https://gammanla.wordpress.com/2018/03/25/section2018/>.

Volker Mehrmann (TU Berlin) präsentierte auf der GAMM Jahrestagung seinen vom ANLA Fachausschuss vorgeschlagenen Hauptvortrag zum Thema „Hierarchical energy based modeling and numerical simulation for coupled multi-physics and multi-scale systems“. Auch im Jahr 2018 waren Fachausschuss-Mitglieder an der Ausrichtung vieler weiterer Veranstaltungen beteiligt, unter anderem an der SIAM Applied Linear Algebra Conference in Hong Kong.

JAHRESBERICHT 2018 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES UNCERTAINTY QUANTIFICATION (UQ)



Claudia Schillings

Tim Sullivan

Der Fachausschuss Uncertainty Quantification (AGUQ) fördert den wissenschaftlichen Austausch zur Quantifizierung von Unsicherheiten in technisch-wissenschaftlichen Berechnungen und vertritt dieses Fachgebiet innerhalb der GAMM. Die AGUQ zählt aktuell 107 Mitglieder; Mitgliedschaft kann jederzeit beantragt werden per E-Mail an gamm-ug@tu-chemnitz.de.

Vom 03.01.-29.06.2018 fand am Isaac Newton Institute of Mathematical Sciences in Cambridge (UK) unter dem Programmnamen „Uncertainty Quantification for Complex Systems: Theory and Methodologies“ eine umfangreiche Serie wissenschaftlicher Veranstaltungen verbunden mit geförderten längeren Aufenthalten von Wissenschaftlern statt. An der Gesamtleitung sowie der Organisation der Workshops und Seminare wirkten zahlreiche AGUQ-Mitglieder mit.

Vom 12.-14.03.2018 veranstaltete die AGUQ an der TU Dortmund ihren dritten eigenen „Workshop on Uncertainty Quantification“. Neben aktuellen Entwicklungen in UQ bildeten thematische Schwerpunkte mathematische Gebiete, deren Techniken bei der weiteren Entwicklung von UQ eine wichtige Rolle spielen werden, darunter, vertreten durch Hauptvortragende, Homogenisierung (Felix Otto, MPI Leipzig; Jean-Christophe Mourrat, ENS Paris), Informationstheorie (Paul Dupuis, Brown U), Quantenfeldtheorie (Peter Stollmann, TU Chemnitz) und Statistik (Katja Ickstadt, TU Dortmund). Bei der AGUQ-Mitgliederversammlung am 12.03.2018 wurden Claudia Schillings (U Mannheim) und Tim Sullivan (FU Berlin) als neue Sprecher der AGUQ gewählt; sie lösen zum 01.10.2018 die scheidenden Sprecher Oliver Ernst (TU Chemnitz) und Alexey Chernov (U Oldenburg) ab.

Bei der GAMM-Jahrestagung 2018 in München (19.-21.03.2018) war das Thema UQ im Plenarvortrag von Tinsley Oden (UT Austin) „Selection and Adaptation of Computational Models in the Presence of Uncertainty: Predictive Models of Tumor Growth and Random Heterogeneous Materials“ prominent vertreten. Weiterhin fanden in der Sektion 15 „Uncertainty Quantification“, dieses Jahr organisiert von Claudia Schillings und Tim Sullivan, auf 8 Sessions verteilt 35 Vorträge statt.

Bei der Ausrichtung der SIAM Conference on Uncertainty Quantification am 16.-19.04.2018 in Garden Grove, CA (USA) trat wie in Vorjahren die GAMM AGUQ als Kooperationspartner auf. AGUQ Mitglieder erhielten eine Ermäßigung des Tagungsbeitrags und organisierten eine Reihe von Minisymposien, welche diesmal im Tagungsprogramm

ausgewiesen wurden, und AGUQ-Mitglied Fabio Nobile hielt einen Hauptvortrag zum Thema „Multi-level and Multi-index Monte Carlo Methods in Practice“. AGUQ-Mitglied Aretha Teckentrup erhielt den SIAG/Uncertainty Quantification Early Career Prize.

Der nach 2017 zweite Workshop in der Reihe Frontiers of Uncertainty Quantification „FrontUQ18: UQ in Subsurface Environments“ in Pavia (05.-07.09.2018) führte Mathematiker und Geowissenschaftler zu Vorträgen und regen Diskussionen zusammen zu Anwendungen wie Standortbewertung Geothermie, Charakterisierung von Grundwasserleitern, hydraulisches Fracking, elektromagnetische Erkundung, Strömung in geklüfteten Medien und seismische Wellenausbreitung. Hierbei wurde deutlich, dass in der mathematischen Community entwickelte UQ-Methoden in den Geowissenschaften auf großes Interesse stoßen und bereits vielfältig angewandt werden.

Termine in 2019

- GAMM Jahrestagung 2019 in Wien (18.-22.02.2019) Sektion 15 Uncertainty Quantification geleitet durch Hanno Gottschalk (U Wuppertal) und Claudia Schillings (U Mannheim); Als Hauptredner haben bereits zugesagt Andrea Barth (U Stuttgart) und Raul Tempone (KAUST).
- FrontUQ19: Frontiers of Uncertainty Quantification in Fluid Dynamics, 11.-13.09.2019 in Pisa (It), in Kooperation mit ERCOFTAC.

FrontUQ19

Pisa, 11-13 September, focus on **Fluid Dynamics**

<https://frontuq19.wordpress.com/> (some sections still under construction)



Sponsors

- Università di Pisa
- Ercofac
- GAMM-UQ AG
- CNR-IMATI

Local Organizers

- Maria Vittoria Salvetti, U. Pisa
- Lorenzo Tamellini, CNR-IMATI
- Didier Lucor, CNRS-LIMSI
- Oliver Ernst, T.U. Chemnitz
- Claudia Schillings, U. Mannheim

Invited speakers

- George Karniadakis, Brown U.
- Siddhartha Mishra, ETH Zürich
- Gianluca Iaccarino, Stanford U.
- Vincent Heuveline, U. Heidelberg
- Emilio F. Campana, CNR-INSEAN



JAHRESBERICHT 2018 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES
**COMPUTATIONAL SCIENCE
 AND ENGINEERING (CSE)**



Andrea Walther



Oliver Röhrle



Matthias Bolten

Der Fachausschuss „Computational Science and Engineering“ wurde 2012 gegründet und widmet sich der immer stärker werdenden Verknüpfung von Mathematik, Ingenieur- bzw. Naturwissenschaften und Informatik bei der Simulation von anwendungsrelevanten Problemen. Aus diesem Grund stammen die derzeit über 90 vollen und assoziierten Mitglieder des Fachausschusses aus verschiedenen Disziplinen.

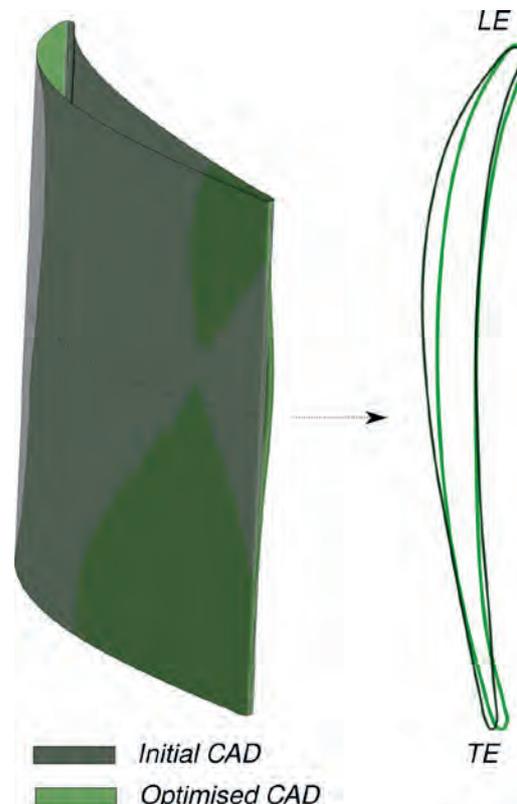
Der Begriff „Computational Science and Engineering“ oder kurz „CSE“ bezeichnet dabei in einem umfassenden Sinn die Simulationswissenschaften, bei denen Modellierung, numerische Approximation, Algorithmen und Software eng miteinander verzahnt werden. Die Anwendungsfelder, in denen CSE-Methodik Verwendung findet, sind vielfältig. Sie reichen von industrierelevanter ingenieurwissenschaftlicher Forschung bis hin zu naturwissenschaftlich orientierter Grundlagenforschung. In diesem Jahr wurde von Ulrich Rüde, einem der Gründungsmitglieder des Fachausschusses, und Co-Autoren der Bericht „Research and Education in Computational Science and Engineering“ (SIAM Rev., 60(3), 797-754) veröffentlicht, zu dem auch weitere Mitglieder des Fachausschusses beigetragen haben. Der Bericht stellt die Herausforderungen, Möglichkeiten und Richtungen von Forschung und Lehre im Bereich CSE dar.

Auf der 89. Jahrestagung der GAMM in München war der Fachausschuss in diesem Jahr mit einem Minisymposium vertreten, das vom Fachausschuss CSE organisiert wurde. Dieses hatte den Titel „High-Performance Computing for Continuum Mechanics Problems“ und es präsentierte die Zusammenarbeit zwischen Wissenschaftlern aus den Ingenieurwissenschaften und der Mathematik zur Lösung von Problemen aus der Mechanik. Das Minisymposium war damit in gleichem Maße für Ingenieurinnen und Ingenieure sowie für Mathematikerinnen und Mathematiker interessant und entsprechend gut besucht.

Der Workshop des Fachausschusses fand dieses Jahr am 29. und 30. November an der Universität Siegen statt. Er wurde von Christian Hesch und Sabine Roller organisiert. Der Schwerpunkt war die Zusammenarbeit in CSE, bei der komplementäre Expertise in den Ingenieurwissenschaften, der Modellierung, der Simulation und im Hochleistungsrechnen zusammengebracht werden. Das Jahr 2019 beginnt mit der SIAM CSE Konferenz in Spokane, Washington, bei welcher der GAMM Fach-

ausschuss kooperiert. Im Programmkomitee der Tagung wirkt Andrea Walther mit. An dieser Konferenz werden wieder eine Reihe von Mitgliedern des Fachausschusses teilnehmen, so dass wie bei den letzten SIAM CSE Konferenzen ein Mitgliedertreffen geplant ist. Die Kooperation des Fachausschusses mit der SIAM Activity Group gleichen Namens wird durch Beteiligung an der Planung der Tagung im Jahr 2021 fortgesetzt.

Auch dieses Jahr wird wieder ein Workshop des Fachausschusses stattfinden. Zeit und Ort des Workshop werden noch per Email und auf den Webseiten des Fachausschusses bekannt gegeben. Die Adresse der Webseiten lautet:
<http://www.uni-stuttgart.de/gamm/fa-cse>.



Vergleich der initialen und der optimierten Schaufelgeometrie für den TU Berlin TurboLab Stator; Shape Optimierung basierend auf einer komplett mit AD differenzierten Design-Kette; Ergebnis des EU Projekts IODA Vergleich

JAHRESBERICHT 2018 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES PHASENFELDMODELLIERUNG



Laura DeLorenzis



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 Phasenfeldmodellierung wurden am 8.2.-9.2.2018 auf dem „5th GAMM Workshop on Phase Field Modeling“ in Dresden präsentiert und diskutiert. Das Seminar wurde von Herrn Prof. Markus Kästner (TU Dresden) organisiert. Ein Band der GAMM-Mitteilungen, der den Fokus auf gekoppelte und mehrskalige Phasenfeldmodellierungsansätze legt, ist im Laufe des Jahres erschienen (Vol. 40 No. 2, Dez. 2017). Auf der GAMM-Jahrestagung 2018 in München hat Frau Prof. Laura De Lorenzis (TU Braunschweig) zum The-

ma Phasenfeldmodellierung in der Bruchmechanik einen Hauptvortrag gehalten.

Im Rahmen des „13th World Congress in Computational Mechanics“, New York, USA, 22.-27.7.2018 wurde ein Minisymposium zum Thema „Advances in Phase-Field Modelling of Fracture“ von Frau Prof. De Lorenzis und Herrn Prof. Ralf Müller (TU Kaiserslautern) zusammen mit Herrn Prof. Blaise Bourdin (USA) und Herrn Prof. Corrado Maurini (Frankreich) organisiert.

Der „6th GAMM Workshop on Phase Field Modeling“ wird von Frau Prof. Britta Nestler und Herrn Dr. Daniel Schneider (KIT) am 7.-8.2.2019 in Karlsruhe veranstaltet.

Termin 2019:

7.-8.2.2019, Karlsruhe, 6th GAMM Workshop on Phase Field Modeling

JAHRESBERICHT 2018 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES DATA-DRIVEN MODELING AND NUMERICAL SIMULATION OF MICROSTRUCTURED MATERIALS (AG DATA)



Benjamin Klusemann



Stefan Diebels



Felix Fritzen

Die AG Data hat 2018 ihre Arbeit erfolgreich fortgesetzt und weiter ausgebaut. Hauptaktivität war der Workshop „Challenges and Perspectives in Data-driven modeling“, der von Benjamin Klusemann (Leuphana Universität Lüneburg, Helmholtz-Zentrum Geesthacht) und Felix Fritzen (Universität Stuttgart) am 3.-4. Mai organisiert wurde. Der Workshop wurde sowohl an der Leuphana Universität wie auch am Helmholtz-Zentrum durchgeführt. Die Besichtigung experimenteller Anlagen ergänzte das Programm.

Die Zielsetzung der verstärkten Kooperation mit der Deutschen Gesellschaft für Materialkunde e.V. (DGM) wurde durch die Teilnahme von AG DATA Vertretern am DGM Arbeitskreis Mikrostrukturmechanik realisiert. Des Weiteren waren beim AG DATA Workshop mehrere DGM Vertreter aktiv beteiligt, u. a. der Vorsitzende der DGM Prof. A. Hartmaier (Ruhr-Universität Bochum) und Prof. S. Sandfeld (TU

Bergakademie, Sprecher DGM AK 3D Data Science). Das DGM Strategiepapier „Digitale Transformation in der Materialwissenschaft und Werkstofftechnik“ wurde vorgestellt und an die Mitglieder der AG DATA verteilt. Die Thematik der Datennutzung und -bereitstellung wurde intensiv diskutiert. Die Vernetzung der AG DATA mit den entsprechenden DGM AK soll fortgesetzt und vertieft werden.

Das Amt als Sprecher hat Stefan Diebels an Benjamin Klusemann übergeben. Die Bestätigung des Sprecherwechsels erfolgte ohne Enthaltungen und Gegenstimmen bei der Sitzung des Fachausschusses in Lüneburg/Geesthacht.

Der nächste Workshop der AG DATA findet am 6. und 7. Mai 2019 an der RWTH Aachen statt und wird von Stefanie Reese und ihren Team organisiert. Weitere Details werden zeitnah auf der AG Data Homepage bekannt gegeben.

<http://www.mechbau.uni-stuttgart.de/EMMA/ag-data>

JAHRESBERICHT 2018 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

STOCHASTISCHE OPTIMIERUNG IN DER TECHNIK



Thomas Vietor

Von Mitgliedern des Ausschusses wurden 2 Konferenzen in 2018 durchgeführt.

1. Faszination Hybrider Leichtbau, 29.-30.05.2018

Der Leichtbau gilt besonders in der Fahrzeugindustrie als Schlüsseltechnologie bei der Entwicklung hin zu einer nachhaltigen und ressourcenschonenden Mobilität. Die Fahrzeughersteller agieren dabei in einem Spannungsfeld aus Kundenwünschen, Wettbewerb und Gesetzgebung. Besonders hybride Strukturen, die die Vorteile unterschiedlicher Werkstoffe (z.B. faserverstärkte Kunststoffe und Metalle) in sich vereinen, weisen ein hohes Potenzial zur Gewichtsminimierung bei gleichzeitiger Erweiterung der Bauteilfunktionalität auf. Der zukünftige effiziente Einsatz funktionsintegrierter Hybridstrukturen im Fahrzeugbau erfordert wesentliche Innovationen in der Fahrzeugentwicklung und in der Fertigungstechnologie. Ein großer Bedarf besteht insbesondere hinsichtlich neuer Methoden und Technologien für einen „bezahlbaren“ Leichtbau in der Großserie unter Berücksichtigung der steigenden Anforderungen hinsichtlich Variantenvielfalt, Sicherheit und Qualität. Neue Methoden und Technologien für die Entwicklung und Fertigung funktionsorientierter, hybrider und serienfähiger Leichtbaulösungen im Fahrzeugbau sowie der Erfahrungsaustausch zwi-

schen Experten aus der Industrie und Wissenschaft stehen aus diesen Gründen im Zentrum der Tagung. Die Beiträge werden in einem Tagungsband veröffentlicht.

2. Advanced Vehicle Energy Concepts and Structures for China (AVECS)

6th Joint Symposium, Ort: University of Salerno, Italy, Sep. 13-14th, 2018, mit Beteiligung der Tongji Universität, Shanghai, China, der University of Ontario, Canada und Politecnico di Salerno, Italy. Teilnahme von ca. 25 Forschern aus den beteiligten Universitäten.

Wesentliche Publikationen:

Zu der im Jahr 2017 organisierten und durchgeführten WCSMO12 wurde publiziert:

Schumacher, A., Vietor, Th., Fiebig, S., Bletzinger, K.-U., Maute, K. (Eds.): „Proceedings of the 12th World Congress of Structural and Multidisciplinary Optimisation“, Springer International Publishing, 2018, ISBN 978-3-319-67987-7.

Es erschienen 6 Publikationen von Mitgliedern des GAMM-FA mit direktem Bezug zum Fachausschuss.

Geplante Konferenzen und Mini-Symposien:

Für die GAMM-Konferenz 2019 wurde die Durchführung eines Minisymposiums erfolgreich beantragt und durch die GAMM bewilligt.

JAHRESBERICHT 2018 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

EXPERIMENTELLE FESTKÖRPERMECHANIK



Stefan Hartmann



Stefan Diebels

Der GAMM-Fachausschuss Experimentelle Festkörpermechanik hat das Ziel der Kommunikation über experimentelle Methoden und deren Auswertung zur Modellierung, Kalibrierung und Validierung von Materialeigenschaften. Nach der konstituierenden Sitzung in 2017 in Stuttgart sind die Diskussionen über Themengebiete in Kassel im Mai 2018 fortgesetzt worden. Neue Mitglieder sind hinzugekommen. Die wesentlichen Themenschwerpunkte des Fachausschusses liegen in der experimentellen Untersuchung und Charakterisierung, der Neuentwicklung bzw. Untersuchung der erforderlichen Messtechnik, der

Identifikation von Materialparametern konstitutiver Materialmodelle aus erforderlichen experimentellen Daten sowie der Entwicklung von Validierungsexperimenten. Auf der GAMM-Tagung in München 2018 ist hierzu ein Minisymposium organisiert worden, welches eine unerwartet große Anzahl an Hörern hatte. Zudem sind zwei Issues in den GAMM-Mitteilungen entstanden, die in 2018 veröffentlicht wurden. Für 2019 sind zudem Kontakte zu ausländischen Kollegen geplant, um sich spezielle Kenntnisse in optischen Messmethoden anzueignen.

JAHRESBERICHT 2018 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES MODELLIERUNG, ANALYSIS UND SIMULATION MOLEKULARER SYSTEME



Benjamin Stamm



Gero Friesecke



Reinhold Schneider

Der 2017 ins Leben gerufene Fachausschuss beschäftigt sich mit der mathematischen Analyse, numerischen Simulation und Implementierung von Modellen molekularer Systeme auf allen relevanten Längenskalen von Ångström bis Meter.

Eine zentrale Funktion unseres Fachausschusses ist die eines Kommunikationsforums, über das sich mathematisch interessierte Wissenschaftler im riesigen und typischerweise außerhalb der Mathematik angesiedelten interdisziplinären Gebiets der molekularen Systeme austauschen und vernetzen können. Im deutschsprachigen Raum sind wir das einzige solche Forum und z.B. im anglo-amerikanischen gibt es kein Analogon. Die online-Rubriken auf unserer Website, z.B. Tagungsankündigungen und Job-Ausschreibungen, wurden bereits unmittelbar nach unserer Gründung rege von der Community genutzt. Zudem wollen wir Nachwuchswissenschaftlern Sichtbarkeit und Organisation bieten, um sich in diesen neuen Forschungsgebieten der Mathematik zu etablieren. Mitglieder des Fachausschusses waren auch selbst als Tagungsorganisatoren aktiv. Um einige Beispiele zu nennen:

- Mathematical Methods in Quantum Chemistry, Oberwolfach, 19.-23.3.2018 (Organisatoren: Gero Friesecke, TUM; Eric Cancès, Ecole des Ponts, Paris; Trygve Ulf Helgaker, Centre for Theoretical and Computational Chemistry, Oslo; Lin Lin, Department of Mathematics, University of California, Berkeley)
- Frontiers of coarse graining in molecular dynamics, Zuse-Institut Berlin, 23.-25.7.2018 (Organisatoren:

Andreas Bittracher, Ralf Banisch, Péter Koltai, Stefan Klus; Free University of Berlin)

- Franco-German Workshop on Mathematical Aspects in Computational Chemistry 2018, Aachen, 10.-12.9.2018 (Organisatoren: Yvon Maday, Pierre Monmarché, Sorbonne Université; Benjamin Stamm, RWTH Aachen University)
- Integrating Molecular Simulation with Machine Learning/Artificial Intelligence for Advance Material Design (Organisatoren: Frank Noe, FU Berlin; Siewert-Jan Marrink, Faraji Shirin, Niels Taatgen, Groningen)

Das Jahrestreffen unserer Fachgruppe fand am 25./26. Oktober am Zuse-Institut in Berlin statt. Neben Vorträgen von Mitgliedern des Fachausschusses gab es Keynote-Vorträge eminenten eingeladenen Sprecher aus folgenden drei Bereichen:

- Hochakkurate Elektronenstrukturberechnungen (Simen Kvaal, Centre for Theoretical and Computational Chemistry, Oslo),
- Molekulardynamische Simulation komplexer biochemischer Systeme (Frank Noe, FU Berlin),
- Quanteninformationstheoretische Methoden in der Simulation quantenchemischer und quantenoptischer Systeme (Ors Legeza, Wigner Institute, Budapest).

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

JAHRESBERICHT 2018 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES COMPUTATIONAL BIOMECHANICS



Oliver Röhrle



Tim Ricken

In der Vorstandssitzung der GAMM Jahrestagung 2018 in München wurde der Fachausschuss „Computational Biomechanics“ genehmigt. Ziel des Ausschusses ist es, die wissenschaftlichen Aktivitäten der GAMM im Bereich der Kontinuumsbiomechanik zu bündeln und damit zu stärken. Wir verfolgen mit dem Fachausschuss drei wesentliche Schwerpunkte:

- 1) Austausch existierender biomechanischer Methoden und Validierungsdaten
- 2) Kopplung bereits existierender mehrskaliger Modelle mit dem Ziel einer möglichst ganzheitlichen Beschreibung biologischer Systeme
- 3) Ausnutzung der vorhandenen Infrastruktur an Hochleistungsrechnern

Als erste Initiative des Fachausschusses wurde bei der DFG die Einrichtung eines Schwerpunktprogramms (SPP) mit dem Thema „Robuste kontinuumsbiomechanische in silico Modelle aktiver biologischer Systeme als Vorstufe für klinische Applikationen“ bean-

tragt. Initiatoren sind Rainer Bader (Rostock), Silvia Budday (Erlangen), Axel Klawonn (Köln), Tim Ricken und Oliver Röhrle (beide Stuttgart). Ziel des SPP ist es, die vorhandenen methodischen Grundlagen als Schlüsselqualifikationen soweit zu ertüchtigen, dass die entwickelten Modelle so weiterentwickelt werden können, dass diese auch in der klinischen Praxis eingesetzt werden können.

Als weitere Aktivitäten wird sich der Fachausschuss „Computational Biomechanics“ im Rahmen der kommenden GAMM-Jahrestagung in Wien zu einer Mitgliederversammlung treffen. Außerdem planen wir für Mitte 2019 einen zweitägigen Workshop des Fachausschusses.

Jeder ist recht herzlich eingeladen, sich aktiv in dem Fachausschuss zu beteiligen. Bei Interesse senden Sie bitte eine kurze Email an die Sprecher des Fachschusses, sodass wir einen entsprechenden Email-Verteiler aufsetzen können.

JAHRESBERICHT 2018 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES NUMERISCHE ANALYSIS



Lars Grasedyck



Daniel Peterseim

Der Fachausschuss Numerische Analysis möchte die Entwicklung moderner Methoden für die numerische Simulation in Ingenieuranwendungen aus der Mathematik heraus vorantreiben und die bestehenden Brücken zwischen diesen Disziplinen stärken. Der 2017 neugegründete Ausschuss sieht sich in der Tradition früherer Fachausschüsse zur Numerik partieller Differentialgleichungen. Zu den inhaltlichen Schwerpunkten zählen mehrskalige und selbstadaptive Methoden, numerische und algorithmische Modellierung sowie hochdimensionale und unscharfe Probleme.

Zur Steigerung der Sichtbarkeit fand in diesem Jahr erneut ein Workshop (Augsburg, 10.-12.10.2018) statt, der die obigen Themenfelder in ihrer Breite erfolgreich abbildete. Unter Einbindung der GAMM-Junioren, wurde in diesem Rahmen ein Schnellkurs über Raum-Zeit-Diskretisierungen organisiert. Zu den weiteren er-

folgreichen Nachwuchsförderungsmaßnahmen zählt der von Robert Altmann (Augsburg) und Jan Heiland (Magdeburg) initiierte Nachwuchs-Workshop „Analysis and Numerical Approximation of Constrained Systems“ in den Räumlichkeiten der Kurt-Bösch-Stiftung (Sion/Schweiz, 15.-21.4.2018). Darüber hinaus haben wir die Einrichtung einer interdisziplinären GAMM-Nachwuchsgruppe in Augsburg unterstützt, die die Etablierung solcher Nachwuchs-Workshops in den kommenden Jahren vorantreiben soll.

Für das Jahr 2019 ist neben solchen Nachwuchsaktivitäten ein Ausschuss-Treffen im Rahmen unseres Workshops zur Numerischen Analysis (Essen, 11.-12.9.2019) geplant.

Für aktuelle Information 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 2019

90. GAMM Jahrestagung in Wien
 18.-22.02.2019
<http://jahrestagung.gamm-ev.de/index.php/2019/90th-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
<http://www.maths.manchester.ac.uk/gamm-anla/>

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

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 Hein

GAM MITGLIED WERDEN!



90th Annual Meeting

of the International Association of
Applied Mathematics and Mechanics

February 18-22, 2019

Vienna, Austria



LOCAL ORGANIZERS:

Josef Eberhardsteiner (TU Wien)

Joachim Schöberl (TU Wien)

PLENARY SPEAKERS:

Dwight Barkley (University Warwick)

Peter Betsch (KIT Karlsruhe)

Dieter Bothe (TU Darmstadt)

Daniel Cremers (TU München)

Christian Hellmich (TU Wien)

Dennis Kochmann (ETH Zürich)

Robert Scheichl (University Bath)

Barry Smith (Argonne National Laboratory, Chicago)

AUSSCHREIBUNG DES RICHARD-VON-MISES-PREISES DER GAMM 2020

CALL FOR NOMINATIONS FOR THE RICHARD VON MISES PRIZE OF THE INTERNATIONAL ASSOCIATION OF APPLIED MATHEMATICS AND MECHANICS (GAMM) 2020

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-Preisträger*innen 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 2019.

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

M. Oberlack, Darmstadt (2019 – 2024)
 R. Lammering, Hamburg (2017 – 2022)
 F. F. Otto, Leipzig (2017 – 2022)
 C. Wieners, Karlsruhe (2017 – 2022)

Präsidentin der GAMM
 Heike Faßbender,
 Braunschweig (Vorsitz) (2017-2019).

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, 2019.

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

Präsidentin: **Prof. Heike Faßbender**
 Technische Universität Braunschweig,
 Institut Computational Mathematics,
 AG Numerik, Universitätsplatz 2
 38106 Braunschweig

Vizepräsident: **Prof. Wolfgang Ehlers**
 Universität Stuttgart, Institut für
 Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl II,
 Pfaffenwaldring 7, 70569 Stuttgart

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**
 Universität Paderborn, Lehrstuhl für
 Mathematik und ihre Anwendungen,
 Institut für Mathematik,
 Warburger Str. 100
 33098 Paderborn

Weitere Mitglieder des Vorstandsrates

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

Prof. Günter Brenn
 Technische Universität Graz
 Institut für Strömungsdynamik und Wärmeübertragung
 Inffeldgasse 25/F, A-8010 Graz

Prof. Josef Eberhardsteiner
 Technische Universität Wien, Institut für Mechanik der
 Werkstoffe und Strukturen,
 Karlsplatz 13, 1040 Wien, Österreich

Prof. Christoph Egbers
 Brandenburgische Technische Universität Cottbus
 Fakultät Maschinenbau, Elektrotechnik und
 Wirtschaftsingenieurwesen, Institut für Verkehrstechnik
 Siemens-Halske-Ring 14, 03046 Cottbus

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

Prof. Axel Klawonn
 Universität zu Köln,
 Mathematisches Institut,
 Weyertal 86-90, 50931 Köln

Prof. Gitta Kutyniok
 Technische Universität Berlin
 Institut für Mathematik,
 Straße des 17. Juni 136, 10623 Berlin

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

Prof. Sigrid Leyendecker
 Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg
 Lehrstuhl für Technische Dynamik,
 Haberstraße 1, 91058 Erlangen

Prof. Udo Nackenhorst
 Leibniz Universität Hannover
 Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik
 Appelstraße 9a, 30167 Hannover

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

Prof. em. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E.h. mult. Dr. h.c. Oskar Mahrenholtz
 Technische Universität Hamburg-Harburg
 Institut für Mechanik und Meerestechnik
 Eißendorfer Straße 42, 21071 Hamburg

Prof. em. Dr. rer. nat. Reinhard Mennicken
 Universität Regensburg NWF I / Mathematik
 93053 Regensburg

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. Klaus Kirchgässner (2011)
† 09. Juli 2011

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

Prof. Dr.-Ing. Erwin Stein (2011)

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

Prof. Dr.-Ing. Jürgen Zierep (1999)

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

Prof. Dr.-Ing. Oskar Mahrenholtz (1997)

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

PERSONALIA

Todesfälle, wir gedenken:

Prof. Dr. Helge Bergander, Dresden
Prof. Dr. Wolfgang Bühning, Heidelberg
Prof. Dr. Robert Goldstein, Moskau
Prof. Dr. Rudolf Gorenflo, Berlin
Prof. Gerhard Gruber, Dieburg

Prof. Dr. Werner Krabs, Darmstadt
Prof. Alexander Vladimirovich Manzhurov, Moskau
Prof. Vladimir Palmov, St. Petersburg
Dr. Calin Vamos, Cluj-Napoca
Prof. Dr. Peter Werner, Stuttgart
Prof. Karl Josef Witsch, Essen



SIAM Journals

Bringing you the latest in applied mathematics and computational science research.



SIAM Review

Desmond Higham, *University of Strathclyde*
ISSN 1095-7200 (electronic) / 0036-1445 (print)
Published quarterly / Electronic and print



SIAM Journal on Applied Algebra and Geometry

Bernd Sturmfels, *University of California, Berkeley*
ISSN 2470-6566 / Electronically published continuously



SIAM Journal on Applied Dynamical Systems

Evelyn Sander, *George Mason University*
ISSN 1536-0040 / Electronically published continuously



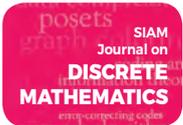
SIAM Journal on Applied Mathematics

Paul A. Martin, *Colorado School of Mines*
ISSN 1095-712X (electronic) / 0036-1399 (print)
Electronically published continuously / Electronic and print



SIAM Journal on Computing

Robert Krauthgamer, *Weizmann Institute of Science*
ISSN 1095-7111 (electronic) / 0097-5397 (print)
Electronically published continuously / Electronic and print



SIAM Journal on Control and Optimization

George Yin, *Wayne State University*
ISSN 1095-7138 (electronic) / 0363-0129 (print)
Electronically published continuously / Electronic and print



SIAM Journal on Discrete Mathematics

Daniel Kral, *University of Warwick*
ISSN 1095-7146 (electronic) / 0895-4801 (print)
Electronically published continuously / Electronic and print



SIAM Journal on Financial Mathematics

Jean-Pierre Fouque, *University of California, Santa Barbara*
ISSN 1945-497X / Electronically published continuously



SIAM Journal on Imaging Sciences

Michael Elad, *Technion - Israel Institute of Technology*
ISSN 1936-4954 / Electronically published continuously



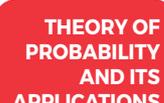
SIAM Journal on Mathematical Analysis

Robert Lipton, *Louisiana State University*
ISSN 1095-7154 (electronic) / 0036-1410 (print)
Electronically published continuously / Electronic and print



SIAM Journal on Matrix Analysis & Applications

Daniel B. Szyld, *Temple University*
ISSN 1095-7162 (electronic) / 0895-4798 (print)
Electronically published continuously / Electronic and print



SIAM Journal on Numerical Analysis

Angela Kunoith, *Universität zu Köln*
ISSN 1095-7170 (electronic) / 0036-1429 (print)
Electronically published continuously / Electronic and print

SIAM Journal on Optimization

Stephen J. Wright, *University of Wisconsin*
ISSN 1095-7189 (electronic) / 1052-6234 (print)
Electronically published continuously / Electronic and print

SIAM Journal on Scientific Computing

Jan S. Hesthaven, *Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne*
ISSN 1095-7197 (electronic) / 1064-8275 (print)
Electronically published continuously / Electronic and print

SIAM/ASA Journal on Uncertainty Quantification

Andrew Stuart, *Caltech*
Peter Challoner, *University of Exeter*
ISSN 2166-2525 / Electronically published continuously

Multiscale Modeling & Simulation

Jack Xin, *University of California, Irvine*
ISSN 1540-3467 (electronic) / 1540-3459 (print)
Electronically published continuously / Electronic and print

Theory of Probability and Its Applications

Translation edited by Michael Reyz
ISSN 1095-7219 (electronic) / 0040-585X (print)
Published quarterly / Electronic and print

SIAM Journal on Mathematics of Data Science

SIAM'S
NEWEST
JOURNAL

Tamara G. Kolda, *Sandia National Laboratories*
ISSN 2577-0187 / Volume 1 to publish in 2019 /
Electronic
Submit: simods.siam.org
Info: journals.siam.org/simods

epubs.siam.org

Online access with print subscription available at additional cost. Institutional subscribers must access journals by IP address, and must complete and return an Online Journal Subscription Agreement.

View recently posted articles at:

siam.org/recent-articles

Subscribe to SIAM journals:

siam.org/subscriptions-and-ordering-information