

AUS DEM INHALT:

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

HOLGER STEEB:
FORMGEDÄCHTNISPOLYMERE: DER EINFLUSS
VON FEUCHTIGKEIT AUF DAS MECHANISCHE UND
DAS FUNKTIONALE VERHALTEN

ANDREAS GRIEWANK AND ANDREA WALTHER:
NONSMOOTH OPTIMIZATION: BETWEEN
ANALYSIS AND COMBINATORICS

JUNGE WISSENSCHAFTLER:
MARTIN DIEHL
CHRISTOPH LEHRENFELD

RICHARD-VON-MISES-PREIS 2020
GAMM-NACHWUCHSGRUPPEN

2/2020

www.gamm-ev.de

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

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

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

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

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

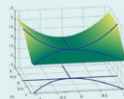
ISSN 2196-3789



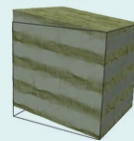
4 Formgedächtnispolymere: Der Einfluss von Feuchtigkeit auf das mechanische und das funktionale Verhalten
 von Holger Steeb



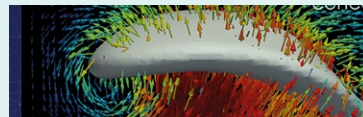
11 Nonsmooth Optimization: Between Analysis and Combinatorics
 by Andreas Griewank and Andrea Walther



23 Steckbrief Martin Diehl



25 Steckbrief Christoph Lehrenfeld



28 SAMM 2020 - Modelle aus Daten lernen: Modellreduktion, SYSTEMIDENTIFIKATION und maschinelles Lernen
 von Carmen Grässle und Petar Mlinarić

31 Jahresberichte 2020 der GAMM-Nachwuchsgruppen

31 U Stuttgart
 Von Henrik Ebel, Lena Lambers und Renate Sachse

31 TU Berlin
 von Daniel Bankmann und Felix Black

32 KIT
 von Fabian Castelli, Alexander Dyck und Tunc Yüzbasıoglu

32 TU Dortmund
 von Henning Lammen, Tobias Kaiser und Tillmann Wiegold

33 U + TU Hamburg
 Von Christiane Schmidt

33 TU Chemnitz
 von Dominik Alfke und Alexandra Bünger

34 U Ulm
 von Lucas Engelhardt

34 U Augsburg
 von Roland Maier und David Wiedemann

36 Alexander-von-Humboldt Forschungspreis an Prof. Tarek I. Zohdi, UC Berkeley
 von Alexander Schwarz

37 Links zu Fachausschüssen und weiteren Organisationen

38 GAMM 2020 in Kassel
 Von Detlef Kuhl, Andreas Meister, Andreas Ricoeur und Olaf Wünsch

40 Bericht aus der GAMM
 von Michael Kaliske

41 Nachruf Prof. Dr.-Ing. Oskar Mahrenholtz (1931 – 2020)
 von Edwin Kreuzer

42 Richard-von-Mises-Preis 2020
 PD Dr. Elisa Davoli
 Dr.-Ing. Fadi Aldakheel

44 Aufruf: Nachwuchs-Minisymposien

45 Aufruf: Wahlen zum Vorstandsrat

46 Vorstand der GAMM

47 Ehrenmitglieder der GAMM



LIEBE LESERIN, LIEBER LESER,

LIEBE GAMM-MITGLIEDER,



in der zweiten Ausgabe des Rundbriefes erscheint üblicherweise ein Rückblick auf die GAMM Jahrestagung. Der noch andauernden, besonderen Situation geschuldet, konnten die Jahrestagung sowie zahlreiche andere wissenschaftliche Veranstaltungen nicht stattfinden. Das GAMM 2020 Organisationsteam aus Kassel rekapituliert dennoch in einem kurzen Bericht die speziellen Randbedingungen rund um die Absage der Veranstaltung und den damit verbundenen Stimmungen und blickt optimistisch auf die auf 2021 verschobene Jahrestagung in Kassel.

Im ersten Leitartikel mit dem Titel „Formgedächtnispolymere: Der Einfluss von Feuchtigkeit auf das mechanische und das funktionale Verhalten“ widmet sich Holger Steeb aus Stuttgart der Programmierfähigkeit von bestimmten Polymeren. Auf Basis eines komplexen Wechselspiels thermo-mechanischer Felder können hier bestimmte Deformationszustände aufgeprägt und durch Erreichen bestimmter Temperaturen wieder abgerufen werden. Neuen Erkenntnissen zufolge kommt es infolge Flüssigkeitsaufnahme zu einer chemischen Veränderung und daraus resultierenden „Alterung“. Diese wiederum hat signifikanten Einfluss auf die funktionalen Eigenschaften. In dem Artikel werden Aspekte der Modellierung sowie experimentellen Charakterisierung für die Analyse und computergestützte Vorhersage dieser Materialien unter Berücksichtigung der chemo-mechanischen Prozesse erläutert.

Der zweite Leitartikel von Andreas Griewank und Andrea Walther trägt den Titel „Nonsmooth optimization: between analysis and combinatorics“. In der Optimierungstheorie wird meist vorausgesetzt, dass die Kostenfunktion gewisse Differenzierbarkeitseigenschaften hat. In der Praxis sind diese aber nicht immer gegeben. Ein aktuelles Anwendungsbeispiel findet sich im maschinellen Lernen, wenn stetige, aber nicht-differenzierbare Aktivierungsfunktionen verwendet werden. In diesem Artikel werden verschiedene Aspekte der nicht-glaten Optimierung behandelt.

Es stellen sich wieder zwei Nachwuchswissenschaftler mit ihren Forschungsthemen vor: Herr Martin Diehl, Projektgruppenleiter am Max-Planck Institut für Eisenforschung und nun Professor für Computational Materials Sciences in Leuven, und Herr Christoph Lehrenfeld, derzeit Juniorprofessor bald W2-Professor an der Georg-August-Universität Göttingen, vor.

Die Aktivitäten der GAMM-Nachwuchswissenschaftler werden in kurzen Berichten dargestellt. Über die im Sommer 2020 stattgefundene GAMM-Junioren-Sommerschule (SAMM) zu Modellreduktion, Systemidentifikation und maschinellem Lernen berichten Carmen Grässle und Petar Mlinaric. Die Arbeit der verschiedenen GAMM-Nachwuchsgruppen ist in den Jahresberichten erläutert.

Herzlich gratulieren wir den diesjährigen Richard-von-Mises-Preisträgerinnen und -Preisträgern Frau Elisa Davoli aus Wien und Herrn Fadi Aldakheel aus Hannover.

Weiterhin gratulieren wir dem Träger des Alexander-von-Humboldt-Forschungspreises, Tarek Zohdi von der University of California, Berkeley.

Dem 2020 verstorbenen GAMM-Ehrenmitglied Herrn Universitätsprofessor Oskar Mahrenholtz gedenkt der Kollege Edwin Kreuzer in einem Nachruf.

Wir bedanken uns herzlich bei den Autorinnen und Autoren für Ihre Beiträge. Für weitere Anregungen zur Gestaltung des GAMM-Rundbriefes und die Einsendung von Beiträgen schicken Sie bitte eine E-Mail an axel.klawonn@uni-koeln.de (Mathematik) oder daniel.balzani@rub.de (Mechanik). Insbesondere sind in diesem Zusammenhang Berichte zu Gewinnern renommierter Preise wie dem Alexander-von-Humboldt Forschungspreis (siehe diese Ausgabe) erwünscht.

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

Bochum und Köln im August 2020

Daniel Balzani und Axel Klawonn

FORMGEDÄCHTNISPOLYMERE: DER EINFLUSS VON FEUCHTIGKEIT AUF DAS MECHANISCHE UND DAS FUNKTIONALE VERHALTEN

VON HOLGER STEEB

Bei einer speziellen Klasse von Polymerwerkstoffen kann durch die Variation physikalischer Parameter während einer sogenannten Programmierphase ein ausgeprägter Formgedächtniseffekt eingestellt oder „programmiert“ werden.

Polymere, bei denen dieser Formgedächtniseffekt besonders ausgeprägt ist, werden auch als Formgedächtnispolymere (Shape Memory Polymers – SMP) bezeichnet (17). Ist der Formgedächtniseffekt (Shape Memory Effect – SME) thermisch, also durch eine spezielle Wärmebehandlung induziert, so erinnert sich die „programmierte“ Polymerprobe an ihre ursprüngliche Geometrie in dem man die Probe über eine kritische Temperatur, die so genannte Schalt- oder Glasübergangstemperatur (Θ_g oder Θ_{sw}), erwärmt. Die Formgedächtniseigenschaften dieser thermisch ansprechbaren Polymere lassen sich durch einen Phasenübergang erklären; unterhalb der Schalttemperatur Θ_{sw} befindet sich das Polymer in einem Glas- oder semikristallinen Zustand; oberhalb der Schalttemperatur Θ_{sw} lässt sich das Polymer durch einen entropie- oder gummielastischen Zustand charakterisieren. Im Glaszustand ist die Mobilität der einzelnen Polymerketten durch kristalline Domänen oder durch die Abnahme des freien Volumen eingeschränkt (8). Bei aufgeprägten kleinen Deformationen, also jenseits von plastischen Deformationen, resultieren daher Spannungen aus der Veränderung der inneren Energie. Entropische Spannungszustände, die im entropie-elastischen Zustand bei $\Theta > \Theta_{sw}$ gespeichert oder „eingefroren“ worden sind, können daher nur durch ein weiteres Erhitzen über die Schalttemperatur hinaus freigesetzt („relaxiert“) werden. Typischerweise besteht die Programmierphase eines Formgedächtnispolymers aus drei charakteristischen Schritten: (I) Man erwärmt die Polymerprobe zuerst über die Schalttemperatur Θ_{sw} und prägt ihr dabei eine Deformation auf. (II) Bei festgehaltener Deformation, kühlt man die Polymerprobe auf eine Temperatur $\Theta < \Theta_{sw}$ ab. (III) Man entlastet die Probe (z.B. kraftkontrolliert) bei $\Theta < \Theta_{sw}$ um eine (neue) „programmierte“ Probengeometrie zu erhalten. In diesem Zustand kann die Probe dann technisch eingesetzt werden. Schematisch sind diese Schritte in der Abbildung Abb. 3 dargestellt. Eine Simulation eines Torsionsexperiments (Abb. 1) zeigt ebenfalls die typischen Programmierphasen einschliesslich dem verbleibenden Eigenspannungszustand nach dem Erwärmungsschritt (IV).

Der Formgedächtniseffekt einer Polymerprobe kann in thermomechanischen Zyklen, vgl. Abbildung Abb. 1 und Abb. 3, qualitativ und quantitativ untersucht werden. Im Rahmen eines thermomechanischen Zyklus werden sowohl die Programmierschritte (I) – (III) als auch eine anschließende Erwärmung über die Schalttemperatur $\Theta > \Theta_{sw}$ durchgeführt. Wenn man die ursprüngliche Ausgangsgeometrie vor der Programmierphase (I) mit der Geometrie nach dem letzten Erwärmungsschritt (IV) vergleicht, dann lassen sich die funktionalen Eigenschaften des Formgedächtnispolymers, wie z.B. die Formwiederherstellung (Shape Recovery Ratio – R_r), ermitteln, vgl. Abbildung Abb. 1. Je weniger die Formwiederherstellung $R_r = 1 - \epsilon(t)/\epsilon_r$ von 1.0 abweicht, desto besser kann sich die Polymerprobe an ihre Ausgangsgeometrie bzw. permanente Geometrie erinnern. Hier wurde für das Formwiederherstellungsverhältnis R_r eine Definition verwendet, wie sie für lineare, uniaxiale Belastungen verwendet werden kann. ϵ_r ist hierbei die Dehnung im „programmierten“ Zustand vor Beginn der Erholungsphase (IV) und $\epsilon(t)$ ist die Dehnung in der Erholungsphase; Ein ideales Formgedächtnismaterial, wie es in technischen Anwendungen gewünscht ist, hat hierbei eine Formwiederherstellung $R_r \approx 1.0$ oder eine Dehnung $\epsilon(t \rightarrow \infty) \approx 0.0$.

Eine Vielzahl von Parametern kann die Formwiederherstellung maßgeblich beeinflussen: Hierbei sind unter anderem die maximalen aufgeprägten Verzerrungen im Programmierschritt (I) zu nennen. Diese können sehr groß werden; aufgeprägte Deformationen von mehreren hundert Prozent sind hierbei keine Seltenheit und öfters gewollt, vgl. z.B. (12). Durch die großen aufprägbaren Deformationen, aber auch durch den ausschließlich vorhandenen Einwegeffekt (nach Schritt (IV) muss die Probe erneut „programmiert“ werden), heben sich Formgedächtnispolymere von Formgedächtnislegierungen signifikant ab. Aber auch weitere Eigenschaften, wie die Haltezeit nach der Lastaufprägung nach (I), können die Formwiederherstellung entscheidend beeinflussen.

Darüber hinaus wurde in den letzten Jahren aber auch vermehrt festgestellt, dass die funktionalen Eigenschaften von Formgedächtnispolymeren durch die Aufnahme von Flüssigkeiten (z.B. Wasser, Ethanol, Aceton) beeinflusst werden. Die Flüssigkeitsaufnahme, d.h. die Diffusion „kleiner“ Moleküle in das Polymernetzwerk, führt hierbei zu einer

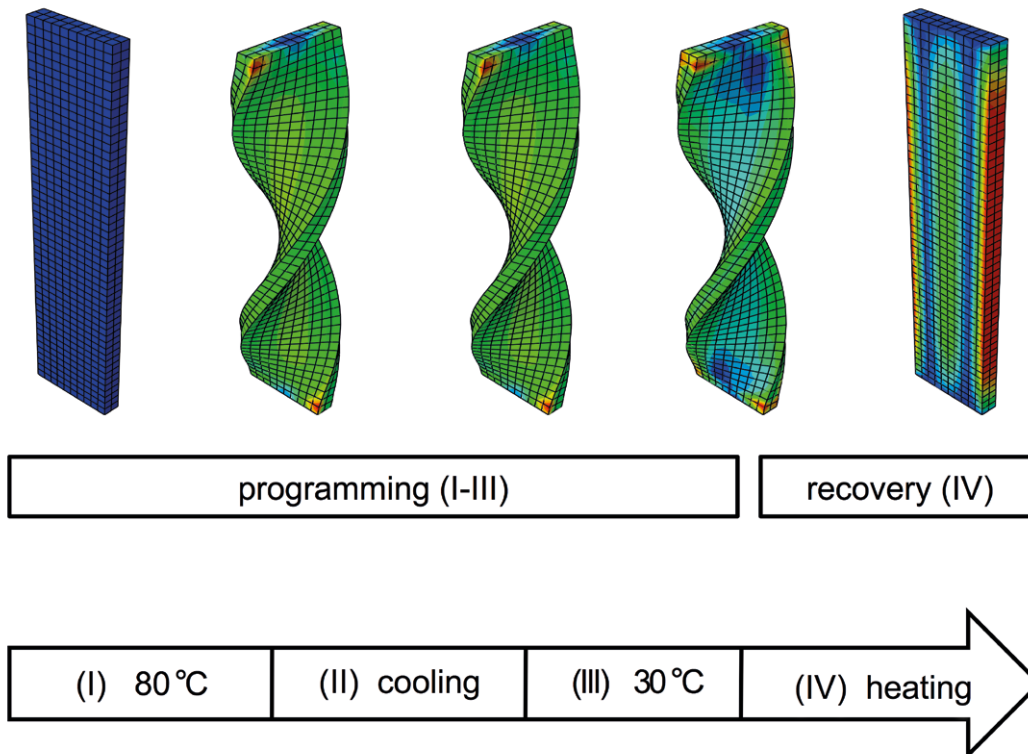


Abb. 1: Viskoelastische (Finite Elemente) Simulation eines Torsionsexperiments (thermomechanischer Zyklus). Darstellung der Eigenspannungen in der Erholungsphase (IV)

chemischen oder physikalischen „Alterung“ des Polymers verbunden mit einer Volumen- und Massenzunahme, vgl. auch mikromechanische Modellierung der Prozesse in Hydrogelen (10,11). Wenn das Polymer chemisch „altert“, dann werden die funktionalen Eigenschaften irreversibel modifiziert, wohingegen bei einer physikalischen Alterung die molekulare Struktur des Polymers nicht verändert wird und somit eine reversible Modifikation der funktionalen Eigenschaften stattfinden kann. Ein physikalisch gealtertes Polymer kann dann z.B. durch eine Wärme- oder Trocknungsbehandlung wieder in seine ursprüngliche Form zurückversetzt werden. Ein Effekt, der für die Funktionalität des Formgedächtnispolymer erwünscht ist.

Thermorheologische Charakterisierung

Im Rahmen verschiedener Untersuchungen in den letzten Jahren, wurde die grundlegende Charakterisierung der thermo-rheologischen Eigenschaften von Formgedächtnispolymeren mittels DMTA-Experimenten durchgeführt. In den bei uns durchgeführten DMTA-Experimenten (Dynamisch-Mechanisch-Thermischen-Analysen), werden rechteckige SMP-Proben (typische Probengeometrien: Dicke x Breite x Länge: 2 x 10 x 50 mm³) bei verschiedenen Temperaturen unterhalb und oberhalb der Schalttemperatur Θ_{sw} bei kleinen Amplituden harmonisch angelegt (1-4). Gerade bei Formgedächtnispolymeren hat sich dabei gezeigt, dass harmonische Torsionsuntersuchungen mit einer überlagerten aber moderaten axialen (statischen)

Zugbelastung besonders gut für die thermo-rheologische Charakterisierung geeignet sind, vgl. (2,3). Die statische Zugbelastung bewirkt, dass auch bei hohen Temperaturen $\Theta \gg \Theta_{sw}$ die sehr weichen Proben gestreckt bleiben und damit definiert unter der Torsionsbelastung ausgewertet werden können.

Bei einer drehmomentenkontrollierten sinusförmigen Anregung (typischerweise im Frequenzbereich von $0.1 < \omega < 100$ rad/s), wird die ebenfalls sinusförmige Winkeländerung gemessen.

Neben dem Amplitudenverhältnis von Drehmoment $M(t, \theta)$ und Winkel $\phi(t, \theta)$ lässt sich die Phasenverschiebung $\varphi(\theta)$ und daraus der Verlustfaktor $\tan \varphi$ dieser Größen ermitteln.

Unter der Annahme kleiner (Winkel-) Auslenkungen und einer linearen Balkentheorie, erhalten wir aus dem Torsionsexperiment die Schubspannungen $\tau(t, \theta)$ und Gleitungen $\gamma(t, \theta)$ und damit den komplexen Schubmodul mit dem Speichermodul $G'(\omega, \theta)$ und dem Verlustmodul $G''(\omega, \theta)$. Die Experimente werden i.d.R. monochromatisch durchgeführt; der komplexe Schubmodul hängt dann sowohl von der gewählten Erregerfrequenz ω als auch von der eingestellten Temperatur θ ab. Durch die Variation der Anregungsfrequenz ω („Frequenzsweeps“) und der Temperatur θ („Temperatursweeps“) erhält man anschließend die komplexen Moduli im Temperatur-Frequenzraum, vgl. (Abb. 4 / links). Da sich der Betrag des komplexen Schubmoduls $G^*(\omega, \theta) = G'(\omega, \theta) + iG''(\omega, \theta)$, mit $i^2 = -1$, bei großen Temperaturvariationen um die Schalttemperatur

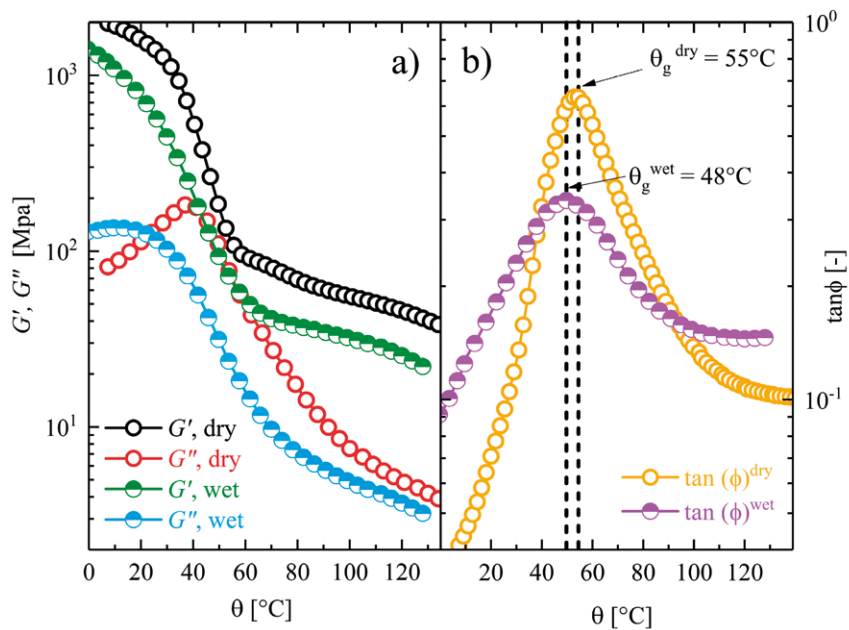


Abb. 2: Vergleich der thermomechanischen Eigenschaften trockener und feuchter SMP-Proben (Estane). a) Speicher- und Verlustmodul (G' und G'') trockener und feuchter Proben. b) Verlustfaktor sowie Glasübergangstemperatur trockener und feuchter Proben, aus Ghobadi et al. (8)

über Größenordnungen ändern kann, vgl. Abb. 4, muss die inhärent vorgenommene Linearitätsannahme für Modell und Auswertung im Temperatur-Frequenzraum a priori kritisch untersucht werden. In den dafür vorgenommenen „Amplitudensweeps“ werden hierzu, bei verschiedenen Temperaturen und Frequenzen, die Amplituden variiert, um lineare Bereiche der konstitutiven Beziehungen $M(\phi)$ bzw. $\tau(\gamma)$ bei einem möglichst großen Signal-Rauschverhältnis festzulegen. Für die Entwicklung von mehrdimensionalen Konstitutivbeziehungen in kontinuumsbasierten Modellen, benötigt man allerdings noch einen weiteren Modul, da v.A. im Glaszustand nicht unbedingt von einer materiellen Inkompressibilität ausgegangen werden kann. Hierzu werden im selben Aufbau und mit der selben oben geschilderten Methodik, vgl. Abb. 5, harmonische Zugexperimente durchgeführt und daraus der komplexe Elastizitätsmodul $E^*(\omega, \theta)$ direkt ermittelt.

Aus den ermittelten Daten für Speicher- bzw. Verlustmoduli lassen sich a posteriori Masterkurven für den Speichermodul $G'(\omega)$ für ausgedehnte Frequenzbereiche bei einer festgelegten Referenztemperatur θ_r ermitteln, vgl. (Abb. 4 / rechts). Die selben „Shift-Faktoren“ α_T wurden anschließend für die Ermittlung der Masterkurve für den Verlustmodul $G''(\omega)$ verwendet. Hierbei ist allerdings zu beachten, und natürlich auch zu überprüfen, dass die physikalische Voraussetzung für die Anwendbarkeit der Frequenz-Temperatur-Superposition, die sich hinter dem Masterkurvenkonzept verbirgt, die thermorheologische Einfachheit der Polymerwerkstoffe ist (15).

Um schlussendlich die funktionalen Eigenschaften von Formgedächtnispolymeren auch abhängig von der physikalischen Alterung, d.h. von der aufgenommenen Flüssigkeitsmenge zu charakterisieren, wird der Frequenz-Temperatur-Parameterraum um die von den Polymerwerkstoffen aufgenommene Flüssigkeitskonzentration erweitert. Beschränkt man sich dabei auf Wasser, dann können die rheologischen DMTA-Untersuchungen wiederum im Rheometer (Anton Paar MCR 302) durchgeführt werden.

Mittels einer (temperaturkontrollierten) Feuchteammer, vgl. Abb. 5, kann die Umgebungstemperatur und Wassersättigung der Atmosphäre, in der sich die Probe während des Versuchs befindet, kontrolliert werden. Ist die maximale Wasseraufnahmekapazität c der Polymerprobe bei kontrolliertem Dampfdruck vorab ermittelt worden (z.B. durch einfache Massenermittlung), dann erhält man als Ergebnis dieser erweiterten DMTA Untersuchungen komplexe, konzentrationsabhängige Schubmoduli $G^*(\omega, \theta, c) = G'(\omega, \theta, c) + iG''(\omega, \theta, c)$, vgl. Abb. 2. Man erkennt an diesem Beispiel, das in der Abbildung Abb. 2 dargestellt ist auch eindrucksvoll, dass sich durch die Wasseraufnahme nicht nur Speicher- und Verlustmodul als Funktion der Temperatur signifikant geändert haben (Abb. 2 / links), sondern, dass sich auch die Glasübergangstemperatur θ_g von 55°C auf 48°C vermindert hat. Da die Glasübergangstemperatur (oder hier die Schalttemperatur θ_{sw}) aber maßgeblich für die funktionalen Eigenschaften des Polymers verantwortlich ist, wird durch die rheologische Charakterisierung deutlich, welche direkte Auswirkung die physikalische Alterung auf die Formgedächtniseigenschaften hat. Experimentell kann darüber hinaus für einige Formgedächtnispolymere in thermomechanischen Zyklen gezeigt werden (9), dass die Formwiederherstellung, durch die Zunahme der physikalischen Bindungen im Vergleich zu trockenen Proben, effektiver abläuft.

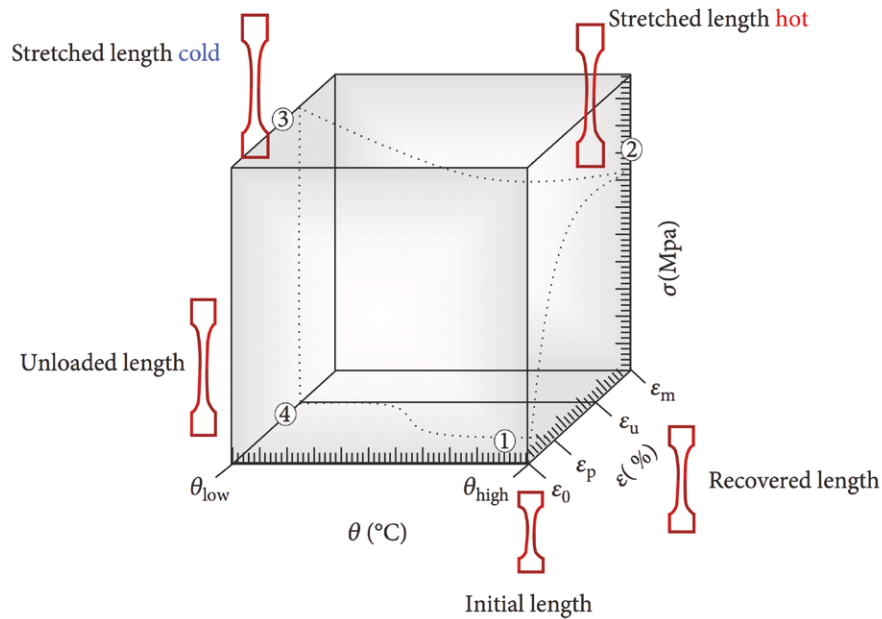


Abb. 3: Typischer thermomechanischer Zyklus mit den charakteristischen Phasen (I – IV), aus Ghobadi et al. (9)

Modellbildung

Die Modellierung des Formgedächtniseffektes kann im Rahmen eines thermo-mechanischen Mischungsansatzes beschrieben werden (5,6,7). Dabei wird das Formgedächtnispolymer durch zwei Phasen und ihre Volumenanteile mittels eines kinematisch eingeschränkten Mischungsansatzes formuliert. Die Polymereigenschaften werden als eine Mischung aus der „eingefrorenen“ innere-Energie dominierenden Hartsegmentphase und der „aktiven“ Entropie-dominierenden Weichsegmentphase zusammengesetzt. Beiden Phasen wird ein temperaturabhängiger Volumenanteil zugeordnet. Mittels eines internen Variablenkonzepts, wird der Phasenübergang über eine temperaturabhängige Evolutionsgleichung für die Volumenanteile beschrieben, vgl. (5,16). Im Rahmen dieses Modells kann der Formgedächtniseffekt als die Kapazität eines Formgedächtnispolymers verstanden werden, welche die „eingefrorenen“ Verzerrungen wieder aktiviert. Der thermo-mechanische Mischungsansatz ist phänomenologisch motiviert. Die verschiedenen Modellparameter der vorgeschlagenen Evolutionsgleichungen für die Volumenanteile (5,16) sind nicht eindeutig (physikalisch) dem Formgedächtniseffekt zuzuordnen. Die Parameter müssen aus experimentellen Untersuchungen, wie z.B. aus temperaturabhängigen Daten von thermomechanischen Zyklen (5), indirekt ermittelt werden.

Alternativ zum beschriebenen „Frozen Volume Fraction“-Ansatz kann der Formgedächtniseffekt eines Polymers auch im Rahmen einer „klassischen“ viskoelastischen Materialformulierung beschrieben werden (18). In Bezug auf die Anpassung an experimentelle Daten, v.A. auch bei großen Deformationen, hat es sich gezeigt, dass finite vis-

koelastische Materialformulierungen unter Berücksichtigung von temperatur- und konzentrationsabhängigen Materialeigenschaften experimentelle Beobachtungen häufig gut beschreiben können. Im Rahmen unserer numerischen Untersuchungen, vgl. Simulation eines thermomechanischen Zyklus eines Torsionsexperiments, Abbildung 4, wird dazu eine klassische multiplikative Aufspaltung des Deformationsgradienten $F = F^e \cdot F^i$ in Verbindung mit einem internen Variablenansatz, vgl. z.B. (13), umgesetzt. Aus rheologischer Sicht wird ein generalisiertes Maxwell-Zener-Modell verwendet. Im Unterschied zu einer Vielzahl von „klassischen“ entropieelastischen Polymerwerkstoffen muss durch die starke Temperaturabhängigkeit des Materials unter- und oberhalb der Schalttemperatur hierbei ein wesentlich breiteres Relaxationsspektrum berücksichtigt werden, vgl. Masterkurve in Abbildung 4 (rechts). Dies wiederum hat zur Folge, dass eine große Anzahl von Maxwellelementen (ca. 1,5 Maxwellelemente / Dekade) und bis zu 10 Dekaden im Modell berücksichtigt werden müssen, die in der Programmierphase (I-III) teilweise „eingefroren“ werden. Verschiedene, in der Regel gradientenfreie Optimierungsverfahren, werden dabei zur Materialparameteridentifikation in den unterschiedlichen Temperaturbereichen eingesetzt, vgl. Abb. 4.

Ein Ansatz effektiver temperatur- und konzentrationsabhängiger Materialparameter erlaubt einerseits eine rein mechanische Beschreibung, setzt aber andererseits voraus, dass die chemische Kopplung, d.h. die Diffusionsprozesse, von den transienten viskoelastischen Effekten entkoppelt betrachtet werden können. Darüber hinaus muss natürlich auch ein isothermer Prozess vorliegen. Während Temperaturgradienten i.d.R. sehr schnell abklingen und eine

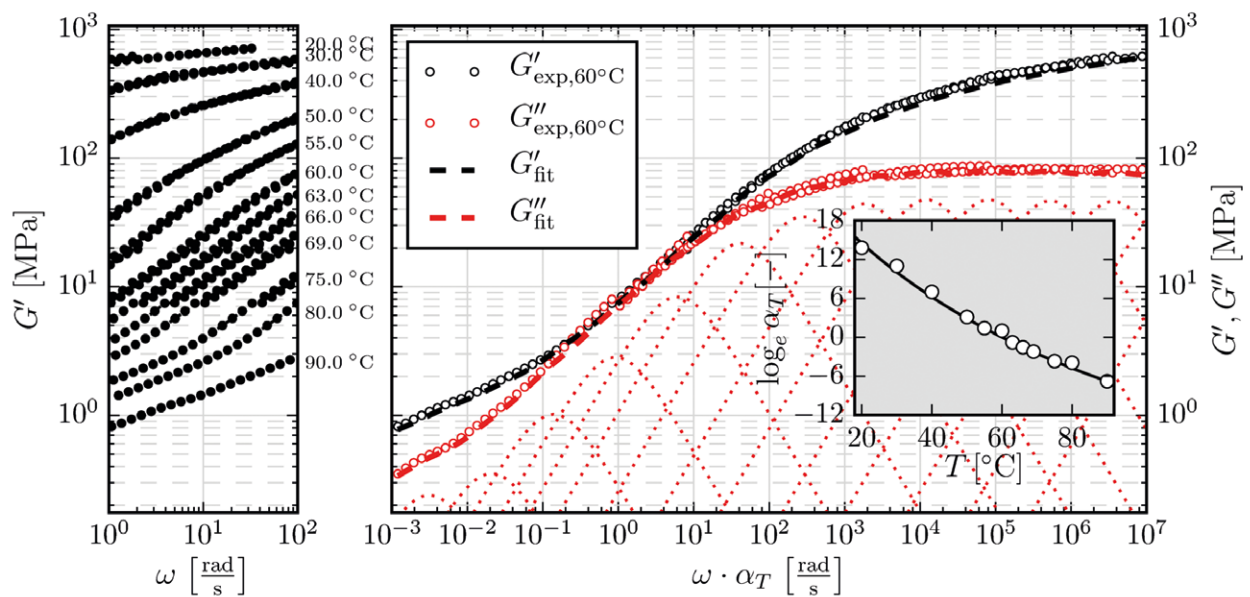


Abb. 4: Experimentelle DMTA Ergebnisse eines Formgedächtnispolymers (Tecoflex®). Isotherme Frequenzsweeps (links), Masterkurve (rechts) und Shift-Faktoren α_T (rechts, innen)

thermische Entkopplung für technisch relevante Fragestellungen eine hinreichend gute Annahme darstellt, sind die charakteristischen Diffusionszeiten allerdings oftmals mit den sehr langsamen Relaxationszeiten des „programmierten“ Formgedächtnispolymers vergleichbar. Daraus ergibt sich die Notwendigkeit der Berücksichtigung der chemo-mechanischen Interaktion im Rahmen einer einseitigen Kopplung (9). Einseitig deswegen, weil der Diffusionsprozess zwar einen großen Einfluss auf das effektive mechanische Verhalten hat, aber andersherum die Mechanik keine Rückkopplung auf den Diffusionsprozess hat.

Die inverse Ermittlung der modellinhärenten Materialeigenschaften eines, wenn auch nur einseitig, gekoppelten Modells, ist intrinsisch eine besondere Herausforderung. Eine möglichst entkoppelte experimentelle Betrachtung der unterschiedlichen Phänomene sollte daher immer angestrebt werden. Der Diffusionskoeffizient der (isotropen) Flüssigkeitsdiffusion kann hierbei in reinen Diffusionsexperimenten, also ohne mechanische Beanspruchung, untersucht und ermittelt werden (9,14). Die Auswirkung der Flüssigkeitsaufnahme auf die viskoelastischen Eigenschaften des Polymers muss dagegen aber gekoppelt, z.B. in den oben beschriebenen thermomechanischen Zyklen bei unterschiedlichen Konzentrationsrandbedingungen rheologisch untersucht werden.

Sind die Modellparameter einmal ermittelt (und in alternativen Experimenten validiert) bieten Simulationen eine interessante Möglichkeit die Formgedächtniseigenschaften von Strukturen rechnerisch zu prognostizieren. Da bei (heterogenen) Strukturen auch eine heterogene Eigenspannungsverteilung vorliegt, d.h. die „Dämpfer“ der Maxwell-

Elemente eingefroren werden, bieten numerische Simulationen darüber hinaus die Möglichkeit, diese „internen“ Größen (Variablen) sichtbar zu machen und damit auch Formgedächtniseffekte bzw. -materialien durch Strukturveränderung zu optimieren, vgl. Abb. 1.

Fazit / Ausblick

Formgedächtnispolymere sind äußerst interessante „smarte“ Materialien, die insbesondere in der experimentellen Charakterisierung, aber auch in der Modellbildung und numerischen Umsetzungen, äußerst anspruchsvoll sind. Sehr große Deformationen und ein ausgeprägtes, breites Relaxationsspektrum sind hier nur einige der Herausforderungen, die an dieser Stelle nochmals betont werden sollen. Insbesondere die Untersuchung und Modellierung von mehrachsigen Beanspruchungen, die (gleichzeitige) Interaktionen mit verschiedenen „Triggern“, wie z.B. Temperatur und Flüssigkeiten oder ggfs. elektro-magnetischen Feldern und natürlich die additive Fertigung von Strukturen aus Formgedächtnispolymeren im Rahmen von 3D-Druck sind verbunden mit sehr spannenden Fragestellungen, die bislang immer noch wenig Beachtung in der Literatur gefunden haben und sicherlich auch in der Zukunft noch weitere wissenschaftliche Untersuchungen benötigen. Die Möglichkeit relativ einfach und kostengünstig Polymerwerkstoffe in komplexer Geometrie zu drucken und damit Formgedächtniseigenschaften in Strukturen anwendungsorientiert „einzustellen“, ist ein faszinierendes Forschungsfeld und könnte in der Zukunft zu spannenden Anwendungen in verschiedenen technischen Bereichen führen.



Abb. 5: Anton-Paar MCR 302 Doppelmotor-Rheometer für harmonische Zug- und Torsionsanregungen mit Temperatur- und Feuchtekammer (DMTA)

Danksagung

Holger Steeb möchte sich bei allen Ko-Autoren, die zu diesem Artikel nicht nur mit den aufgeführten Publikationen einen ganz wesentlichen Beitrag geleistet haben, herzlich bedanken. Große Anteile der Arbeit sind in den vergangenen Jahren im Rahmen des DFG Schwerpunktprogramms SPP 1713 „Chemomechanics“ - Strong coupling of thermo-chemical and thermo-mechanical states in applied materials, in Zusammenarbeit mit den Arbeitsgruppen der Kollegen Prof. Gunther Eggeler und Prof. Fathollah Varnik (beide Ruhr-Universität Bochum) entstanden. Darüber hinaus möchte sich HS bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) für die finanzielle Unterstützung im Rahmen des Forschungsvorhabens STE 969/8-1/8-2 bedanken. Teile der Arbeiten wurden im Rahmen der VolkswagenStiftung gefördert. Auch hierfür ein herzlicher Dank.

Literatur

- [1] Ghobadi, E., R. Sivanesapillai, J. Musialak, H. Steeb (2016): Modeling based characterization of thermorheological properties of polyurethane ESTANE™, International Journal of Polymer Science, 7514974, Doi: 10.1155/2016/7514974
- [2] Kazakevičiūtė-Makovska, R., A.Ö. Özarmut, H. Steeb (2014): Characterization of shape memory polymer Estane by means of Dynamic Mechanical Thermal Analysis technique, Smart Materials Research, 250258, Doi: 0.1155/2014/250258
- [3] Mogharebi, S., R. Kazakevičiūtė-Makovska, H. Steeb, G. Eggeler, K. Neuking (2013): On the cyclic material stability of shape memory polymer, Materialwissenschaft und Werkstofftechnik 44 (6), 521-526, Doi: 10.1002/mawe.201300023
- [4] Kazakevičiūtė-Makovska, R., S. Mogharebi, H. Steeb, G. Eggeler, K. Neuking (2013): A critical assessment of experimental methods for determining the dynamic mechanical characteristics of shape memory polymers. Advanced Engineering Materials 15 (8), 732-739, Doi: 10.1002/adem.201200341
- [5] Kazakevičiūtė-Makovska, R., H. Steeb, A.Ö. Aydin (2012): On the evolution law for the frozen fraction in linear theories of shape memory polymers, Archive of Applied Mechanics 82 (8), 1103-1115, Doi: 10.1007/s00419-012-0615-7
- [6] Kazakevičiūtė-Makovska, R. M. Heuchel, K. Kratz, H. Steeb (2014): Universal relations in linear thermoelastic theories of thermally-responsive shape memory polymers, International Journal of Engineering Science 82, 140-158, Doi: 10.1016/j.ijengsci.2014.05.009
- [7] Kazakevičiūtė-Makovska, R., H. Steeb (2011): On recoverable strain and stress relationships for shape memory polymer nanocomposites, K GK, Kautschuk, Gummi, Kunststoffe 64 (6), 24-28
- [8] Ghobadi, E., M. Elsayed, R. Krause-Rehberg, H. Steeb (2018): Demonstrating the influence of physical aging on the functional properties of Shape-Memory Polymers, Polymers 10 (2), 107, Doi: 10.3390/polym10020107
- [9] Ghobadi, E., A. Marquardt, E.M. Zirdehi, K. Neuking, F. Varnik, G. Eggeler, H. Steeb (2018): The influence of water and solvent uptake on functional properties of shape-memory polymers, International Journal of Polymer Science, 7819353, Doi: 10.1155/2018/7819353
- [10] Sauerwein, S., H. Steeb (2018): A modified effective stress principle for chemical active multiphase materials with internal mass exchange, Geomechanics for Energy and the Environment 15, 19-34, Doi: 10.1016/gete.2018.02.001

- [11] Sauerwein, M., H. Steeb (2020): Modeling of dynamic hydrogel swelling within the pore space of a porous medium, *International Journal of Engineering Science*, in press
- [12] Voit, W., Ware, T., Dasari, R.R., Smith, P., Danz, L., Simon, D., Barlow, S., Marder, S. R., Gall, K. (2010): High-strain shape-memory polymers, *Advanced Functional Materials* 20, 162-171. Doi: 10.1002/adfm.200901409
- [13] Reese, S. (2011): Thermomechanische Modellierung gummiartiger Polymerstrukturen. F01/4 (Habilitationsschrift), Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Universität Hannover.
- [14] Marquardt, A., S. Mogharebi, K. Neuking, F. Varnik, G. Eggeler (2016): Diffusion of small molecules in a shape memory polymer, *Journal of Materials Science* 51(21), 9792-9804, Doi: 10.1007/s10853-016-0213-0
- [15] Ferry, J. (1980) *Viscoelastic Properties of Polymers*, John Wiley & Sons, New York, NY, USA, 3. Auflage.
- [16] Chen Y.-C., D. Lagoudas (2008): A constitutive theory for shape memory polymers. Part II: a linearized model for small deformations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 56, 1766-1778, Doi: 10.1016/j.jmps.2007.12.004
- [17] Lendlein, A., S. Kelch (2002): Shape-memory polymers, *Angewandte Chemie International* 41(12), 2034-2057.
- [18] Yu, K. Q. Ge, H.J. Qi (2014): Reduced time as a unified parameter determining fixity and free recovery of shape memory polymers, *Nature Communications* 5(1), 3066, Doi: 10.1038/ncomms4066



Holger Steeb ist seit 2015 Inhaber des Lehrstuhls für Kontinuumsmechanik an der Universität Stuttgart. Er studierte Bauingenieurwesen an der Universität Stuttgart, wo er im Jahre 2002 auch seine Promotion anfertigte. Von 2002 – 2008 arbeitete er als PostDoc an der Universität des Saarlandes in Saarbrücken mit einem längeren Forschungsaufenthalt an der NTUA, Athen, Griechenland, und habilitierte sich dort in 2008 im Fachgebiet Mechanik. In 2008 wechselte er auf eine Assistant Professur (Multiscale Mechanics) an die University of Twente, Enschede, Niederlande. 2009 folgte er einem Ruf an die Ruhr-Universität Bochum auf eine Professur für Kontinuumsmechanik. Seine Forschungsinteressen liegen im Bereich der Mehrskalens- und Mehrphasenmodellierung von porösen und funktionalen Materialien. Ein Schwerpunkt der Arbeiten liegt im Bereich der Verknüpfung von vorwiegend mikro-mechanischen experimentellen Charakterisierungsmethoden und numerischen Simulationsmethoden für Fluide und Festkörper.

NONSMOOTH OPTIMIZATION: BETWEEN ANALYSIS AND COMBINATORICS

BY ANDREAS GRIEWANK AND ANDREA WALTHER

In continuous optimization the derivation of optimality conditions and the design of iterative algorithms has traditionally been based on the assumption that the objective function is at least Lipschitz continuously differentiable in the region of interest. However, many physical systems undergo phase transitions and many economical models allow for pointwise rate changes or maximal regret constraints, so that the overall energy or cost functions are no longer differentiable. Frequently, nonsmoothness also arise through numerical methods, like upwinding, adaptive grids and time-steps in PDEs, exact penalization in constrained optimization and Kojima type formulations of complementarity systems. Many users hope or even expect that the resulting nondifferentiability will not prevent their favorite algorithm, e.g., steepest descent, from reducing the objective down to a more or less satisfactory level with an acceptable computational effort. This point of view is especially wide-spread in the machine learning (ML) community, where nonsmoothness arises amongst others through the very popular Rectified Linear Unit (ReLu) activation functions, previously known as positive part function $\max(0, u)$. Practitioners of ML usually cite convergence results for steepest descent and its stochastic variants, that assume both differentiability and convexity, a gap between theory and practice that ought to be reduced.

Levels of Nonsmoothness and Connectivity

Before delving into mathematical specifics we make the observation that *smoothness* of a function means gradual qualitative changes of its value as function of its input arguments. Moreover, this stability must go beyond mere continuity, which will be required even in the nonsmooth scenarios to be considered here. In the extremely smooth, real analytic case, the values of a function on a simply connected domain are fully determined by the function values in an arbitrary small open subdomain. Actually, this extrapolation on values only is a purely theoretical construct, and any attempt to implement it would be fraught with insurmountable conditioning problems.

Instead one actually represents the function by evaluation procedures, like for example power series, which can be applied at varying arguments in a stable manner. For practical purposes one uses low order Taylor expansions as local models such that the discrepancy with the exact function is bounded by a certain power of the distance to the development point, measured in a suitable norm. These models can then be used as temporary substitutes for resolving certain computational tasks like unconstrained optimization and systems of equation solving. The terms

in the (truncated) power series themselves are derived from a *symbolic* definition of the function rather than its values on an open neighborhood. This algorithmic view of functions goes back at least to the Kerala school of Hindu mathematics in the 13-th century [5] and is also central to our approach of dealing with nonsmoothness.

In the general nonsmooth case, the values of a function on a small spherical neighborhood say nothing about the behavior of the function just outside of this ball. In particular, there could be one or several kinks, i.e., dramatic changes in slope very close by, which would invalidate any sort of polynomial or otherwise smooth approximation. Such unforeseeable surprises will typically slow down iterative algorithms designed for smooth problems and quite likely prevent their convergence to an acceptable solution altogether. Specifically in optimization, we face the difficulty that there may be a minimizer arbitrary close to a current iterate, where the function gradient is still quite large. This lack of connectivity in the slopes makes the construction of stopping criteria very difficult as is well understood in the nonsmooth community.

No nonsmooth analysis concept that depends only on strictly local function value information can overcome these severe obstacles to efficient optimization. Several tools have been proposed to obtain a somewhat less localized picture of the function and in particular its gradients. So-called ε -differentials [8] are one such concept. They collect gradients from a wider neighborhood of the current point of interest. These may be either evaluated at the main iterates as in the *bundle methods* [21] or by stochastic sampling as advocated for example in [24]. Finally, a widely used technique is *smoothing* for functions whose nonsmoothness can be encapsulated in absolute value calls, as discussed below. The kink of each absolute value invocation can be replaced by a parabolic or hyperbolic arc such that the overall function is at least once continuously differentiable, and the gradients evaluated close to the origin of the absolute values are in fact averages of the ones obtainable on the two side branches.

We will use essentially the same function model, but try to deal directly with the combinatorics rather than hiding them from the optimization algorithm, which may or may not be a good idea depending on the circumstances. This alternative is classical in Linear Optimization (LOP), which can be written in standard form as an optimization problem with linear inequality constraints or in the interior point formulation as a parameterized family of smoothed problems. It is well understood that on nearly degenerate

problems, where several feasible vertices have similar objective values, the central path of the interior point formulation may take many sharp turns. It is then hard to trace out numerically, so that the combinatorial nature of LOP is effectively preserved [33]. Whereas interior point methods represent an inexact barrier penalization of LOP, one can also cast it with an exact penalization as an unconstrained nonsmooth optimization problem [19].

A special nonsmooth situation arises when the objective is known to be convex. Then it must be Lipschitz in the interior of its effective domain and all stationary points form the convex set of global minimizers. Convex and variational analysis on finite and also infinite dimensional spaces is an elaborate branch of mathematics, including a beautiful duality theory [28]. Considerable efforts have gone into the analysis of effects on the boundary of the effective domain, where the function values jump to plus infinity, making the arguments outside effectively infeasible.

There is a widespread notion that once an optimization problem has been cast in a convex framework, it will be comparatively easy to solve. While the uniqueness or at least connectedness of the minimizers excludes indeed the possibility that an algorithm stalls near a non-minimal stationary point, as may happen in the nonconvex case, even just checking for membership in a convex set may be NP-hard. The classical example [3] is the question whether a matrix $A^T = A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ is copositive in that

$$\frac{1}{2}x^T A x \geq 0 \quad \text{for } 0 \leq x \in \mathbb{R}^n .$$

This decision problem can be recast as a nonsmooth minimization problem, namely

$$\min f(x) \equiv \frac{1}{2}|x|^T A |x| \quad \text{for } x \in \mathbb{R}^n \quad (1)$$

which we may use to illustrate some key points that lead to the hierarchy of properties as depicted in Fig. 1.

On the extremes we have the extensively studied cases of smooth functions and convex but likely nonsmooth functions. It is well known that both properties imply semi-smoothness (see Cor. 1), which also follows for the three lesser known classes of piecewise smooth functions in the middle. For simplicity we will assume throughout the paper that all properties hold in an open convex domain $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$. Vector functions $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ belong to any one of the classes if their Cartesian components do.

The problem (1) is nonsmooth because the objective f is nondifferentiable at all points x where one of the coordinates x_j vanishes. It is however differentiable and indeed quadratic in the interior of any one of the 2^n orthants $\sum x > 0$, where $\Sigma = \text{diag}(\sigma) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ with $\sigma \in \{-1, 1\}^n$ is a regular signature matrix. We may therefore specify f by pieces in the form

$$f(x) = \begin{cases} \dots & \text{if } \dots \\ f_\sigma(x) \equiv x^T \Sigma A \Sigma x & \text{if } c_\sigma(x) \equiv \Sigma x \geq 0, (2) \\ \dots & \text{if } \dots \end{cases}$$

where σ ranges over all 2^n elements of $\mathcal{I} \equiv \{-1, 1\}^n$. Here the smooth *selection functions* $f_\sigma(x)$ coincide with $f(x)$

on the respective subdomains defined by the system of inequalities $c_\sigma(x) \geq 0$. Of course the scalar functions $f_\sigma(x)$ and the corresponding vector functions $c_\sigma(x)$ can be much more complicated in the general piecewise smooth case and the index set \mathcal{I} may look very different too. While \mathcal{I} must be finite according to the definition in [32] it is quite likely to be very large as in the simple example considered above.

Apart from the sheer size of \mathcal{I} a fragmented representation of the form (2) has other serious disadvantages. Most importantly, it does not yield continuity of the resulting f in a natural way. Instead, the user/programmer must ensure that the selection functions f_σ coincide at common interfaces between their respective domains, which may be quite a challenge, especially in higher dimensions. Any logical error or numerical perturbation in the specification of an f_σ will lead to inconsistencies that may cause catastrophic failure of an optimization algorithm that assumes continuity of the objective. Moreover, the specification by pieces is completely local in that the properties of $f_\sigma(x)$ on the subdomain $\{c_\sigma(x) \geq 0\}$ tell us absolutely nothing about the properties of f on the neighboring subdomains. As we have discussed above, this local disjunction of the information about function values and slopes is a fundamental difficulty created by nonsmoothness.

Fortunately, that need not be the case, as we can usually provide algorithms with local models that fairly faithfully reflect the important features of the objective on a sizable neighborhood of the current point. This will be true if the function $y=F(x)$ is *abs-smooth* in that we have an evaluation procedure that can be represented conceptually as a sequence of assignments

$$v_i = v_j \circ v_k \quad \text{or} \quad v_i = \varphi_i(v_j) \quad \text{with } j, k < i \quad (3)$$

for $i=1, \dots, k$. Here, $\circ \in \{+, -, *\}$ is a polynomial arithmetic operation and

$$\varphi_i \in \Phi \equiv \{c, \text{rec}, \text{sqrt}, \text{sin}, \text{exp}, \text{log}, \dots, \text{abs}, \dots\}$$

a univariate function. The element $c \in \Phi$ represents initialization to a constant and $\text{rec}(u)=1/u$ the reciprocal of a nonzero argument. Using abs-linear reformulations like

$$\begin{aligned} \min(v, u) &\equiv (v+u-\text{abs}(v-u))/2 \quad \text{and} \\ \max(v, u) &\equiv (v+u+\text{abs}(v-u))/2 \end{aligned}$$

any piecewise smooth elemental can be included. Except for the inclusion of the nonsmooth elemental function $\text{abs}(\cdot) = |\cdot|$ this function model is exactly the by now widely used framework of Algorithmic Differentiation (AD) [12]. We will denote the set of such functions as $C_{\text{abs}}^\infty(\mathcal{D})$ where \mathcal{D} has been restricted such that all elementals including the reciprocal are evaluated in the interior of their domains. This model may still look rather special, but let us recall that, triggered by Hilbert's 13-th problem, Vladimir Arnold and his supervisor Andrei Komolgorov actually showed that every multivariate continuous function can be decomposed

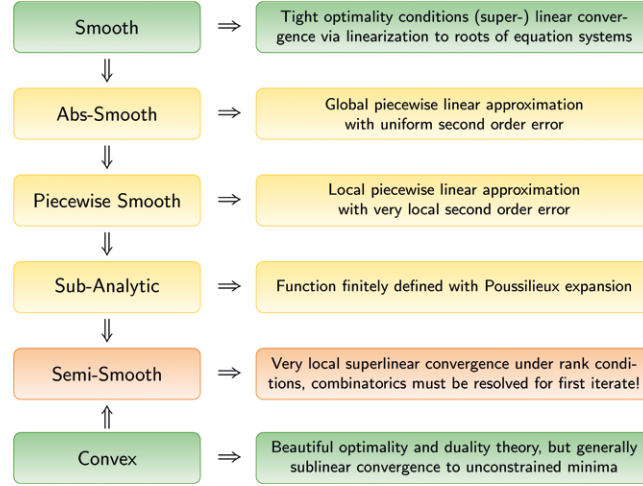


Fig. 1: Between Smoothness and Convexity

into an evaluation procedure involving Lipschitz continuous univariates and the addition operation as the only bivariate function [1]. Of course, this is an existence statement based on given function values, but in reality one always starts with a procedure for its evaluation.

For simplicity, we assume in this presentation that all smooth elementals in the library ϕ are real analytic so that we really have an abs-analytic procedure. For optimization purposes it is usually sufficient if the smooth elementals are twice continuously differentiable so that the analysis can be extended and the algorithms applied to $C_{\text{abs}}^2(\mathcal{D})$ or even $C_{\text{abs}}^{1,1}(\mathcal{D})$, see [15]. As we noted initially the assumption that all nonsmoothness is cast in terms of the absolute value function is also needed when one wants to smoothen a given nonsmooth function f . Let us illustrate our function model and its piecewise linearization with the copositivity example. Obviously, the representation (1) of the piecewise quadratic objective f can be evaluated by a nested loop over the entries of A after taking the absolute values $|x_i|$ of the n variable components. So the assumption of abs-smoothness is satisfied indeed. Now we can ask the question how, given a fixed reference point, $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$ we can approximate f at points $\hat{x} + \Delta x$ in its neighborhood, i.e., with $0 \approx \Delta x \in \mathbb{R}^n$. Using the quadratic nature of f in terms of $|x|$ we obtain the estimate

$$\begin{aligned} f(\hat{x} + \Delta x) - f(\hat{x}) &= \frac{1}{2}(|\hat{x} + \Delta x| + |\hat{x}|)^{\top} A (|\hat{x} + \Delta x| - |\hat{x}|) \\ &\leq \underbrace{|\hat{x}|^{\top} A (|\hat{x} + \Delta x| - |\hat{x}|)}_{\equiv \Delta f(\hat{x}; \Delta x)} + \frac{1}{2} |\Delta x|^{\top} |A| |\Delta x|. \end{aligned}$$

Thus we have the generalized Taylor expansion

$$f(\hat{x} + \Delta x) - f(\hat{x}) = \Delta f(\hat{x}; \Delta x) + \mathcal{O}(\|\Delta x\|_{\infty}^2), \quad (4)$$

whose leading term $\Delta f(\hat{x}; \Delta x)$ is only piecewise linear in the increment Δx . This local model is the basis of our nonsmooth optimization approach, since the error term is uniform of second order in the distance to the

development point. While we have derived the particular model $\Delta f(\hat{x}; \Delta x)$ for (1) *by hand* from the given f , this transformation can be effected automatically by minor extensions of AD tools like ADOL-C, CppAD, and Tapenade, [2], provided an evaluation procedure with the conceptual structure (3) for f is given in a suitable high level language like C/C++ or a Fortran variant. The piecewise linearization $\Delta f(\hat{x}; \Delta x)$ is abs-linear in that it is naturally given in the form (3) with *abs* being the only univariate elemental function and multiplications only allowed by a constant factor.

As follows from the analysis of abs-smooth functions before Prop. 6 they are all piecewise smooth and Lipschitz continuous. The fragmented representation (2) can be given easily in terms of signature vectors $\sigma \in \{-1, 0, 1\}^s$ where s counts the number of absolute value invocations. The converse transformation from a piecewise definition of the form (2) to an abs-smooth evaluation procedure may be much more difficult and sometimes not possible at all. In applications like machine learning, all objectives are already given by procedures that are smooth except for the invocation of *abs*, *min* and *max*. In any case, piecewise smoothness has in contrast to analytical smoothness the advantage that there is no total information connectivity, but rather a local flexibility that facilitates good approximation of arbitrary data. For example, the Stone Weierstrass approximation theorem yields for a compact set $\bar{\mathcal{D}}$ that already the subset of abs-linear functions in our second box is dense in $\mathcal{C}(\bar{\mathcal{D}})$ without any Gibbs effect at kinks of the continuous function to be approximated.

A theoretically intriguing generalization of piecewise smooth functions are semi-algebraic functions, whose epigraphs are semi-algebraic sets, i.e., solutions of systems of polynomial equalities and inequalities. For them certain properties like semi-smoothness are still valid, but we have not yet seen a practical need to go that far beyond abs-smooth functions in nonsmooth optimization. However, one should notice that the Euclidean norm, which occurs for example in location problems [18] is semi-algebraic but not abs-smooth. It was observed in [15] that there are

natural ways to approximate the Euclidean norm by an abs-linear function, but the approximation error term in Eq. (4) is no longer uniform in the directions $\Delta x/\|\Delta x\|$.

As already noted for the copositivity example (1), seemingly simple nonsmooth optimization problems can be NP-hard to solve. Conversely, one can extend any binary variable $\chi_j \in \{-1,1\}$ to $\chi_j \in \mathbb{R}$ subject to the piecewise linear constraint $|\chi_j| = 1$. Hence, all mixed-integer nonlinear optimization problems, see, e.g., [27], can be rewritten as constrained nonsmooth optimization problems, which again emphasizes the combinatorial aspect of nonsmoothness. However, whereas in combinatorial and mixed-integer optimization, questions of computational complexity have been studied extensively, these issues have been largely ignored in nonsmooth optimization, which has been approached mostly from an analytical point of view. As we will see, in the abs-smooth context, standard optimization tasks have a polynomial or exponential complexity depending on whether the so-called Linear Independence Kink Qualification (LIKQ) (see Proposition 6) is satisfied or not. Whereas LIKQ can be verified in polynomial time, we conjecture that its natural generalization, the Mangasarian Fromovitz Kink Qualification (MFKQ), see [34] for the rather involved definition, is already NP-hard to verify. Even under LIKQ verifying local convexity in the abs-linear case or its generalization subdifferential regularity for abs-smooth functions was shown to be co-NP complete [34]. Finally, we note that since $v=|u|$ can be rewritten as $v = \tilde{u} + \hat{u}$ with $u = \tilde{u} - \hat{u}$ and $\tilde{u} \perp \hat{u}$, abs-smooth optimization problems can be recast as MPECs, i.e., mathematical programs under complementarity constraints [20]. The converse is also true, but one arrives in general at abs-smooth problems with constraints, whereas we consider here only unconstrained problems, which simplifies the MPEC.

Limiting Differentials and Semi-Smoothness

Before presenting newer results in the abs-smooth setting, let us review the classical nonsmooth analysis, which was cast by Clarke [6] in its currently most popular form. It applies to all function classes in our hierarchy except the sub-analytic functions because they are not Lipschitz.

Proposition 1 (Rademacher) Suppose $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ is locally Lipschitz continuous on $\mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^n$. Then there exists the Fréchet derivative

$$F'(x) \in \mathbb{R}^{m \times n} \text{ s.t. } F(x+s) - F(x) - F'(x)s = o(\|s\|)$$

at all $x \in \mathcal{D} \setminus S$ where S is a singular set, i.e., has Lebesgue measure zero. Consequently, at all $x \in \mathcal{D}$ the set called limiting differential and given by

$$\partial^L F(x) \equiv \left\{ \lim_{k \rightarrow \infty} F'(x_k) : x_k \rightarrow x, x_k \notin S \right\} \neq \emptyset$$

is compact. The convex envelope $\partial^C F(x) = \text{conv}(\partial^L F(x))$ is called the Clarke differential.

The limiting differential is also called Bouligand derivative in the literature. We will refer to the elements of $\partial^L F$ and

$\partial^C F$ as limiting or Clarke Jacobians, respectively and limiting or Clarke gradients if $m=1$, i.e., $f=F$ is scalar valued. While the sets $\partial^L F(x)$ and $\partial^C F(x)$ may vary drastically between nearby points they have the following stability property.

Lemma 1 (Closed Graph Property) The limiting differential $\partial^L F(x) : \mathcal{D} \rightrightarrows \mathbb{R}^{m \times n}$ is an outer semi-continuous multifunction in the sense of Painlevé Kuratowski, such that

$$\limsup_{x \rightarrow \hat{x}} \partial^L F(x) \subset \partial^L F(\hat{x}), \quad x, \hat{x} \in \mathcal{D},$$

i.e., whenever for a convergent sequence $x_k \rightarrow \hat{x}$ there is a convergent sequence of values $J_k \in \partial^L F(x_k)$ their limit, i.e., $\tilde{J} = \lim J_k$, must belong to $\partial^L F(\hat{x})$. The same is true for the convex envelope $\partial^C F(\hat{x})$.

One can also interpret $\partial^L F$ as the tightest outer semi-continuous extension of the multifunction that maps x into the singleton $\{F'(x)\}$ where this Jacobian exists and the empty set elsewhere.

On the other hand limiting and even Clarke differentials $\partial^C f(x) : \mathcal{D} \rightrightarrows \mathbb{R}^n$ generally fail to be *inner semi-continuous* so that we may have $0 \in \partial^C f(\hat{x})$ at some \hat{x} but $0 < \inf\{\|g\| : g \in \partial^C f(x), x \neq \hat{x}\}$. The simplest possible example $f(x) = |x|$ may serve to illustrate this fact, since $\partial^C f(0) = [-1, 1] \ni 0$ but $|g(x)| = 1$ at all $x \neq \hat{x} = 0$ and $g \in \partial^C f(x)$. Hence at any arbitrarily small iterate $x_k \neq 0$ the gradient $\partial^C f(x_k) = \text{sgn}(x_k) \in \{\pm 1\}$ gives us no indication that we are very close to the minimizer $\hat{x} = 0$. This generates the difficulty in designing stopping criteria that we have alluded to at the beginning since

Lemma 2 Any local minimizer $\hat{x} \in \mathcal{D}$ of f is Clarke stationary in that $0 \in \partial^C f(\hat{x})$.

In order to actually compute limiting or Clarke differentials one will look for differentiation rules to propagate them through an evaluation procedure. Unfortunately, most of them are not sharp as can be seen from the following list.

Proposition 2 (Differentiation Rules for Limiting Jacobians and Gradients) Let $F, G : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}^m$, $H : \tilde{\mathcal{D}} \subset \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^p$, $F(\mathcal{D}) \subset \tilde{\mathcal{D}}$, and $f, g : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ be locally Lipschitz continuous. Then the following statements hold true:

- (i) $\partial^L(\alpha F(x)) = \alpha \partial^L(F(x))$ for $\alpha \in \mathbb{R}$.
- (ii) $\partial^L(H \circ F)(x) \subset \partial^L H(F(x)) \partial^L F(x)$
- (iii) $\partial^L(F \pm G)(x) \subset \partial^L F(x) \pm \partial^L G(x)$
- (iv) $\partial^L(f \cdot g)(x) \subset g(x) \partial^L f(x) + f(x) \partial^L g(x)$
- (v) $\partial^L|f| \begin{cases} = \text{sgn}(f) \partial^L f & \text{if } f \neq 0 \\ \subseteq -\partial^L f \cup \partial^L f & \text{if } f = 0 \end{cases}$

Analogous, one obtains differentiation rules for Clarke's extension by taking the convex hull on both sides of the

inclusions in the Prop. 2. In both cases, for limiting derivatives ∂^L and Clarke's extension ∂^C , all inclusions in Prop. 2 can be proper, i.e., do not hold as identities in general. The direction of the inclusions has two consequences, which we may label as the bad news and the good news. The bad news is that the inclusions in above lemma point the wrong way, if one wishes to calculate generalized Jacobians or gradients by differentiation rules, because the elements on the right-hand side combinations are not guaranteed to belong to the generalized derivatives of the actual function. Even when one has identities the number of limiting Jacobians and of extremal Clarke Jacobians can grow drastically in each operation. On the other hand, the good news is that the inclusions point the right way to show that all abs-smooth functions are semi-smooth in the following sense.

Corollary 1 All abs-smooth functions $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ are strongly semi-smooth in that at any $\chi \in \mathcal{D}$

$$\sup_{J \in \partial^L F(x+s)} \|F(x+s) - F(x) - Js\| = \mathcal{O}(\|s\|^2),$$

where $\partial^L F(x+s)$ can equivalently be replaced by $\partial^C F(x+s)$ as customary in the literature.

Strong semi-smoothness is a special case of semi-smoothness where the error term $\mathcal{O}(\|s\|^2)$ is relaxed to $\mathcal{O}(\|s\|)$, like for example $\mathcal{O}(\|s\|^p)$ with some $p > 1$. This property still holds for all semi-algebraic functions in the forth box of Fig. 1 as shown in [4], whereas we obtain that the strong version holds for all piecewise smooth functions in the third box. The main benefit of semi-smoothness is the following convergence result for the natural generalization of the Newton method to the nonsmooth case.

Proposition 3 Suppose $\partial^L F(\hat{x})$ contains only nonsingular matrices at a given root \hat{x} of an abs-smooth vector function $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Then, when started at an χ_0 sufficiently close to \hat{x} , any iteration

$$x_{k+1} = x_k - J_k^{-1} F(x_k) \text{ for } J_k \in \partial^L F(x_k)$$

is well defined and converges quadratically to \hat{x} , unless exactly $x_k = \hat{x}$ for some finite k .

Of course for merely semi-smooth functions one obtains just Q-superlinear rather than Q-quadratic convergence in the sense of [29]. The well-definedness follows from the uniform boundedness of all J_k^{-1} , which is a consequence of the regularity assumption on $\partial^L F(\hat{x})$ and the outer semi-continuity according to Lemma 1. For more details of the proof see for example [23]. Some authors allow any $J_k \in \partial^C F(x_k)$ and correspondingly make the stronger assumption that all elements of the Clarke differential $J_k \in \partial^C F(\hat{x})$ must be nonsingular.

Let us look at the standard Rosenbrock example

$$\min f(x, y) = (x-1)^2 + 100(y-x^2)^2 \text{ s.t. } \log(x) \geq 0$$

for $(x, y) \in \mathbb{R}^2$, where we have added the constraint $\log(x) \geq 0$. Computing the gradients of objective and constraint, introducing a Lagrange multiplier $\lambda \in \mathbb{R}_+$, and adding the complementarity condition in *min* form using the reformulation shown above one gets the abs-smooth KKT system in \mathbb{R}^3

$$F(x, y, \lambda) = \begin{bmatrix} 2(x-1) - 400x(y-x^2) - \lambda/x \\ 200(y-x^2) \\ \log(x) + \lambda - |\log(x) - \lambda| \end{bmatrix} = 0.$$

There is a unique solution $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{\lambda}) = (1, 1, 0)$, which is lacking strict complementarity as both the constraint $\log(x)$ and its multiplier λ vanish. The Jacobian $F'(x, y, \lambda)$ of this system is given by

$$\begin{bmatrix} 2 - 400y + 1200x^2 + \lambda/x^2 & -400x & -1/x \\ -400x & 200 & 0 \\ (1+\sigma)/x & 0 & 1-\sigma \end{bmatrix},$$

where $\sigma = \text{sgn}(\log(x) - \lambda)$. Along the curved kink $\{\log(x) = \lambda\}$ there are two limiting Jacobians defined by $\sigma = -1$ and $\sigma = 1$, whose determinants at the minimizer $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{\lambda})$ are easily calculated as 800 and 400, respectively. Hence, both limiting Jacobians are nonsingular themselves and the same is true for their convex combinations in $\partial^C F(\hat{x})$. Therefore, the generalized Newton method converges according to the proposition quadratically, which happens in fact from all initial points (x, y, λ) with $x > 0$ so that $\log(x)$ stays well defined.

Even more so than in the smooth case, the domains from where Newton's method, i.e., successive linearization, can be guaranteed to converge to a particular root are usually very small. One may therefore ask for global or at least regional convergence results that also establish the existence of roots in the first place. A promising approach would seem to be successive piecewise linearization based on the abs-smooth structure as discussed in the following section. While such abs-linear models yield a much better fit with the given nonsmooth vector function, computing their roots is naturally a much more difficult, because combinatorial, task. Whereas square linear equation systems are either nonsurjective or nonsingular the solvability of piecewise linear systems $F(x)=y$ can be ensured by three different states, namely we have the following equivalences and implications

$$\begin{array}{c} \text{Bijectivity} \iff \text{Injectivity} \implies \text{Openness} \\ \Downarrow \\ \text{Surjectivity} \iff \text{Coherent Orientation} \end{array}$$

While surjectivity makes in principle any y reachable from at least one $x \in F^{-1}(y)$, lack of openness means that small perturbations of y can sometimes only be accommodated by large shifts in x , which poses a serious difficulty for numerical algorithms. In fact, there are no algorithms for solving general nonopen, piecewise linear systems other

than exhaustive search, which has by its nature exponential complexity. Openness is equivalent to coherent orientation [32] in that the determinants of all linear pieces are either positive or all negative. Unfortunately, this property is not stable with respect to small perturbations in the natural topology as discussed in [10] and as proven in [31] its verification is NP-hard. Hence we can conclude that, like in the smooth scenario, solving systems of nonsmooth equations, without a starting point rather close to a root, is computationally hard if not altogether impossible. The same holds true for constrained optimization problems since there, just reaching feasibility, requires the solution of systems of equations and/or inequalities. Fortunately, finding unconstrained local minimizers of scalar functions is again a much more tractable task, at least in the abs-smooth case.

Implications of the Abs-linear Approximation

First, we discuss various properties of the abs-linear model $\Delta f(\hat{x}; \Delta x)$ near $\Delta x = 0$ and how they impact corresponding properties of the objective f near the development point \hat{x} . The generalized Taylor expansion (4) immediately implies that \hat{x} can only be a local minimizer of f if $\Delta x = 0$ is a local minimizer of $\Delta f(\hat{x}; \Delta x)$. We call these properties Minimality (MIN) and First Order Minimality (FOM), respectively. Similarly, any locally supporting hyperplane of f at \hat{x} , the existence of which is abbreviated by SUP, must also be a supporting hyperplane of $\Delta f(\hat{x}; \Delta x)$ at $\Delta x = 0$ i.e., we have first order supportability (FOS) such that $SUP \Rightarrow FOS$. Finally, it follows rather easily that f can only be convex near \hat{x} , abbreviated by CON, if the first order model $\Delta f(\hat{x}; \Delta x)$ is convex in a neighborhood of the origin, abbreviated as FOC. It was shown in [34] that FOC is already required by subdifferential regularity (REG) [28] a slight generalization of convexity. These implications are depicted in the upper part of Fig. 2.

Hence, we have obtained necessary conditions for local properties of f in terms of its piecewise linearization $\Delta f(\hat{x}; \Delta x)$ without any sort of constraint qualification. In contrast, the linearization of constraints in smooth optimization may destroy local optimality, unless one assumes Linear Independence (LICQ) or Mangasarian Fromovitz (MFCQ) constraint qualification, or some relaxation. However, we do need regularity assumptions on $\Delta f(\hat{x}; \Delta x)$ in order to establish the converse implications, usually under certain additional positive curvature conditions (POSC). Now let us have a closer look at the piecewise structure of f and its abs-linearization. Theoretically, combining in the abs-smooth procedure (3) consecutive smooth elemental functions into larger smooth elemental functions, one obtains for f the so-called reduced abs-normal form

$$z = F(x, |z|), \quad y = f(x) \equiv \varphi(x, |z|), \quad (5)$$

with $F \in C^\infty(\mathbb{R}^{n+s}, \mathbb{R}^s)$ and $\varphi \in C^\infty(\mathbb{R}^{n+s}, \mathbb{R}^m)$. In other words, all intermediate variables v_i that do not occur as arguments of absolute values have been eliminated so that only the so-called *switching variables* z_i for $i=1\dots s$ are left. In practical calculations one only needs the derivative matrices and vectors

$$Z \equiv \frac{\partial}{\partial x} F(x, |z|) \in \mathbb{R}^{s \times n}, \quad L \equiv \frac{\partial}{\partial |z|} F(x, |z|) \in \mathbb{R}^{s \times s}, \\ a \equiv \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x, |z|) \in \mathbb{R}^n, \quad b \equiv \frac{\partial}{\partial |z|} \varphi(x, |z|) \in \mathbb{R}^s,$$

which can be accumulated from the loop (3) in an AD like fashion at any given argument $(\hat{x}, |\hat{z}|)$. It follows immediately from the acyclicity condition $k < i < j$ in (3) that $L = L(x, |z|)$ is strictly lower triangular. Therefore, one obtains the components of $z = z(x)$ one by one as piecewise smooth Lipschitz continuous functions of x .

Now the abs-linear approximation $\Delta f(\hat{x}; \Delta x)$ satisfying (4) is given by the abs-normal form

$$\tilde{z} = c + Z\Delta x + L|\tilde{z}| \quad \text{and} \quad \Delta y = a^\top \Delta x + b^\top |\tilde{z}|$$

where $c = \hat{z} - Z\hat{x} - L|\hat{z}|$. This rather concise representation of $\Delta f(\hat{x}; \Delta x)$ can be used to check the various properties we mentioned, i.e., FOM, FOC, FOS, and also to calculate limiting gradients. They are extremely useful because without any additional assumptions it was proven in [9] and [22] that

Proposition 4 (Conical gradients) All limiting gradients of $\Delta f(\hat{x}; \Delta x)$ at $\Delta x = 0$ are limiting gradients of $f(x)$ at $x = \hat{x}$ such that

$$\emptyset \neq \partial_{\Delta x}^L \Delta f(\hat{x}; \Delta x)|_{\Delta x=0} \subset \partial_x^L f(x)|_{\hat{x}}.$$

By taking the convex hull of both sides we immediately obtain another implication, namely that Clarke stationarity of Δf implies Clarke stationarity of f , so that in Lemma 2 the necessary minimality condition $0 \in \partial^C f(\hat{x})$ can be strengthened to $0 \in \text{conv}(\partial^L \Delta f(\hat{x}; 0))$. Also, since $\partial^C \Delta f(\hat{x}; 0)$ is a nonempty polytope, i.e., finite polyhedron, spanned by $\partial^L \Delta f(\hat{x}; 0)$ it is always possible to compute one of its elements, albeit possibly with a combinatorial complexity. Consequently, abs-linearization opens up the possibility to constructively calculate generalized gradients and Jacobians, which cannot be computed directly using the rules in Prop. 2 because they are inclusions in the wrong direction. Furthermore, it can be shown that the elements $g \in \Delta f(\hat{x}; \Delta x)$ are *conically active*. That is, there must exist a selection function f_σ such $g = \nabla f_\sigma(\hat{x})$ and the tangent cone of the coincidence set $\{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) = f_\sigma(x)\}$ at \hat{x} has a nonempty interior. Before giving the precise

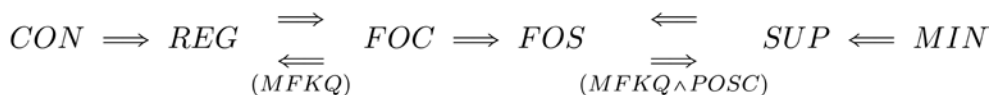


Fig. 2: Relations between properties of f at \hat{x} and $\Delta f(\hat{x}; \Delta x)$ at $\Delta x = 0$

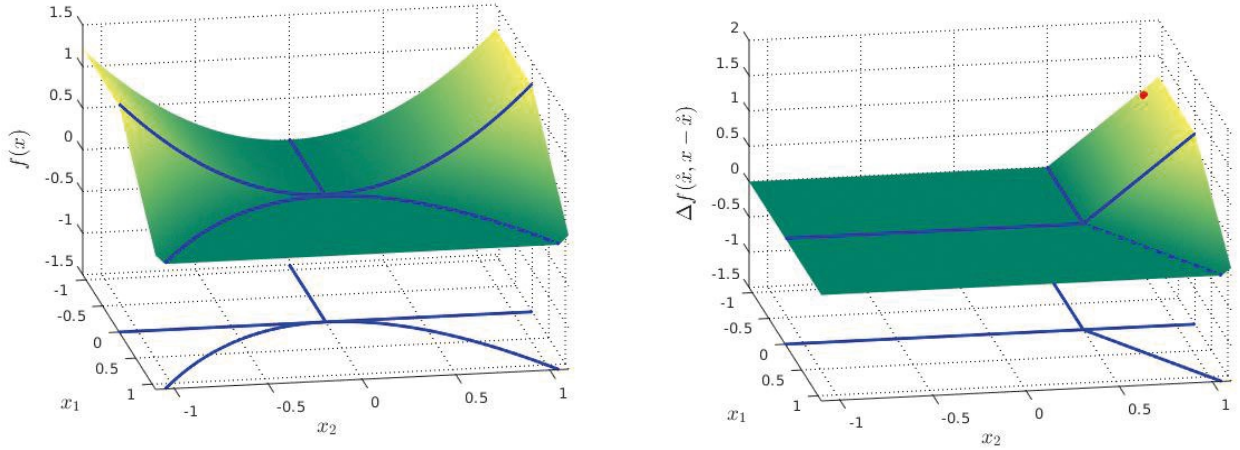


Fig. 3: The half-pipe function and its abs-linearisation at $\hat{x} = (-1, 1)$

definition of the f_σ we look at the example $f : \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}$, $f(x) = \max(x_2^2 - \max(x_1, 0), 0)$ called half-pipe function. The nonconvex abs-smooth objective has the abs-normal form

$$z_1 = x_1, \quad z_2 = x_2^2 - \frac{1}{2}(x_1 + |z_1|), \quad y = \frac{1}{2}(z_2 + |z_2|).$$

The function and its piecewise linear model generated at $\hat{x} = (-1, 1)$ are illustrated in Fig. 3, where the nonsmooth parts are marked with blue lines. One can see that even from this development point \hat{x} deep in the smooth region the abs-linearization "knows" about the kinks at some distance, even though it simplifies them globally. More interesting is the origin $\hat{x} = 0 \in \mathbb{R}^2$ where f is even differentiable with $\nabla f(0) = 0$ and we have

$$\partial_{\Delta x}^L \Delta f(0; 0) = \{(0, 0)\} \subsetneq \{(0, 0), (-1, 0)\} = \partial_x^L f(0).$$

The gradient $g = (-1, 0)$ occurs only in the double cusp region along the x_2 -axis and is therefore not conical. The zero gradient occurs as limit in the parabolic region to the right of that axis and the two quadrants to the left, which have all open tangent cones at 0. Generally, it follows from differentiability of f at some \hat{x} that the conical differential

is the singleton $\partial^L \Delta f(\hat{x}; 0) = \{\nabla f(\hat{x})\}$, whereas $\partial^L f(\hat{x})$ and thus $\partial^C f(\hat{x})$ can contain extraneous elements, like here the generalized gradient $g = (-1, 0)$.

The combinatorial aspect of the evaluation can be expressed in terms of the vector $\sigma(x) \equiv \text{sgn}(z(x))$ and the corresponding diagonal matrix $\Sigma = \text{diag}(\sigma)$. More precisely, for a fixed signature $\sigma \in \{-1, 0, 1\}^n$ we obtain the domain

$$\begin{aligned} P_\sigma &\equiv \{x \in \mathbb{R}^n \mid \text{sgn}(z(x)) = \sigma\} \\ &\subset \bar{P}_\sigma \equiv \{x \in \mathbb{R}^n \mid \Sigma z(x) \geq 0\}, \end{aligned}$$

which may be empty. Otherwise, the system

$$z - F(x, \Sigma z) = 0$$

has a locally unique solution $z^\sigma = z^\sigma(x)$ due to its Jacobian with respect to z being a unit triangular $s \times s$ matrix. Moreover, the solution is smooth and has the well defined Jacobian

$$\nabla_z z^\sigma \equiv \frac{\partial}{\partial x} z^\sigma = (I - L\Sigma)^{-1} Z \in \mathbb{R}^{s \times n}, \quad (6)$$

where $(Z, L) = \nabla F$ is evaluated at $(x, z^\sigma(x))$. As a consequence of the implicit function theorem, the selection function and its gradient, i.e.,

$$\begin{aligned} f_\sigma(x) &\equiv \varphi(x, z^\sigma(x)) \quad \text{and} \\ \nabla f_\sigma(x) &\equiv a + b^\top \Sigma (I - L\Sigma)^{-1} Z \end{aligned} \quad (7)$$

are continuously defined on some open neighborhood of the closed set \bar{P}_σ . It is easy to see that if $\hat{z} \equiv z(\hat{x})$ has t zero components, then there exist 2^t such *branch* problems $\min f_\sigma(x)$ s.t. $\Sigma z(x) \geq 0$ that have to be considered if one wants to establish the local minimality of f at \hat{x} or otherwise find a descent path. Hence, one obtains the following result:

Proposition 5 The point \hat{x} is a local minimizer of f if and only if it is a local minimizer of f_σ on \bar{P}_σ for all σ with $\Sigma \hat{z} \geq 0$, where $\det(\Sigma) \neq 0$ without loss of generality.

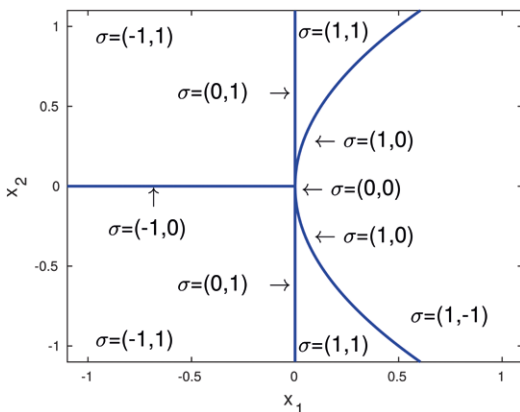


Fig. 4: Signature vectors of the half-pipe function

Here we encounter again the combinatorial aspect of nonsmooth optimization, which would make it quite costly to verify or falsify local optimality, if f was only given in the fragmented form (2). Fortunately, we can construct polynomial optimality tests using the abs-normal structure and making the following nondegeneracy assumption.

Proposition 6 (LIKQ) Suppose that at a point $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$ with $\hat{z} \equiv z(\hat{x})$ the *linear independence kink qualification* is satisfied in that for $\hat{\sigma} = \sigma(\hat{x})$ the active Jacobian

$$\hat{V} \equiv \left(e_i^\top \nabla z^{\hat{\sigma}}(\hat{x}) \right)_{\{z_i(\hat{x})=0\}} \in \mathbb{R}^{t \times n} \quad (8)$$

has full row rank t . Then Prop. 4 holds as an equality, and all \hat{P}_σ with $\Sigma \hat{z} \geq 0$ and $\det(\Sigma) \neq 0$ have the interior $P_\sigma \neq \emptyset$. Moreover, then there exists an orthogonal matrix $\hat{U} \equiv U(\hat{x}) \in \mathbb{R}^{n \times (n-t)}$ such that

$$\hat{V} \hat{U} = 0 \quad \text{and} \quad \hat{U}^\top \hat{U} = I.$$

Wherever LIKQ holds the function f will be smooth on P_σ with tangent space $\text{range}(\hat{U})$ but have kinks along certain normal directions in $\text{range}(\hat{V})$. This geometry is similar to the one described by means of a \mathcal{VU} decomposition by Mifflin and Sagastizábal [26] and Lewis [25]. A somewhat surprising consequence of the validity of LIKQ is the following. One may then propagate at \hat{x} individual generalized gradients ∇v_i for each intermediate according to the rules in Prop. 2 choosing freely $\nabla v_i = \pm \nabla v_j$ if $v_i = |v_j|$ at $v_j = 0$. The resulting vectors for the dependent variables are then guaranteed to be limiting vectors as is optimistically assumed in the oracle paradigm.

To analyze the question of optimality further we assume for simplicity that at a candidate optimizer point \hat{x} it holds $\hat{z} = 0$ so that $\hat{\sigma} = 0$ and $\hat{V}^\top = Z$. In the general case one can always perform a local reduction, where the switching variables $z_i(x)$ with $\hat{z}_i \neq 0$ are eliminated like in the original reduction to normal form. Since LIKQ is invariant with respect to this reduction it ensures that the branch problems f_σ such that $\Sigma z(x) \geq 0$ satisfy LICQ for all $\sigma \in \{-1, 1\}^s$. Then one obtains with (6) and (7) after some elementary manipulations the KKT conditions

$$a^\top + \lambda^\top Z = 0 \quad \text{and} \quad b^\top + \lambda^\top (L - \Sigma) \geq 0, \quad (9)$$

where $\lambda \in \mathbb{R}^s$ is a vector of Lagrange multipliers, which is clearly independent of σ . Now the key observation is that the inequality holds for all σ if and only if

$$b + L^\top \lambda \geq |\lambda| \equiv \max(\Sigma \lambda, -\Sigma \lambda) \quad \text{for one } \sigma \in \{-1, 1\}^s.$$

This means that all branch problems satisfy smooth first order minimality conditions at \hat{x} if and only if this is true just for $\sigma = \text{sgn}(\lambda)$ or for any pair of selections $f_\sigma, f_{-\sigma}$. In any case there is no need to look at the 2^s branch problems, and instead we have just a cubic arithmetic effort to perform some standard numerical linear algebra operations.

In this way we can realize the general philosophy of dealing with nonsmoothness at the level of the piecewise linearization with only a finite number of numerical linear algebra operations. Under LIKQ this number is generally polynomial in the problem size $n+s$, but without this nondegeneracy assumption, operations count are likely exponential. However, we could show that even under LIKQ the seemingly harmless question whether $\Delta f(\hat{x}; \Delta x)$ is convex is co-NP complete [34].

In this section we have elaborated how many important properties of f are reflected and can be derived from the first order abs-linear approximation $f(x) \approx f(\hat{x}) + \Delta f(\hat{x}; \Delta x)$. It should be at least of theoretical interest that depending on the smoothness of the elemental functions this expansion can be extended to an arbitrary order [11].

Proposition 7 If f belongs to $C_{\text{abs}}^\infty(\mathcal{D})$ there exist at all $\hat{x} \in \mathcal{D}$ coefficient functions $\Delta^d f(\hat{x}; \Delta x)$ that are abs-polynomial of degree d and of size $\mathcal{O}(\|\Delta x\|^d)$ such that the series

$$f(\hat{x} + \Delta x) = \sum_{d=0}^{\infty} \Delta^d f(\hat{x}; \Delta x)$$

converges on some ball $\{\|\Delta x\| < \rho\} \subset \mathcal{D} - \hat{x}$ of radius $\rho \in (0, \infty]$ absolutely.

Successive Abs-Linear Minimization

For constrained smooth optimization, the *successive quadratic programming* (SQOP) approach computes the solution of a general nonlinear constrained optimization problem by solving a sequence of quadratic optimization problems. To actually optimize abs-smooth objective functions, we advocate a similar idea, namely solving a sequence of piecewise linear problems to find the minimizer of the original abs-smooth objective. This yields an iterative scheme of the form

$$x_{k+1} = x_k + \underset{\Delta x}{\text{argmin}} \{ \Delta f(x_k; \Delta x) + \frac{q_k}{2} \|\Delta x\|^2 \}, \quad (10)$$

called SALMIN for Successive Abs-Linear MINimization. It can be interpreted as a quadratic overestimation method, where the error between the local piecewise linear model $f(x_k) + \Delta f(x_k; \Delta x)$ and the real function f is bounded by a power of the distance. Furthermore, it is in some sense related to proximal point methods. However, in Eq. (10) the local piecewise linear model $\Delta f(x_k; \Delta x)$ at the current iterate x_k is used instead of the original abs-smooth function f . This makes the solution of the inner optimization problem considerably easier in comparison to the usual setting for proximal point methods.

Moreover, without looking at generalized gradients or ε -subdifferentials SALMIN has a very simple stopping criterion. The outer iteration terminates as soon as the objective function reduction promised by the solution of the inner problem falls below a user supplied tolerance.

It was shown in [9] that the SALMIN approach generates a sequence of iterates whose cluster points are first order minimal. If increments Δx that are merely Clarke stationary for Δf are accepted also, then the cluster points are guaranteed to be also Clarke and in fact conic stationary as shown in [7] covering therefore also the nonconvex case. Additionally, we proved that SALMIN achieves a linear rate of convergence under LIKQ and POSC with strict complementary. When the minimizer is sharp in that f exhibits linear growth in its neighborhood, one obtains even quadratic convergence [14].

To solve the inner, piecewise linear optimization problem we propose to use a reflection-based approach where signature vectors are reflected as described in more detail in [16]. Under LIKQ the minimality of \hat{x} on the corresponding polyhedra determined by the two reflected signatures already ensures that \hat{x} is a local minimizer of f on \mathcal{D} .

A first implementation of SALMIN outperforms other nonsmooth solvers when applied to the abs-linear Nesterov-Rosenbrock test function $f: \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ studied in [17], in that it reaches the only local and global minimizer in 2^n iterations when started at an initial point chosen such that all other $2^{n-1}-1$ Clarke stationary points lie on the way to the minimizer. All tested alternative nonsmooth solvers got stuck in one of these numerous Clarke stationary points without reaching the minimal point. This observation illustrates immediately the importance of the constructive and affordable optimality criterion. Numerical results ranging from academic test problems to machine learning tasks like the LASSO problem including also the favorable comparison to other nonsmooth solvers can be found in [7,13].

Recently it has been discovered that one can easily generate for $\Delta f(x_k; \Delta x)$ an additive decomposition into a convex and a concave abs-linear function [16]. This gives rise to variations of the well known Difference of Convex Functions Algorithm (DCA), which we are currently exploring. The question whether one can compute global minimizers of (regularized) abs-linear functions by anything but exhaustive search remains largely unexplored.

Summary and Outlook

After mentioning several applications of optimization, where nonsmooth objective functions arise, we discuss their properties in terms of informational connectedness. While real analytic functions are globally connected by their values, piecewise smooth functions are almost completely disconnected if they are only specified in the fragmented form (2). In that situation, the main algorithmic tasks of minimization, namely, checking optimality and finding a descent step, can only be performed piece by piece in an exhaustive manner or via stochastic sampling. We observe that practically all objectives are evaluated by abs-smooth procedures that represent a lot of intrinsic connectivity between their properties in neighboring smooth domains. Much of this structure is faithfully

reflected in the local abs-linear approximation, which can be used to check optimality properties as described in the third section and to design iterative algorithms as sketched in the fourth section. Throughout we note that nonsmoothness has ingrained combinatorial aspects, which can make the verification of certain properties and the computation of even just local minimizers NP-hard, unless the Linear Independence Kink Qualification (LIKQ) is satisfied. Under that cubically verifiable nondegeneracy condition, we present optimality tests and step calculations of polynomial complexity. Current implementations resemble SQOP methods involving pivoting on kinks and the factorization of active Jacobians. Purely vector based variants similar to steepest descent with momentum terms are under development. Since arbitrary piecewise linear functions can be represented in reduced abs-linear form, this convenient model can serve as a prediction function in supervised learning. It generalizes neural nets with pure ReLU activation.

References

- [1] J. Actor, M. Knepley. An algorithm for computing Lipschitz inner functions in Kolmogorov's superposition theorem. Technical Report 1712.08286, arXiv, 2017.
- [2] www.autodiff.org.
- [3] A. Berman, M. Dur, N. Shaked-Monderer. Open problems in the theory of completely positive and copositive matrices. Electron. J. Linear Algebra, 29:46–58, 2015.
- [4] J. Bolte, A. Daniilidis, A. Lewis. Tame functions are semismooth. Math. Program., 117(B):5–19, 2009.
- [5] D. Bressoud. Was calculus invented in India? Coll. Math. J., 33:2–13, 2002.
- [6] F. Clarke. Optimization and Nonsmooth Analysis. SIAM, 1990.
- [7] S. Fiege, A. Walther, A. Griewank. An algorithm for nonsmooth optimization by successive piecewise linearization. Math. Program., 177(A):343–370, 2019.
- [8] A. Goldstein. Optimization of Lipschitz continuous functions. Math. Program., 13:14–22, 1977.
- [9] A. Griewank. On stable piecewise linearization and generalized algorithmic differentiation. Optim. Methods Softw., 28:1139–1178, 2013.
- [10] A. Griewank, J.-U. Bernt, M. Radons, T. Streubel. Solving piecewise linear equations in abs-normal form. Linear Algebra Appl., 471:500–530, 2015.
- [11] A. Griewank, T. Streubel, C. Tischendorf. On the abs-polynomial expansion of piecewise smooth functions. Available at Optimization Online.
- [12] A. Griewank, A. Walther. Evaluating Derivatives: Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation. SIAM, 2008.
- [13] --- Finite convergence of an active signature method to local minima of piecewise linear functions. Optim. Methods Softw., 34:1035–1055, 2019.
- [14] --- Relaxing kink qualifications and proving convergence rates in piecewise smooth optimization. SIAM J. Optim., 29:262–289, 2019.
- [15] --- Beyond the Oracle: Opportunities of Piecewise Differentiation, In: Numerical nonsmooth optimization. State of the art algorithms, pp. 331–361. Springer, 2020.
- [16] --- Polyhedral DC decomposition and DCA optimization of piecewise linear functions. Algorithms, 13:166, 2020.
- [17] M. Gürbüzbalaban, M.L. Overton. On Nesterov's nonsmooth Chebyshev-Rosenbrock functions. Nonlinear Anal: Theory, Methods & Appl., 75:1282–1289, 2012.

- [18] H. Hamacher, S. Nickel. Classification of location models. *Location Science*, 6:229–242, 1998.
- [19] S. Han, O. Mangasarian. Exact penalty functions in nonlinear programming. *Math. Program.*, 17:251–269, 1979.
- [20] L. Hegerhorst-Schultchen, C. Kirches, M. Steinbach. On the relation between MPECs and optimization problems in abs-normal form. *Optim. Methods Softw.*, 35:560–575, 2020.
- [21] N. Karitsa, M. Mäkelä. Limited memory bundle method for large bound constrained nonsmooth optimization: convergence analysis. *Optim. Methods Softw.*, 25:895–916, 2010.
- [22] K.A. Khan, P.I. Barton. Evaluating an element of the Clarke generalized Jacobian of a composite piecewise differentiable function. *ACM Trans. Math. Softw.*, 39:28, 2013.
- [23] D. Klatte, B. Kummer. *Nonsmooth equations in optimization. Regularity, calculus, methods and applications.* Kluwer Academic Publishers, 2002.
- [24] A. Lewis, M. Overton. Nonsmooth optimization via quasi-Newton methods. *Math. Program.*, 141(A):135–163, 2013.
- [25] A.S. Lewis. Active sets, nonsmoothness, and sensitivity. *SIAM J. Optim.*, 13:702–725, 2002.
- [26] R. Mifflin, C. Sagastizábal. A science fiction story in nonsmooth optimization originating at IIASA. *Doc. Math., Extra Vol.:*291–300, 2012.
- [27] *Mixed-integer nonlinear programming 2018.* Special issue of *Optimization and Engineering*, 2019. Volume 20(2).
- [28] B. Mordukhovich. *Variational Analysis and Generalized Differentiation I: Basic Theory.* Springer, 2006.
- [29] J. Ortega, W. Rheinboldt. *Iterative solution of nonlinear equations in several variables.* SIAM, 2000.
- [30] R.T. Rockafellar, R.J.-B. Wets. *Variational Analysis.* Springer, 1998.
- [31] S. Rump. Theorems of Perron-Frobenius type for matrices without sign restrictions. *Linear Algebra Appl.*, 266:1–42, 1997.
- [32] S. Scholtes. *Introduction to Piecewise Differentiable Functions.* Springer, 2012.
- [33] S. Vavasis, Y. Ye. A primal-dual interior point method whose running time depends only on the constraint matrix. *Math. Program.*, 74(A):79–120, 1996.
- [34] A. Walther, A. Griewank. Characterizing and testing subdifferential regularity in piecewise smooth optimization. *SIAM J. Optim.*, 29:1473–1501, 2019.



Andreas Griewank, studied mathematics with minor physics in Clausthal-Zellerfeld and Freiburg. After his Diplom in 1977 he completed graduate studies at the Australian National University with an MSc in 1978 and a PhD in 1980. Since a postgraduate stay in Cambridge under the mentorship of M.J.D.Powell and a five year tenure at Argonne, his research and software development efforts have been focused on nonlinear and recently nonsmooth optimization, as well as the required sensitivity analysis. He has held professorships at universities in Dallas, Dresden, Berlin and Ibarra in Northern Ecuador. He belongs to the SIAM Fellow class of 2017 and is now a professor emeritus of the Humboldt-Universität zu Berlin.



Andrea Walther, studied business mathematics at Universität Bayreuth and got her PhD from TU Dresden in 1999, from where she also received her habilitation in 2008. In 2009, she became professor for Mathematics and its applications at Universität Paderborn. Since October 2019, Andrea Walther is MATH+ Professor for Mathematical Optimization at the Humboldt-Universität zu Berlin. Her research interests are in the field of nonlinear optimization with a focus on adjoint-based optimization and non-smooth optimization as well as in algorithmic differentiation.



GAMM Archive for Students

An Open-Access Online Journal run by the GAMM Juniors



STUDY

DISCOVER

PUBLISH RESULTS



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



GAMM MEMBERS:

There are lots of reasons to

JOIN SIAM

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

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.



“ 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



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:

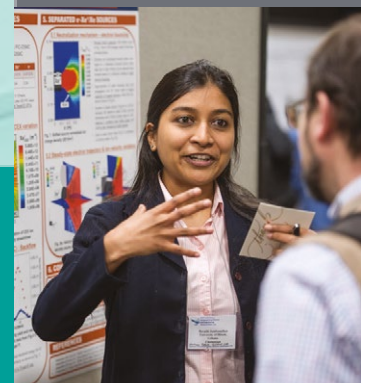
- *SIAM News* and *SIAM Review*
- Discounts on SIAM books, journals, and conferences
- Eligibility to join SIAM activity groups
- SIAM Unwrapped (member e-newsletter)
- The ability to nominate two students for free membership
- Eligibility to vote for or become a SIAM leader
- Eligibility to nominate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

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



Dr.-Ing. Martin Diehl absolvierte sein Diplomstudium des Maschinenwesens mit den Vertiefungsrichtungen Werkstofftechnik und numerische Mechanik an der TU München von 2005 bis 2010. Im Anschluss daran arbeitete er als Doktorand am Max-Planck-Institut für Eisenforschung (MPIE) in Düsseldorf in der Gruppe von PD. Dr. Franz Roters (Abteilung Mikrostrukturphysik und Legierungsdesign, Prof. Dierk Raabe). Im Jahre 2015 wurde er mit der Arbeit "High-Resolution Crystal Plasticity Simulations" an der RWTH Aachen mit summa cum laude promoviert. Als PostDoc (2015–2019) und Gruppenleiter für Integrated Computational Materials Engineering (2019–2020) blieb er zunächst – unterbrochen von Auslandsaufenthalten am National Institute for Materials Science (Tsukuba, Japan 2017) und an der University of California, Los Angeles (2019) – am MPIE. Seit Oktober ist er Professor für Computational Materials Science an der Katholieke Universiteit Leuven in Belgien.

Ziel von Herrn Diehls Forschung ist es, das mechanische Verhalten von metallischen Werkstoffen zu verstehen und zu modellieren. Dies erfordert die Betrachtung der internen Mikrostruktur und ihrer Evolution bei mechanischer oder thermischer Belastung. Mikrostrukturbasierte Simulationen sind daher das Hauptthema seiner wissenschaftlichen Arbeit. Diese Simulationen führt er in enger Zusammenarbeit mit experimentell arbeitenden Kollegen durch. Der kritische Vergleich von experimentellen Ergebnissen mit berechneten Vorhersagen dient dabei als Benchmark um die Vorhersagekraft einer Theorie oder eines Modells zu beurteilen. Experimente dienen auch dazu die für die Simulation notwendigen Parameter zu bestimmen. Teilweise werden ‚reale‘ Experimente auch durch ‚virtuelle‘ Experimente, d.h. Simulationen auf kleineren Längenskalen ergänzt oder ersetzt. So können physikalisch motivierte Kontinuumsmodelle entwickelt und parametrisiert werden. Beispielsweise hat Martin Diehl an der Entwicklung eines Kristallplastizitätsmodells für Wolfram basierend auf Ergebnissen von Simulationen auf atomistischer Längenskala mitgearbeitet [1]. Kristallplastizitätsmodelle sind insbesondere geeignet um die Charakteristika plastischer Verformung in Metallen – elastische und plastische Anisotropie, Kaltverfestigung, Dehnraten- und Temperaturabhängigkeit – in der Kontinuumsmechanik abzubilden.

Während seiner Promotion beschäftigte sich Martin Diehl schwerpunktmäßig mit Dualphasenstählen [2]. Diese Stähle bestehen aus einer vergleichsweise duktilen Matrix aus Ferrit die mit festem, aber sprödem Martensit verstärkt ist. Das mechanische Verhalten eines Dualphasenstahls hängt daher sowohl von den anisotropen Eigenschaften der beiden Phasen als auch dem Volumenanteil und Verteilung des Martensits ab. Um die komplexe Mikrostruktur von industriell eingesetzten Dualphasenstählen simulieren zu können, wurde zunächst ein schnelles numerisches Lösungsverfahren weiterentwickelt und auf für die Verwendung in kristallplastischen konstitutiven Gesetzen angepasst [3,4]. Basierend auf diesen Vorarbeiten wurde

STECKBRIEF



dann das mikromechanische Verhalten verschiedener Mikrostrukturen – entweder experimentell ermittelt [5] oder künstlich erzeugt – untersucht. Ziel dieser Simulationen war es, geeignete Mikrostrukturen zu identifizieren um zielgerichtet Werkstoffe für bestimmte Anforderungen zu entwickeln. Die zur Promotion entwickelten Arbeiten werden am MPIE bis heute verwendet und aktuell durch die Anwendung von maschinellem Lernen erweitert. Dies erlaubt den zielgerichteten Einsatz von Simulationen für die Berechnung von Mikrostrukturen mit vorteilhaften Eigenschaften.

Im Anschluss an seine Promotion, als PostDoc und Gruppenleiter, ergänzte Herr Diehl sein wissenschaftliches Portfolio und untersuchte weitere physikalische Phänomene wie Rekristallisation [6,7] und Schädigung [8]. Bei

dieser Arbeit stand insbesondere die Kopplung mehrerer Modelle im Vordergrund die es im Sinnes des Integrated Computational Materials Engineering (ICME) ermöglicht die Zusammenhänge von Prozess-Struktur-Eigenschaft ganzheitlich zu betrachten [8]. Mikrostruktur-basierte Multiphysik-Simulationen sind in vielerlei Hinsicht herausfordernder als reine Kristallplastizitäts-Simulationen: Durch die starken Wechselwirkungen der verschiedenen Phänomene, ist einerseits die numerische Lösung oftmals deutlich erschwert und andererseits führen falsche Modellannahmen durch die nichtlineare Kopplung der einzelnen Modelle viel leichter zu fehlerhaften Vorhersagen. Das genaue Verständnis der physikalischen Mechanismen auf atomarer Ebenen und robuste numerische Löser sind daher für Multiphysik-Simulationen nochmals wichtiger als für ‚einfache‘ Kristallplastizitäts-Simulationen.

Ein durchgängiger Fokus von Herrn Diehls Tätigkeit war die Entwicklung von DAMASK [10], dem Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit. DAMASK enthält numerische Löser, konstitutive Gesetze und Werkzeuge zur Vorbereitung und Auswertung von Simulationen. DAMASK wurde für die Untersuchung unterschiedlicher Fragestellungen aus den Bereichen Blechumformung, Mikromechanik und Legierungsdesign verwendet [11]. Als Open Source Soft-

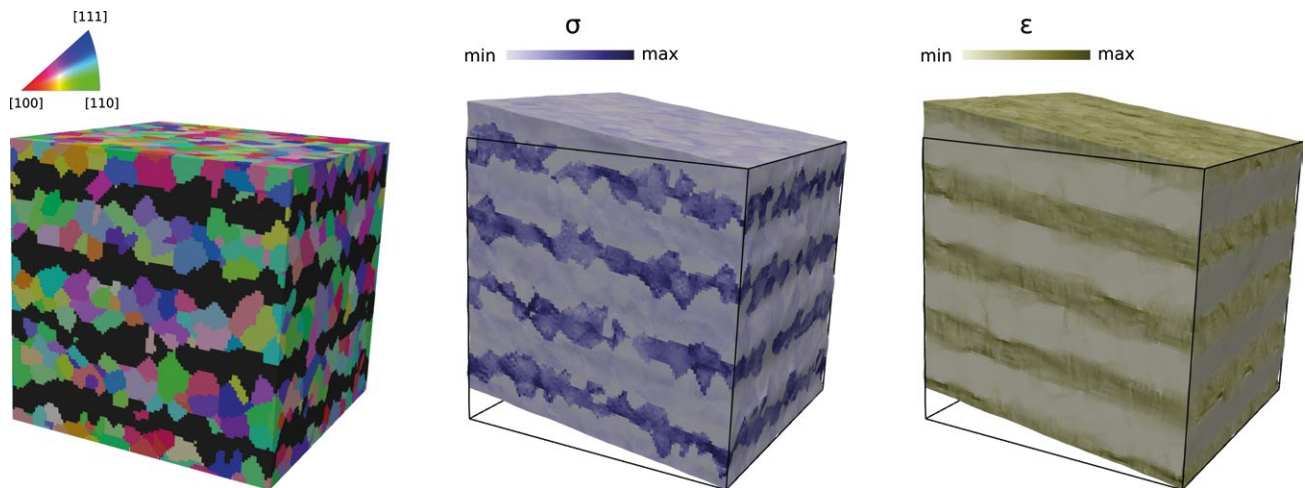


Abb. 1: Kristallplastizitäts-Simulation eines Dualphasenstahl: Links: Undeformierte Mikrostruktur, die ferritischen Körner sind nach ihrer kristallographischen Orientierung (inverse Polfigur, IPF) eingefärbt und die martensitische Phase ist in schwarz dargestellt Mitte: Vergleichsspannung bei ca. 10% Scherverformung Rechts: Vergleichsdehnung bei ca. 10% Scherverformung

ware wird es von zahlreichen Wissenschaftlern sowohl in Deutschland, z.B. an der TU München (Lehrstuhl für Werkstoffkunde und Werkstoffmechanik), an der Universität Kassel (Institut für Werkstofftechnik, Qualität und Zuverlässigkeit) und der RWTH Aachen (Institut für Bildsame Formgebung, Institut für Eisenhüttenkunde) als auch weltweit (z.B. Australian Nuclear Science and Technology Organisation, Australien; Paul Scherrer Institut, Schweiz; Michigan State University, USA; und Imperial College, England) benutzt und teilweise auch weiterentwickelt. Die nachhaltige Entwicklung von Software im Bereich Werkstoffmechanik und Werkstoffkunde wird auch ein Schwerpunkt von seiner Tätigkeit an der Katholieke Universiteit Leuven (KU Leuven) sein. Ziel seiner Arbeit in Belgien ist es, nicht nur neue Modelle und Methoden im Bereich der computergestützten Materialwissenschaft zu entwickeln, sondern sie auch für Anwender aus dem akademischen Bereich und der Industrie nutzbar zu machen.

Literatur

- [1] D. Cereceda, M. Diehl, F. Roters, D. Raabe, J.M. Perlado, and J. Marian. Unraveling the temperature dependence of the yield strength in single-crystal tungsten using atomistically-informed crystal plasticity calculations. *International Journal of Plasticity*, 78:242–265, 2016.
- [2] C. C. Tasan, M. Diehl, D. Yan, M. Bechtold, F. Roters, L. Schemmann, C. Zheng, N. Peranio, D. Ponge, M. Koyama, K. Tsuzaki, and D. Raabe. An overview of dual-phase steels: Advances in microstructure-oriented processing and micromechanically guided design. *Annual Review of Materials Research*, 45:391–431, 2015.
- [3] P. Eisenlohr, M. Diehl, R. A. Lebensohn, and F. Roters. A spectral method solution to crystal elasto-viscoplasticity at finite strains. *International Journal of Plasticity*, 46:37–53, 2013.
- [4] P. Shanthraj, M. Diehl, P. Eisenlohr, F. Roters, and D. Raabe. Spectral Solvers for Crystal Plasticity and Multi-physics Simulations. In C-H Hsueh, S. Schmauder, C-S Chen, K. K. Chawla, N. Chawla, W. Chen, and Y. Kagawa, editors, *Handbook of Mechanics of Materials*, pages 1347–1372. Springer, Singapore, 2019.
- [5] M. Diehl, D. An, P. Shanthraj, S. Zaeferrer, F. Roters, and D. Raabe. Crystal Plasticity Study on Stress and Strain Partitioning in a Measured 3D Dual Phase Steel Microstructure. *Physical Mesomechanics*, 20(3):311–323, 2017.
- [6] M. Diehl, L. Kertsch, K. Traka, D. Helm, and D. Raabe. Site-specific quasi in situ investigation of primary static recrystallization in a low carbon steel. *Materials Science and Engineering: A*, 755:295–306, 2019.
- [7] M. Diehl and M. Kühbach. Coupled Experimental-Computational Analysis of Primary Static Recrystallization in Low Carbon Steel. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 28:014001, 2020.
- [8] M. Diehl, M. Wicke, P. Shanthraj, F. Roters, A. Brueckner-Foit, and D. Raabe. Coupled Crystal Plasticity-Phase Field Fracture Simulation Study on Damage Evolution Around a Void: Pore Shape Versus Crystallographic Orientation. *JOM*, 69(5):872–878, 2017.
- [9] M. Diehl. Review and outlook: mechanical, thermodynamic, and kinetic continuum modeling of metallic materials at the grain scale. *MRS Communications*, 7(4):735–746, 2017.
- [10] F. Roters, M. Diehl, P. Shanthraj, P. Eisenlohr, C. Reuber, S. L. Wong, T. Maiti, A. Ebrahimi, T. Hochrainer, H-O Fabritius, S. Nikolov, M. Friak, N. Fujita, N. Grilli, K. G. F. Janssens, N. Jia, P. J. J. Kok, D. Ma, F. Meier, E. Werner, M. Stricker, D. Weygand, and D. Raabe. DAMASK – The Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit for Modelling Multi-Physics Crystal Plasticity, Damage, and Thermal Phenomena from the Single Crystal up to the Component Scale. *Computational Materials Science*, 158:420–478, 2019.
- [11] M. Diehl, D. Wang, C. Liu, J. Rezaei Mianroodi, F. Han, D. Ma, P. J. J. Kok, F. Roters, and P. Shanthraj. Solving material mechanics and multiphysics problems of metals with complex microstructures using DAMASK – The Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit. *Advanced Engineering Materials*, 22(3):1901044, 2020.

Kontakt:

Martin Diehl
 NUMA Research Unit
 Department of Computer Science
 Celestijnenlaan 200A, box 2402
 B-3001 Leuven, Belgium

Jun.-Prof. Dr. Christoph Lehrenfeld studierte Computational Engineering Science (CES) an der RWTH Aachen. Im Jahre 2015 promovierte er dort in Mathematik zu numerischen Verfahren in Raum-Zeit-Formulierung für partielle Differentialgleichungen (PDE) auf sich bewegenden Gebieten. Nach Aufhalten an der TU Wien und an der WWU Münster als Postdoktorand in den Jahren 2015 und 2016, übernahm er 2016 eine Juniorprofessur an der Georg-August-Universität Göttingen, an der er im September 2020 eine W2-Professur antritt. Er forscht an modernen Diskretisierungsmethoden für partielle Differentialgleichungen, insbesondere an problemangepassten Varianten der Finite-Elemente-Methode (FEM).

Bereits während seines Diplom-Studiums des CES, welches an der RWTH Aachen in der Fakultät Maschinenbau angesiedelt ist, weckten vor allem die Veranstaltungen, in denen

die Konzeption und die mathematische Analyse numerischer Verfahren behandelt wurden, das Interesse von Herrn Lehrenfeld. Durch seine forschungsnahen Tätigkeiten als studentische Hilfskraft bei Prof. Dr. Joachim Schöberl direkt nach dem Vordiplom kam er in Kontakt mit PDEs wie den Maxwellgleichungen, den Halbleitergleichungen und den inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen. Zugleich lernte er moderne numerische Konzepte wie höhere Ordnung FEM, Discontinuous Galerkin Methoden und Hybridisierung kennen und sammelte Erfahrung auf dem Gebiet der numerischen Softwareentwicklung.

Seine Diplomarbeit [14] zum Thema effizienter divergenzkonformer FEM mit exakt divergenzfreien Geschwindigkeitslösungen für die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen behandelt ein Forschungsthema, auf welchem er heute noch aktiv forscht. Divergenzkonforme Finite-Elemente sind normalstetig über Elementgrenzflächen, können aber in tangentialer Richtung unstetig sein. Die Verwendung eines entsprechenden Finite-Elemente-Raums bei der Diskretisierung der Geschwindigkeit ergibt - bei Kombination mit geeignetem Druckraum - eine exakt divergenzfreie diskrete Geschwindigkeitslösung. Die exakte Divergenzfreiheit der diskreten Lösungen ist eine vergleichsweise ungewöhnliche Eigenschaft; andere Verfahren erfüllen diese oft nur in einem schwächeren Sinne. Die Vorteile sind jedoch vielfältig. Exakte Divergenzfreiheit führt zu energiestabilen Diskretisierungen für die semidiskretisierten Navier-Stokes-Gleichungen und diese sind Druck- und Reynolds-semi-robust [4]. Aufgrund der vielfältigen Robustheitseigenschaften sind diese Verfahren auch für die Simulation komplexer und ggf. turbulenter Strömungen sehr gut geeignet [1]. Diese Vorteile divergenzkonformer Schemata haben jedoch einen Preis: die tangential Stetigkeit muss durch die Variationsformulierung realisiert werden, wie üblich bei nicht-konformer FEM. Dadurch erhöht sich die Anzahl der Unbekannten und die Anzahl der Kopplungen in einer Systemmatrix im Vergleich zu einer konformen FEM. Um divergenzkonforme FEM wettbewerbsfähig zu bekommen, wurden mehrere Modifikationen entwickelt, die die Effizienz der Methode verbessern [5,8,13].

Ein anderes Forschungsfeld, auf welchem Herr Lehrenfeld seit seiner Promotion bei Prof. Arnold Reusken aktiv ist, behandelt die geometrisch nicht-angepasste FEM („unfitted FEM“), die auch unter anderen Namen bekannt ist, wie z.B. „Cut-FEM“, „XFEM“ oder „Finite Cell Method“.

Viele Anwendungen der Simulationswissenschaft beinhalten komplexe und oft auch zeitabhängige Geometrien, wie z.B. Zweiphasenströmungen, die mitunter im DFG Schwerpunktprogramm 1506 „Transport Processes at Fluidic Interfaces“, in dem Herr Lehrenfeld mitwirken durfte, behandelt wurden. Oftmals weisen die betrachteten Geometrien Topologieänderungen oder starke Verformungen auf, was eine große Herausforderung für die numerische Behandlung bedeutet. In den vergangenen zwei Jahrzehnten wurden für diesen Fall Methoden populär bei denen die Geometriebeschreibung vom Berechnungsgitter entkoppelt ist, z.B. mithilfe von Level-Set-Funktionen. Bei diesem Ansatz, der auch bei der unfitted FEM verfolgt wird, erhält man eine flexiblere Handhabung der Geometrie im Vergleich zu traditionellen gitterbasierten Geometriedarstellungen. Mit der Flexibilität der unfitted FEM gehen jedoch viele wichtige Eigenschaften, die für die geometrisch angepasste FEM („fitted FEM“) bekannt und selbstverständlich sind, verloren. So kann z.B. die Implementierung von Dirichletrandbedingungen üblicherweise nur über eine variationelle Form, wie bei der Nitsche-Methode, eingebracht werden. Formulierungen dieser Art leiden häufig unter schlechten Schnittkonfigurationen, die auftreten, wenn die Einschränkung eines Gitterelements auf das physikalisch Gebiet formirregulär wird. Robustheit gegenüber diesen Schnittkonfigurationen ist aber in aller Regel notwendig und erfordert einen sorgfältigen Entwurf von Methoden und linearen Lösern oder den Einsatz von zusätzlichen Stabilisierungsmechanismen. Robustheit und Genauigkeit mit der Flexibilität von unfitted FEM zu kombinieren, ist die zentrale Herausforderung in diesem Forschungsgebiet.

Verfahren, welche beweisbar Konvergenz höherer Ordnung liefern, auch wenn die Geometriebehandlung in die Analyse einbezogen wird, sind rar. Zumeist wird entweder die Geometrie durch eine stückweise planare Darstellung approximiert, was die Verfahren auf eine Genauigkeit niedrigerer

STECKBRIEF



Ordnung beschränkt oder es werden Darstellungsformen höherer Ordnung bemüht, bei denen jedoch die möglichen Schnittkonfigurationen schnell so komplex werden, dass eine genaue und verlässliche numerische Behandlung algorithmisch nicht garantiert werden kann. Für stationäre Probleme, die auf einer Geometriebeschreibung durch Level-Set-Funktionen beruhen, hat Herr Lehrenfeld einen neuen Ansatz erdacht, der die Vorteile stückweise planarer Darstellungen und einer Geometriebeschreibung höherer Ordnung vereint und für mathematisch rigorose Analyse zugänglich ist. Hierbei wird das Gitter lokal so angepasst, dass eine stückweise planare Approximation der Geometrie auf eine Geometriebeschreibung höherer Ordnung verformt wird. Es kann dann zur Berechnung von Integralen der unfitted FEM analog zur isoparametrischen FEM bei der Randapproximation gekrümmter Ränder vorgegangen werden [9]. Für stationäre Geometrien konnten hiermit in den letzten Jahren unfitted FEM höherer Ordnung für skalare Interface-Probleme [3], Zweiphasen-Stokes-Probleme [10] und skalare Oberflächen-PDEs [6] mit beweisbaren Fehlerschranken, welche die Geometriebehandlung beinhalten, entwickelt werden.

Bei Problemen mit sich bewegenden Gebieten ist die Zeitintegration eine zusätzliche Herausforderung. Da Freiheitsgrade dem Rechengitter zugeordnet sind, sind diese nur in Abhängigkeit von der Lage der zeitabhängigen Geometrie aktiv. Dadurch können einfache Finite-Differenzen-basierte Zeitschrittverfahren nicht direkt verwendet werden. Ein Lösungsansatz, den Herr Lehrenfeld seit seiner Promotion verfolgt, ist die Formulierung und Analyse in einer unfitted Raum-Zeit FEM [11,12]. Ein neuer, alternativer Ansatz beruht auf einer glatten Erweiterung diskreter Lösungen eines Zeitschritts in eine hinreichend große Umgebung, welche den Einsatz einfacher Finite-Differenzen-basierter Zeitschrittverfahren wieder ermöglicht [2]. Beide Ansätze wurden bereits für skalare Probleme und zweite Ordnung genaue Geometrieapproximation implementiert und analysiert. Die Erweiterung auf geometrisch höhere Ordnung ist eines der aktuellen Forschungsvorhaben. Erste Ergebnisse für den Raum-Zeit Ansatz wurden im Rahmen der Masterarbeit von Janosch Preuß [7] bereits erzielt und sind in der Software-Erweiterung für unfitted FEM `ngsxfem` [15] zur Finite-Elemente-Bibliothek `NGSolve` implementiert.

Literatur

- [1] N Fehn, M Kronbichler, C Lehrenfeld, G Lube, PW Schroeder. High-order DG solvers for under-resolved turbulent incompressible flows: A comparison of L2 and H(div) methods. *Int J Num. Methods Fluids*, 91(11):533-556, 2019.

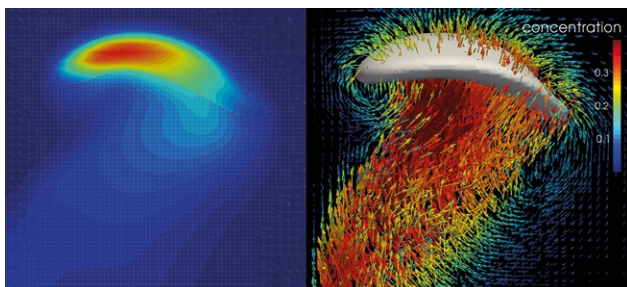


Abb. 1: Stofftransportsimulation (links) gekoppelt an eine zweiphasige Navier-Stokes-Lösung (rechts) für einen aufsteigenden Tropfen mit einer nicht-angepassten ("unfitted") Raum-Zeit-FEM

- [2] C Lehrenfeld, MA Olshanskii. An Eulerian finite element method for PDEs in time-dependent domains. *ESAIM: M2AN*, 53:585-614, 2019.
- [3] C Lehrenfeld, A Reusken. Analysis of a high order unfitted finite element method for an elliptic interface problem. *IMA J. Numer. Anal.*, 38:1351-1387, 2018.
- [4] PW Schroeder, A Linke, C Lehrenfeld, G Lube. Towards computable flows and robust estimates for inf-sup stable FEM applied to the time-dependent incompressible Navier-Stokes equations. *SeMA Journal*, 75(4):629-653, 2018.
- [5] PL Lederer, C Lehrenfeld, J Schöberl. Hybrid discontinuous Galerkin methods with relaxed H(div)-conformity for incompressible flows. Part I. *SIAM J. Numer. Anal.*, 56:2070-2094, 2018.
- [6] J Grande, C Lehrenfeld, A Reusken. Analysis of a high-order trace finite element method for PDEs on level set surfaces. *SIAM J. Numer. Anal.*, 56(1):228-255, 2018.
- [7] J Preuß. Higher order unfitted isoparametric space-time FEM on moving domains. Masterarbeit, Georg-August-Universität Göttingen, 2018.
- [8] C Lehrenfeld, J Schöberl. High order exactly divergence-free hybrid discontinuous Galerkin methods for unsteady incompressible flows. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 307:339-361, 2016.
- [9] C Lehrenfeld. High order unfitted finite element methods on level set domains using isoparametric mappings. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 300:716-733, 2016.
- [10] PL Lederer, C-M Pfeiler, C Wintersteiger, C Lehrenfeld. Higher order unfitted FEM for Stokes interface problems. *PAMM*, 16(1):7-10, 2016.
- [11] C Lehrenfeld. The Nitsche XFEM-DG space-time method and its implementation in three space dimensions. *SIAM J. Sci. Comp.*, 37(1):A245-A270, 2015.
- [12] C Lehrenfeld, A Reusken. Analysis of a Nitsche XFEM-DG discretization for a class of two-phase mass transport problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 51:958-983, 2013.
- [13] J Schöberl, C Lehrenfeld. Domain decomposition preconditioning for high order Hybrid Discontinuous Galerkin methods on tetrahedral meshes. In T Apel, O Steinbach (eds.), *Adv. Finite Element Methods and Appl.*, 27-56. Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [14] C Lehrenfeld. Hybrid Discontinuous Galerkin Methods for Incompressible Flow Problems. Diplomarbeit, RWTH Aachen, 2010.
- [15] <http://github.com/ngsxfem/ngsxfem>

Kontakt:

Jun.-Prof. Dr. Christoph Lehrenfeld
 Institut für Numerische und Angewandte Mathematik
 Georg-August-Universität Göttingen
 Lotzestraße 16-18
 37083 Göttingen
 Email: lehrenfeld@math.uni-goettingen.de

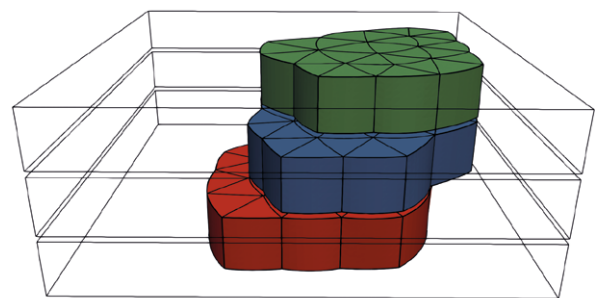


Abb. 2: Aktiver Teil eines parametrisch angepassten Prismen-Gitters in Raum-Zeit für eine zeitabhängige Geometrie, welche durch eine Raum-Zeit Level-Set-Funktion beschrieben wird

Bestsellers from SIAM

Save up to 30% on These Titles

Probability and Mathematical Statistics Theory, Applications, and Practice in R

Mary C. Meyer

2019 · xii + 707 pages · Hardcover · 978-1-611975-77-2
List Price \$109.00 · SIAM Member Price \$76.30
Rundbrief Reader \$87.20 · OT162

Foundations of Applied Mathematics Volume 1: Mathematical Analysis

Jeffrey Humpherys, Tyler J. Jarvis, and Emily J. Evans

2017 · xx + 689 pages · Hardcover · 978-1611974-89-8
List Price \$89.00 · SIAM Member Price \$62.30
Rundbrief Reader \$71.20 · OT152

Dynamic Mode Decomposition Data-Driven Modeling of Complex Systems

J. Nathan Kutz, Steven L. Brunton, Bingni W. Brunton,
and Joshua L. Proctor

2016 · xvi + 234 pages · Softcover · 978-1611974-49-2
List Price \$71.50 · SIAM Member Price \$50.05
Rundbrief Reader \$57.20 · OT149

Matrix Analysis and Applied Linear Algebra

Carl D. Meyer

2000 · xii + 718 pages · Hardcover · 978-0898714-54-8
List Price \$113.50 · SIAM Member Price \$79.45
Rundbrief Reader \$90.80 · OT71

Uncertainty Quantification Theory, Implementation, and Applications

Ralph C. Smith

2013 · xviii + 382 pages · Hardcover · 978-1611973-21-1
List Price \$79.00 · SIAM Member Price \$55.30
Rundbrief Reader \$63.20 · CS12

Finite Element Exterior Calculus

Douglas N. Arnold

2018 · xi + 120 pages · Softcover · 978-1611975-53-6
List Price \$54.00 · SIAM Member Price \$37.80
Rundbrief Reader \$43.20 · CB93

First-Order Methods in Optimization

Amir Beck

2017 · xii + 475 pages · Softcover · 978-1611974-98-0
List Price \$97.00 · SIAM Member Price \$67.90
Rundbrief Reader \$77.60 · MO25

Introduction to High Performance Computing

David L. Chopp

2019 · xiii + 455 pages · Softcover · 978-1611975-63-5
List Price \$89.00 · SIAM Member Price \$62.30
Rundbrief Reader \$71.20 · SE30

Matrix Analysis for Scientists and Engineers

Alan J. Laub

2004 · xiii + 157 pages · Softcover · 978-0898715-76-7
List Price \$52.00 · SIAM Member Price \$36.40
Rundbrief Reader \$41.60 · OT91

Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations Steady State and Time Dependent Problems

Randall J. LeVeque

2007 · xv + 341 pages · Softcover · 978-0898716-29-0
List Price \$74.50 · SIAM Member Price \$52.15
Rundbrief Reader \$59.60 · OT98

BIG Jobs Guide

Rachel Levy, Richard Laugesen, and Fadil Santosa

2018 · xii + 141 pages · Softcover · 978-1611975-28-4
List Price \$25.00 · SIAM Member Price \$17.50
Rundbrief Reader \$20.00 · OT158

A First Course in Numerical Methods

Uri Ascher and Chen Greif

2011 · xxii + 552 pages · Softcover · 978-0898719-97-0
List Price \$104.50 · SIAM Member Price \$73.15
Rundbrief Reader \$83.60 · CS07

Computational Science and Engineering

Gilbert Strang

2007 · xi + 713 pages · Hardcover · 978-0961408-81-7
List Price \$90.00 · SIAM Member Price \$63.00
Rundbrief Reader \$72.00 · WC07

Numerical Linear Algebra

Lloyd N. Trefethen and David Bau, III

1997 · xii + 361 pages · Softcover · 978-0898713-61-9
List Price \$72.00 · SIAM Member Price \$50.40
Rundbrief Reader \$57.60 · OT50

Linear Algebra and Learning from Data

Gilbert Strang

2019 · xiii + 432 pages · Hardcover · 978-0692196-38-0
List Price \$95.00 · SIAM Member Price \$66.50
Rundbrief Reader \$76.00 · WC16

Nonlocal Modeling, Analysis and Computation

Qiang Du

2019 · xiv + 166 pages · Softcover · 978-1611975-61-1
List Price \$59.00 · SIAM Member Price \$41.30
Rundbrief Reader \$47.20 · CB94

Differential Equations and Linear Algebra

Gilbert Strang

2014 · x + 512 pages · Hardcover · 978-0980232-79-0
List Price \$87.50 · SIAM Member Price \$61.25
Rundbrief Reader \$70.00 · WC13

Introduction to Linear Algebra Fifth Edition

Gilbert Strang

2016 · x + 574 pages · Hardcover · 978-0980232-77-6
List Price \$95.00 · SIAM Member Price \$66.50
Rundbrief Reader \$76.00 · WC14

Fundamentals of Numerical Computation

Tobin A. Driscoll and Richard J. Braun

2017 · xxix + 553 pages · Hardcover · 978-1611975-07-9
List Price \$104.00 · SIAM Member Price \$72.80
Rundbrief Reader \$83.20 · OT154

Scientific Computing

An Introductory Survey

Revised Second Edition

Michael T. Heath

2018 · xx + 567 pages · Softcover · 978-1611975-57-4
List Price \$94.00 · SIAM Member Price \$65.80
Rundbrief Reader \$75.20 · CL80

Handbook of Writing for the Mathematical Sciences

Third Edition

Nicholas J. Higham

2019 · xxii + 353 pages · Softcover · 978-1611976-09-0
List Price \$69.00 · SIAM Member Price \$48.30
Rundbrief Reader \$55.20 · OT167

Bits and Bugs

A Scientific and Historical Review of Software Failures in Computational Science

Thomas Huckle and Tobias Neckel

2019 · xii + 251 pages · Softcover · 978-1611975-55-0
List Price \$44.00 · SIAM Member Price \$30.80
Rundbrief Reader \$35.20 · SE29

Computational Mathematics with SageMath

Paul Zimmermann et al.

2018 · xiv + 464 pages · Softcover · 978-1611975-45-1
List Price \$69.00 · SIAM Member Price \$48.30
Rundbrief Reader \$55.20 · OT160

MATLAB Guide

Third Edition

Desmond J. Higham and Nicholas J. Higham

2016 · xxvi + 476 pages · Hardcover · 978-1611974-65-2
List Price \$64.00 · SIAM Member Price \$44.80
Rundbrief Reader \$51.20 · OT150

SIAM bestselling titles for the 12 months ending
December 31, 2019. Sales are from all sources, including
SIAM, online retailers, and SIAM's distribution partners.



SAMM 2020 – MODELLE AUS DATEN LERNEN: MODELLREDUKTION, SYSTEMIDENTIFIKATION UND MASCHINELLES LERNEN

VON CARMEN GRÄSSLE UND PETAR MLINARIĆ

Die siebte GAMM Junioren Sommerschule für Angewandte Mathematik und Mechanik beschäftigte sich mit dem Thema *Modelle aus Daten lernen: Modellreduktion, Systemidentifikation und maschinelles Lernen* und fand vom 27. bis 31. Juli 2020 statt. Ursprünglich als physisches Treffen am Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme in Magdeburg geplant, fand es aufgrund der Einschränkungen durch die COVID-19 Pandemie als online Veranstaltung statt. Gerade dieser Wechsel des Formats stellte sich als großartige Möglichkeit für eine besondere internationale Erfahrung heraus. Aus der großen Anzahl von Bewerbungen wurden 75 junge Forscherinnen und Forscher aus 17 verschiedenen Ländern (u.a. USA, Deutschland, Italien, Frankreich, Spanien, China, Australien, Indien, . . .) aus insgesamt 10 verschiedenen Zeitzonen ausgesucht an der Sommerschule teilzunehmen.

Die Teilnehmenden, hauptsächlich Promovierende, aber auch Postdocs, Studierende und Teilnehmerinnen und Teilnehmer aus der Industrie, verfolgten täglich die live online Vorlesungen und Übungen von Feliks Nüske (Universität Paderborn), Benjamin Peherstorfer (New York University) und J. Nathan Kutz (University of

Washington), welche sich hervorragend im Themenspektrum ergänzten.

Stochastischer Übergangskern, Koopman Operator und EDMD

Die Perspektive des Lernens von Modellen aus Daten für stochastische Prozesse, insbesondere stochastische Differentialgleichungen (SDGL) wurde von Feliks Nüske dargestellt. Zunächst wurden Elemente der Wahrscheinlichkeitsrechnung wiederholt und durch die Einführung des Konzepts eines stochastischen Übergangskerns und dynamischer Operatoren, insbesondere des Perron-Frobenius Operators und des Koopman Operators, das mathematische Grundgerüst geschaffen. Veranschaulichungen wurden durch das Beispiel der Brownschen Bewegung gegeben, welches dann verwendet wurde um die Konstruktion einer SDGL zu motivieren. Eine Verbindung zwischen stochastischer Analysis, Halbgruppentheorie und partiellen Differentialgleichungen wurde gezogen, um den Generator einer SDGL einzuführen. Nach der Betrachtung der Galerkin Projektion des Koopman Operators wurde eine datengetriebene Annäherung disku-

tiert, welche zur *Extended Dynamic Mode Decomposition (EDMD)* für stochastische Dynamik führte. Anschließend wurde eine datengetriebene Annäherung des Koopman Generators durchgenommen (gEDMD). Zuletzt wurde eine Kernel-Methode für die Annäherung des Koopman Generators aus Daten besprochen.

Reduzierte Modelle aus Daten und Anwendungen in der Quantifizierung von Unsicherheit

Eine Verbindung zwischen der Modellreduktion und dem wissenschaftlichen maschinellen Lernen wurde von Benjamin Peherstorfer skizziert. Als Ausgangspunkt des Kurses wurde die klassische (intrusive, projektionsbasierte) Modellreduktion von (parametrisierten) dynamischen Systemen betrachtet und das Konzept der *offline-online* Zerlegung eingeführt, welches man für die effiziente Berechnung reduzierter Lösungen etwa im Rahmen von Parameterstudien oder der Optimierung verwendet. Darauf aufbauend wurde der Fokus auf das Lernen reduzierter Modelle aus Daten mittels Operatorinferenz gesetzt. Für diesen Ansatz wird ein gewisses Maß an Kenntnis über das System vorausgesetzt (insbesondere über das Vorhandensein einer polynomialen Struktur) und die Möglichkeit, Systemzustände abzufragen (*Gray-Box*-Modell). Fehlerabschätzungen für die gelernten Modelle, das Lernen von nicht-markovschen reduzierten Modellen, sowie das Lernen aus Frequenzbereichsdaten mittels des Loewner Konzepts wurden diskutiert. Schließlich wurden Anwendungen von reduzierten Modellen in der Quantifizierung von Unsicherheit betrachtet, insbesondere *Multifidelity*-Verfahren für Unsicherheitsfortplanzung, Sensitivitätsanalyse und Abschätzung der Versagenswahrscheinlichkeit.

Physik lernen durch die Verbindung von maschinellem Lernen und Regression

Mittelpunkt des Kurses von J. Nathan Kutz waren Methoden, mit welchen man interpretierbare Modelle physikalischer Systeme lernen kann. Ausgehend von DMD und EDMD für das Lernen linearer Modelle aus Daten, wurde der Fokus gelegt auf das Lernen intrinsischer Dimensionalität und latenter Variablen mittels Verzögerungseinbettungen und der *Hankel Alternative View of Koopman (HAVOK)*. Weiter wurden neuronale Netzwerke verwendet um eine Flussabbildung eines dynamischen Systems zu lernen, wobei der Mangel an Interpretierbarkeit als Nachteil betont wurde. Dies führte zu dem Konzept des Lernens interpretierbarer Modelle durch das Lernen geeigneter Koordinaten und Dynamiken, was durch das Modell eines physikalischen Pendels illustriert wurde. Das Beispiel veranschaulichte die Grenzen des Lernens von linearen Modellen für dynamische Prozesse, was den Schwerpunkt zur Diskussion der Methode der *Sparse Identification of Nonlinear Dynamical Systems (SINDy)* verlegte. Schließlich wurden die Herangehensweisen mittels

neuronaler Netzwerke für das Lernen von Koordinaten und SINDy für das Lernen von Dynamik zusammengebracht. Zuletzt wurde diskutiert, wie man bekannte Physik einbringen kann, insbesondere wie man SINDy verwenden kann um die Diskrepanz zum tatsächlichen Anwendungsproblem zu lernen.

Ein wissenschaftliches Treffen zuhause

Wenngleich der soziale Aspekt eines persönlichen Treffens ein wenig fehlte, zeigte das Onlineformat mittels des *BigBlueButton* Systems vielfältige Vorteile. Alle live Vorlesungen wurden aufgezeichnet um den verschiedenen Zeitzonen der Teilnehmenden gerecht zu werden. Dies erlaubte aber gleichzeitig auch die Vorlesungen nochmal zu wiederholen oder spezielle Abschnitte im Nachhinein zu vertiefen. Ferner nahmen die Dozenten unterschiedliche Präsentationsformen wahr, wie z.B. Folien, Grafiktablets und traditionelle Whiteboards. In praktischen Programmerrunden konnten die Teilnehmenden den Programmierübungen auf ihren eigenen Computern folgen. Lebhaftige Diskussionen und Interaktionen konnte man während den Vorlesungen und Übungseinheiten in kleineren virtuellen Räumen (breakout rooms) erleben. Einen wesentlichen Programmpunkt stellten zudem die drei Postersessions dar, in denen fast alle Teilnehmenden jeweils ein Poster über ihre eigenen Forschungsideen präsentierten, was zu einem regen Austausch führte. Und auch die soziale Interaktion fehlte nicht gänzlich, so dass online Versionen von Karten- und Zeichenspielen in den Abendstunden gespielt wurden. Und wenn man in der Vorlesung durch den Dozenten an die gute Tasse Kaffee erinnert wird, ist das kein Problem bei einer virtuellen Konferenz - die Küche zuhause ist gleich nebenan!

Sponsoren und Unterstützung

Wir bedanken uns bei der Unterstützung des Max-Planck-Instituts für Dynamik komplexer technischer Systeme in Magdeburg und seiner IT-Abteilung, der GAMM, der GAMM Junioren, der Dr.-Klaus-Körper-Stiftung, des DFG-Graduiertenkollegs Mathematische Komplexitätsreduktion (MathCoRe), und des IMPRS ProEng (International Max Planck Research School for Advanced Methods in Process and Systems Engineering). Außerdem danken wir Wiley für das Angebot eine Spezialausgabe mit Poster- und Proceedingbeiträgen der Teilnehmenden zu gestalten.

SAMM 2021

Die nächste SAMM wird von Kathrin Welker (Helmut-Schmidt-Universität) und Peter Gangl (Technische Universität Graz) für den Sommer 2021 geplant und wird sich mit dem Thema Form- und Topologieoptimierung befassen.



DR.-ING. JOHANNA WAIMANN

**RWTH AACHEN UNIVERSITY
INSTITUTE OF APPLIED MECHANICS**

RE-MAIL: WAIMANN@IFAM.RWTH-AACHEN.DE

PHONE: +49 241 80 25017

DR. PETER GANGL

**RTU GRAZ, AUSTRIA
INSTITUTE OF APPLIED MATHEMATICS**

RE-MAIL: GANGL@MATH.TUGRAZ.AT

PHONE: +43 316 873 8624

**JUNGE TALENTE IN
BESTER GESELLSCHAFT**

INFORMATIONEN ZUR MITGLIEDSCHAFT www.gamm-ev.de



JAHRESBERICHT 2020 DER GAMM-NACHWUCHSGRUPPE

VON HENRIK EBEL, LENA LAMBERS UND RENATE SACHSE

U STUTTGART



Die GAMM-Nachwuchsgruppe der Universität Stuttgart wurde im November 2019 gegründet. Die Resonanz auf die Nachwuchsgruppe war sehr groß, sodass sie aktuell 70 reguläre und 12 Seniormitglieder umfasst. Vertreten werden hierbei 8 verschiedene Institute der angewandten Mathematik und Mechanik an der Universität Stuttgart.

Das Kick-off Meeting fand im Dezember mit einem Besuch des Stuttgarter Weihnachtsmarktes statt. Dies diente vor allem dem ersten Kennenlernen und dem fachlichen Austausch der einzelnen Mitglieder.

Um die verschiedenen Forschungsgebiete der Institute näher kennenzulernen und gleichzeitig einen zwanglosen Kontakt zu den Professoren zu ermöglichen, wurde der „Workshop der GAMM-Nachwuchsgruppe“ ins Leben gerufen.

Zum Programm der ersten Veranstaltung des Workshops gehörten drei spannende Vorträge zu Themen der Mecha-

nik. Prof. Tim Ricken (ISD) stellte seine Forschung zu Mehrskalensimulationen vor, Prof. Oliver Röhrle (IMSB) erläuterte die Modellierung von Muskel-Skelett Systemen und Prof. Michael Hanss (ITM) gab eine Einführung in die Möglichkeitstheorie und deren Anwendung in der Unsicherheitsquantifizierung.

Die Veranstaltung war durchweg sehr gut besucht und aufgrund der äußerst positiven Rückmeldungen der teilnehmenden Doktoranden sind für die kommende Zeit weitere Workshops dieser Art geplant. Zum gemeinsamen Networking und um auch anschließend weitere Fragen zu beantworten, trafen sich Doktoranden und Vortragende nach dem Workshop im Unitheke auf dem Campus Vaihingen.

JAHRESBERICHT 2020 DER GAMM-NACHWUCHSGRUPPE

VON DANIEL BANKMANN UND FELIX BLACK

TU BERLIN

In unserem 2. Jahr als GAMM Chapter haben wir Veranstaltungen aus dem letzten Jahr fortgeführt.

Unser Tools Seminar bietet Wissenschaftler*innen und Student*innen die Möglichkeit, ihre Erfahrungen und ihr Wissen über bestimmte Werkzeuge mit Kolleg*innen und Kommiliton*innen auszutauschen. Wir hatten Vorträge zu TikZ und zu den Tools Zenodo und Conda, die beide im Kontext reproduzierbarer Forschung/Software eine Rolle spielen.

Unser monatliches PhD Lunch, bei dem neben dem wissenschaftlichen Austausch auch der private Austausch und das Kennenlernen der anderen

Promotionsstudent*innen aus anderen mathematischen Fachgruppen der TU Berlin im Vordergrund steht, fand noch zwei mal statt. Die Treffen fanden in der Mensa der TU Berlin statt, wo in geselliger Runde gemeinsam zu Mittag gegessen wurde. Anschließend klangen die Treffen in der lokalen Kaffeebar aus.

Leider befinden sich viele unserer Mitglieder*innen gerade in der Fertigstellungsphase ihrer Promotionsvorhaben; um in Zukunft weiter aktiv Veranstaltungen anbieten zu können, suchen wir daher dringend nach Nachwuchs und Unterstützung.

JAHRESBERICHT 2020 DER GAMM-NACHWUCHSGRUPPE

VON FABIAN CASTELLI, ALEXANDER DYCK UND TUNC YÜZBASIOGLU

KIT

Die GAMM-Nachwuchsgruppe des KIT wurde im Februar 2020 neu gegründet und besteht derzeit aus insgesamt 23 Mitgliedern, darunter 15 aus dem Fachbereich Maschinenbau, fünf aus der Mathematik, zwei aus dem Bauingenieurwesen sowie ein Mitglied aus der Informatik. Neben zwei Post-Docs sind drei Studierende und 18 Doktoranden vertreten.

Die Nachwuchsgruppe wurde mit dem Ziel gegründet, den Austausch und die Zusammenarbeit über Institutsgrenzen hinweg zu fördern sowie den Kontakt zwischen Doktoranden und Studierenden zu initiieren. Insbesondere soll eine Seminarreihe etabliert werden, in der Mitglieder über Themen ihrer Arbeit berichten.

Der Auftakt der Seminarreihe fand mit zwei Vorträgen zu den Themen 'Uncertainty Quantification' und 'Contact Calculation in Multibody Dynamics' im Rahmen des Gründungstreffens am 5. Februar 2020 statt. Beim anschließenden Get-Together mit Getränken und Brezeln konnten sich die Teilnehmer kennen lernen und ins Gespräch kommen. An weiteren Seminarterminen sollen in Zukunft nach und nach Einblicke in die Forschungs- und Interessensgebiete aller Mitglieder gegeben werden.

Weitere geplante Aktivitäten umfassen die Einladung von externen Referenten zur Seminarreihe sowie gemeinschaftliche Aktivitäten am Hochschulstandort.

JAHRESBERICHT 2020 DER GAMM-NACHWUCHSGRUPPE

VON HENNING LAMMEN, TOBIAS KAISER UND TILLMANN WIEGOLD

TU DORTMUND



In den vergangenen zwölf Monaten konnte die GAMM Nachwuchsgruppe der Technischen Universität Dortmund viele neue Mitglieder für sich gewinnen, so dass die Nachwuchsgruppe nun aus 34 regulären Mitgliedern besteht - 13 aus der Fakultät Maschinenbau, neun aus der Fakultät Architektur und Bauingenieurwesen und zwölf aus der Fakultät Mathematik. Neben den regulären Mitgliedern unterstützen neun Seniormitglieder die Gruppe. Wir freuen uns besonders, die neuen Mitglieder des Lehrstuhls für Statik und Dynamik aus der Fakultät Bauingenieurwesen sowie des Lehrstuhls für Angewandte Mathematik und Dynamik der Fakultät Mathematik in der Gruppe begrüßen zu dürfen.

Neben vielen sozialen und Teambuilding-Aktivitäten, wie beispielsweise dem gemeinsamen Fußballspielen, haben im letzten Jahr die Seminare "Inverse problems and material parameter identification for piezoelectrics" von Dr.-Ing. B. Jurgelucks (Universität Paderborn) sowie

"Predictive modelling of the mesoscopic dynamics of materials" von Jun.-Prof. Dr. R. Wittkowski (Westfälische Wilhelmsuniversität Münster) zu einem regen interdisziplinären Austausch geführt. Auch die Generalversammlung hat mit dem Vortrag "Stress field analysis for higher order continuum theories" des Senior-Mitglieds Prof. Dr.-Ing. I. Münch spannende Diskussionen angestoßen, welche anschließend bei Pizza und kühlen Getränken weiter vertieft wurden. In der Generalversammlung wurde ebenso mit Henning Lammen, Tillmann Wiegold, Fabian Guhr und Michael Sievers der neue Vorstand gewählt.

Wie freuen uns auf das nächste Jahr der GAMM-Nachwuchsgruppe, in dem wir den lohnenswerten Austausch untereinander sowie zu weiteren Nachwuchsgruppen durch Seminare, sozialen Aktivitäten und gemeinsame Treffen weiter vertiefen werden.

JAHRESBERICHT 2020 DER GAMM-NACHWUCHSGRUPPE

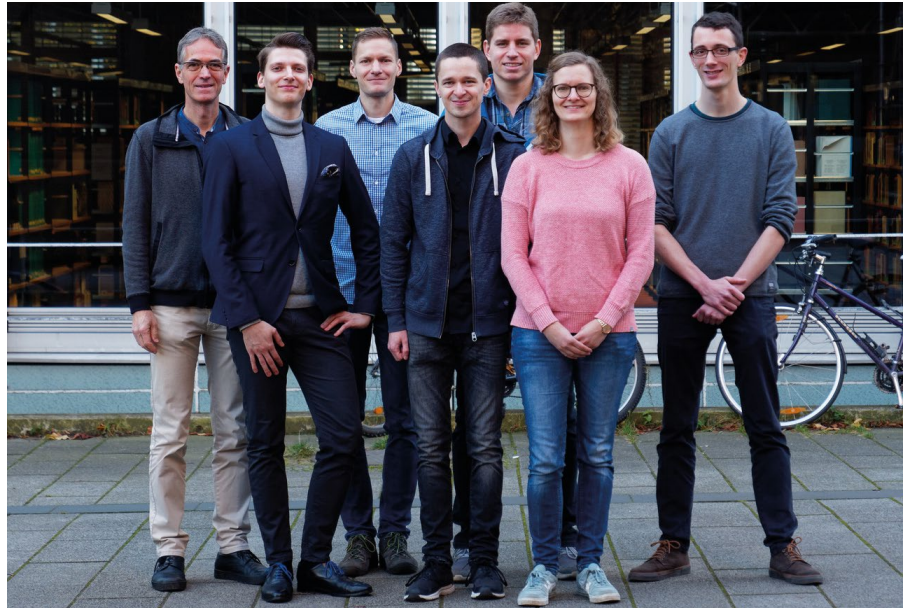
VON CHRISTIANE SCHMIDT

TU & U HAMBURG

Die GAMM-Nachwuchsgruppe Hamburg hat aktuell vierzehn Mitglieder an der Universität Hamburg und der Technischen Universität Hamburg.

Im Oktober fanden die jährlichen Vorstandswahlen mit gemeinsamem Pizza-Essen und Spieleabend statt. Seitdem ist mit unserem neuen Vizepräsidenten Willi Leinen auch ein Mitglied der TU Hamburg Teil des Vorstandes. So wird die Kommunikation und Sichtbarkeit der Nachwuchsgruppe an den beiden Standorten verbessert.

Die Gruppe hat ihr Engagement für die Förderung der Kommunikation unter Promovierenden und Studierenden in der Angewandten Mathematik an Hochschulen in Hamburg, den Austausch mit akademischen Partnern im In- und Ausland sowie die Information über berufliche Perspektiven weiter fortgesetzt. Es fanden verschiedene Exkursionen zu lokalen Arbeitgebern wie Airbus und dem Hamburger Verkehrsunternehmen Hochbahn statt und auch die Organisation gemeinsamer Mittagessen wurde fortgesetzt.



Pandemiebedingt mussten die Aktivitäten der Gruppe in den letzten Monaten stark eingeschränkt werden und beschränkten sich fortan auf Angebote wie digitale Seminare und virtuelle Kaffeepausen.

JAHRESBERICHT 2020 DER GAMM-NACHWUCHSGRUPPE

VON DOMINIK ALFKE UND ALEXANDRA BÜNGER

TU CHEMNITZ

Die GAMM Nachwuchsgruppe Chemnitz hat auch im Jahr 2019 wieder einige interessante Veranstaltungen für seine ca. 30 Mitglieder aus dem Maschinenbau und der Mathematik organisiert und bietet einen Rahmen, um Studierende aus verschiedenen Fachrichtungen zu vernetzen.

Den Auftakt der Veranstaltungen machte ein Vortrag von Dr. Thomas Lehmann zum Thema Digital Image Correlation mit einer anschließenden Laborführung, bei der man die experimentelle Ermittlung von Deformationsfeldern in Aktion erleben durfte.

Außerdem hat die Nachwuchsgruppe eine Informationsveranstaltung zu Open Access Publikationen organisiert, bei der Mitarbeiter der Unibibliothek Unterstützungsmöglichkeiten für alternative Publikationswege vorge-

stellt und inhaltliche und rechtliche Fragen beantwortet haben.

Abgerundet wurden die Veranstaltungen durch Vorträge der Seminarreihe "Systems and Control", bei der es unter anderem einen spannenden Vortrag über Autonomes Fahren von Prof. Peter Protzel zu hören gab.

Zur weiteren Vernetzung ihrer Mitglieder hat die Nachwuchsgruppe außerdem Stammtischabende und ein gemeinsames Volleyballturnier organisiert. Des Weiteren hat unsere Präsidentin die Gruppe beim alljährlichen Treffen der europäischen GAMM und SIAM Student Chapter (MESIGA) in Aachen repräsentiert und die Schirmherrschaft für das nächste Treffen übernommen.

JAHRESBERICHT 2020 DER GAMM-NACHWUCHSGRUPPE

VON LUCAS ENGELHARDT

U ULM



Teilnehmer des GAMM Workshops CSE, organisiert durch die Nachwuchsgruppe Ulm, Dr.-Ing. Ulrich Simon und Prof. Dr. Karsten Urban

Die GAMM Nachwuchsgruppe Ulm, nach ihrer Gründung Anfang 2019, besteht mittlerweile aus 15 Mitgliedern. Neben den Versuchen neue Mitglieder zu akquirieren, wurde im Herbst der Workshop CSE des GAMM Fachausschusses CSE organisiert und durchgeführt. Über Keynote Lectures von Prof. Dr. Martin Burger, Prof. Dr. Andrea Walther und Prof. Dr. Joachim Weickert hinaus, wurden zahlreiche Fachvorträge organisiert und geplant. Der Workshop fand am 9. Und 10. November 2019 auf Schloss Reisenburg bei Ulm statt.

Im zweitägigen Programm waren interessante Fachvorträge, wie auch eine eigens vom GAMM Student Chapter organisierten Runde enthalten. Hierbei stellte sich die Gruppe vor und ein Wissensquiz über die abgehaltenen Vorträge des Workshops wurde initiiert.

Bedingt durch die aktuelle Situation wurden leider dieses Jahr noch keine Aktivitäten der GAMM Nachwuchsgruppe getätigt. Jedoch schauen wir zuversichtlich auf das kommende Wintersemester.

JAHRESBERICHT 2020 DER GAMM-NACHWUCHSGRUPPE

VON ROLAND MAIER UND DAVID WIEDEMANN

U AUGSBURG

Das Hauptziel der Augsburger Nachwuchsgruppe ist der gegenseitige wissenschaftliche Austausch, sowohl innerhalb der Gruppe als auch darüber hinaus. Derzeit besteht die Nachwuchsgruppe aus neun regulären und zwei Senior-Mitgliedern (Stand: 26. Mai 2020). Die Gruppe trifft sich zu regelmäßigen gemeinsamen Mittagessen, bei denen in entspannter Atmosphäre verschiedene Themen diskutiert werden. Darüber hinaus können unsere Mitglieder in kleinen Seminarrunden Teilergebnisse ihrer Forschungsarbeit präsentieren oder nützliche Tools für das wissenschaftliche Arbeiten vorstellen. Neben der Vernetzung innerhalb der Gruppe konnten sich mehrere unserer Mitglieder durch die Teilnahme am „Meeting of European SIAM and GAMM Student Chapters“ vom 9. bis 11. September 2019 in Aachen zudem mit anderen GAMM und SIAM Nachwuchsgruppen austauschen.

Da sich ein Großteil unserer Mitglieder direkt oder indirekt mit Verbundwerkstoffen beschäftigt, besuchten wir

im Juni 2019 das Augsburger Fraunhofer-Institut für Gießerei-, Composite- und Verarbeitungstechnik. Insbesondere bekamen wir Einblicke in die Herstellung von faserverstärkten Leichtbauteilen und generelle Materialprüfungsprozesse. Da dieser Besuch sehr positiv aufgenommen wurde, bemühten wir uns um weitere Unternehmensführungen. Im Dezember 2019 konnten wir schließlich die MT Aerospace AG besichtigen. Das in Augsburg ansässige Unternehmen produziert Bauteile für die Luft- und Raumfahrt, insbesondere spezielle Flüssigkeitstanks. Neben detaillierten Informationen zu Trägerraketen in der Raumfahrt bekamen wir sehr interessante Einblicke in die Produktionsabläufe des Unternehmens.

Für die Zukunft planen wir weitere Besuche bei Augsburger Firmen und wollen darüber hinaus unseren regelmäßigen Austausch beibehalten.

Students in Germany Can JOIN SIAM FOR FREE

Students make up an important part of the 14,500+ mathematicians, computer scientists, engineers, physicists, and other scientists who enjoy the many benefits of belonging to Society for Industrial and Applied Mathematics.

UNDERGRADS & GRADUATE STUDENTS CAN JOIN SIAM FOR JUST \$25 OR FOR FREE IF THEY BELONG TO A SIAM STUDENT CHAPTER. EARLY CAREER PROFESSIONALS CAN JOIN FOR HALF THE REGULAR PRICE.

Learn more or join at siam.org/membership/student



“ SIAM is important because professional organizations are vital in bringing up students and early career scientists. Making connections and providing a coherent and consistent community that meets throughout the year is an invaluable thing. Publishing is important too, so SIAM journals are an excellent venue for in-depth work. ”

– Jed Brown,
University of
Colorado

STUDENT MEMBERS EXPERIENCE:

- Networking opportunities
- Access to cutting edge research
- Visibility in the applied mathematics and computational science communities
- Career resources, advice, & information
- Opportunity to share research & experience the journal review process through *SIAM Undergraduate Research Online (SIURO)*
- Chance to attend Gene Golub SIAM Summer School (G2S3)

STUDENT MEMBERS GET:

- Free membership in two SIAM activity groups
- Free *SIAM News* and *SIAM Review* subscriptions
- 30% discount on SIAM books
- 95% discount on electronic access to current content and archives for all 18 SIAM journals
- Up to 85% off conference registration rates
- *SIAM Unwrapped* member e-newsletter
- Eligibility to hold office and serve on SIAM committees
- Consideration for SIAM Student Travel Awards

SIAM HAS 196 STUDENT CHAPTERS THROUGHOUT THE WORLD, INCLUDING:

- Heidelberg University Student Chapter
- Otto Von Guericke University Magdeburg Student Chapter
- RWTH Aachen University Student Chapter
- Technische Universität Berlin Student Chapter
- University of Hamburg Student Chapter
- University of Trier Student Chapter

GAMM members who live outside the United States: Visit siam.org/joinsiam to join 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



ALEXANDER-VON-HUMBOLDT FORSCHUNGSPREIS AN PROF. TAREK I. ZOHDI, UC BERKELEY

VON ALEXANDER SCHWARZ

Die Alexander-von-Humboldt Stiftung zeichnet Professor Tarek I. Zohdi 2020 mit dem Humboldt-Forschungspreis aus: „Mit dem Preis werden Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler für ihr bisheriges Gesamtschaffen ausgezeichnet, deren grundlegende Entdeckungen, Erkenntnisse oder neue Theorien das eigene Fachgebiet nachhaltig geprägt haben und von denen auch in der Zukunft weitere Spitzenleistungen erwartet werden können.“¹ Die Auszeichnung durch die Alexander-von-Humboldt-Stiftung wird durch einen Blick auf Professor Zohdis herausragenden Errungenschaften und Leistungen gewürdigt.

Tarek I. Zohdi ist Professor für Maschinenbau und Vorsitzender des „Designated Emphasis Program“ in „Computational and Data Science and Engineering“ an der UC Berkeley (seit 2012) und Assoziierter Dekan für das Post-Baccalaureate Programm am College of Engineering. Zuvor war er als Vorsitzender des Programms für Ingenieurwissenschaften tätig (2008 bis 2012). Derzeit ist er Chancellors-Professor und Inhaber des „W. C. Hall Family Endowed Chair in Engineering“. Darüber hinaus ist er Wissenschaftler der Fakultät an den „Lawrence Berkeley National Labs“ und hat eine Position als adjungierter Wissenschaftler am „Children's Hospital Oakland Research Institute“ inne. Tarek I. Zohdi wurde 1997 an der University of Texas at Austin unter der Leitung von Prof. J. T. Oden promoviert und habilitierte sich fünf Jahre später an der Leibniz Universität Hannover unter der Leitung von Prof. P. Wriggers. Er ist international bekannt für seine herausragende Forschung auf dem Gebiet „Computational Mechanics“ und verwandter Themen. Er leistete wichtige Beiträge zur Theorie der Diskretelemente-Methode, zu Partikelströmungen und zu nicht-konvexen Multiskalen-Multiphysikproblemen.

Seine Hauptforschungsinteressen liegen in der Modellierung, Simulation und Optimierung zukunftsweisender Fertigungsprozesse. Seine aktuellen Forschungsaktivitäten lassen sich mit vier Schwerpunkten charakterisieren. Hierzu gehört unter anderem die computergestützte Entwicklung von hochfesten (ballistischen) Geweben. Ursprünglich wurde dieser Forschungszweig von der Federal Aviation Administration und Boeing im Rahmen eines 10-jährigen (2001 bis 2011) großangelegten Labor- und Simulationsprojekts zur Entwicklung ballistischer Gewe-

beschilde für die Boeing 787 finanziert. Schließlich waren die Ergebnisse von Prof. Zohdi maßgeblich für die Entwicklung des Boeing 787-Designs. Ein weiterer Schwerpunkt seiner Arbeit liegt auf der Forschung an stark heterogenen Materialien. So war Zohdi maßgeblich an der Analyse von partikulären, funktionalisierten Materialien in multiphysikalischen Regimen beteiligt. Im Jahr 2018 gründete er die „UC Berkeley Fire Research Group“² mit dem Ziel der Entwicklung und Umsetzung effektiver Lösungen für unkontrollierte Waldbrände. Die Fire Research Group hat Ingenieure, Wissenschaftler, Techniker, Ersthelfer und Feuerwehrleute zusammengebracht, um die Forschung in den Bereichen Brandwissenschaft, Management und Notfallkontrolle zu unterstützen. In jüngster Zeit war Zohdi stark am neuen National Network of Manufacturing Innovation (NNMI)-System beteiligt, das in den letzten zehn Jahren von der US-Regierung entwickelt wurde. Im Jahr 2016 war er Principal Investigator für Nordkalifornien für das Northern California Clean Energy Smart Manufacturing Innovation Institute (CESMII), das Teil eines großen Konsortiums von Universitäten, nationalen Laboratorien und Unternehmen ist, die auf intelligente saubere Produktion ausgerichtet sind.

Prof. Zohdi hat über 175 begutachtete Zeitschriftenartikel und sieben Bücher veröffentlicht. Er ist Mitherausgeber der Zeitschrift "Computational Mechanics" und Mitbegründer und Chefredakteur der Zeitschrift "Computational Particle Mechanics". In der Vergangenheit hat er über 30 internationale Konferenzen und Workshops (mit) organisiert und wurde in die wissenschaftlichen Beiräte von über 40 internationalen Konferenzen berufen. Im Jahr 2012 wurde er zum Präsidenten der „United States Association for Computational Mechanics“ gewählt (2012 bis 2014). Insgesamt hat er mehr als 200 (Haupt-) Vorträge auf nationalen und internationalen Konferenzen, an Universitäten und anderen Forschungseinrichtungen gehalten. Im Jahr 2017 erhielt er den „UC Berkeley Distinguished Teaching Award“, die höchste Auszeichnung für die Lehre an der UC Berkeley. Im Jahr 2019 wurde er zum Fellow der American Academy of Mechanics (AAM) gewählt; in dieses Gremium wird jedes Jahr nur ein neuer Fellow aufgenommen³.

Im Rahmen des Alexander-von-Humboldt Forschungspreises wird er voraussichtlich 2021/2022 Gast am Insti-

¹ humboldt-foundation.de/web/humboldt-preis.html

² <https://frg.berkeley.edu/>

³ <https://aamech.org>

tut für Mechanik an der Universität Duisburg-Essen (Prof. J. Schröder) und am Institut für Kontinuumsmechanik an der Leibniz Universität Hannover (Prof. P. Wriggers) sein. Während seines Aufenthalts in Deutschland beabsichtigt er, sich mit der Erforschung von Partikelmethoden zu befassen, die eine breite Anwendung über mehrere Disziplinen hinweg ermöglichen und für die Industrie und die Gesellschaft insgesamt von Interesse sind. Dabei wird Prof. Zohdi auch mit NachwuchswissenschaftlerInnen zusammenarbeiten und so zu deren wissenschaftlichen Ausbildung beitragen.

Tarek I. Zohdi ist ein international vernetzter und hoch angesehener Wissenschaftler mit einem breiten Forschungsfeld und tiefgreifenden Beiträgen für seine Fachdisziplin. Seine Leistungen finden Anerkennung in zahlreichen Auszeichnungen und Würdigungen, seine fachliche Expertise wird in der Forschungsgemeinschaft ebenso geschätzt wie in zahlreichen Industriekooperationen. Im Jahr 2020 erhält er nun den renommierten Alexander-von-Humboldt-Forschungspreis für seine Errungenschaften und herausragenden Verdienste für sein Fach. Wir gratulieren Prof. Zohdi herzlich!



LINKS ZU FACHAUSSCHÜSSEN UND WEITEREN ORGANISATIONEN

GAMM

Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik, <http://www.gamm-ev.de>

Tagungsjahr 2020/2021

**91. GAMM Jahrestagung in Kassel
15. – 19.03.2021**

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

Angewandte Operatortheorie

www.gamm-ot.uni-wuppertal.de/

Stochastische Optimierung in der Technik

gamm-sc.mathematik.uni-karlsruhe.de/index.html

Dynamik und Regelungstheorie

www.ifatwww.et.uni-magdeburg.de/syst/GAMMFA/gammfa.shtml

Analysis von Mikrostrukturen

www.iam.uni-bonn.de/aaa2/gamm-fa/

**Optimierung mit partiellen
Differentialgleichungen**

www.gamm.optpde.net

**Computational Science and Engineering
(CSE)**

www.uni-stuttgart.de/gamm/fa-cse

Mathematische Signal- und Bildverarbeitung

www3.math.tu-berlin.de/numerik/GAMM-MSIP/

Uncertainty Quantification

www.tu-chemnitz.de/gamm-uq

Angewandte und Numerische Lineare Algebra

<https://gammnla.wordpress.com/>

Phasenmodellierung

www.mv.uni-kl.de/ltm/forschung/GAMM-FA_PFM

Analysis partieller Differentialgleichungen

www.uni-regensburg.de/mathematics/partial-differential-equations/index.html

**Data-driven Modeling and Numerical
Simulation for Microstructured Materials**

www.mechbau.uni-stuttgart.de/EMMA/ag-data

**Modeling, Analysis and Simulation of
Molecular Systems**

<https://moansi.wixsite.com/gamm>

Experimentelle Festkörpermechanik

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

Numerische Analysis

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

Computational Biomechanics

**Computational and Mathematical Methods in
Data Science**

<https://www.tu-chemnitz.de/mathematik/wire/cominds>

Tagungen sind auf der GAMM-Homepage

<https://www.gamm-ev.de> einzusehen.

IUTAM

International Union of Theoretical and Applied Mechanics, www.iutam.net

ECCOMAS

European Community on Computational Methods in Applied Sciences, www.cimne.com/eccomas

EUROMECH

European Mechanics Society
www.euromech.org

EMS

European Mathematical Society
www.euro-math-soc.eu/

MFO

Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach
www.mfo.de

CISM

International Centre for Mechanical Sciences
www.cism.it

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

GAMM 2020 IN KASSEL



VON DETLEF KUHL, ANDREAS MEISTER, ANDREAS RICOEUR UND OLAF WÜNSCH



Eine Stadt und ihre Universität in Vorfreude auf ein erstmals in Kassel stattfindendes wissenschaftliches Großereignis. Ein bis zu den Haarspitzen motiviertes Organisationsteam aus Mathematik und Mechanik der Universität Kassel erwartete spannungsgeladen die Eröffnungsrede von Ayse Asar, Staatssekretärin im hessischen Ministerium für Wissenschaft und Kunst, zu der mit Kompetenz, Energie und Liebe vorbereiteten Jahrestagung der Gesellschaft für angewandte Mathematik und Mechanik e.V.. Die Getränke für die legendäre 'Welcome Reception' waren kalt gestellt, doch dann geschah etwas, das wir alle nicht für möglich gehalten hatten und das bis heute die Welt nachhaltig erschüttert. Wie dem

heitsamt unter Aktenbergen verkrochen, wenn der verbotene Name im Raum stand, wägen der Vorstand der GAMM, das Präsidium der Universität Kassel und die lokalen Tagungsorganisator*innen bereits in engem Schulterschluss sorgsam die Gefahren für die Gesundheit der Teilnehmer, Multiplikatorenwirkung, Realisierbarkeit von Hygiene- und Schutzmaßnahmen und der Bedeutung des wissenschaftlichen und persönlichen Austausches bei der GAMM-Jahrestagung ab. Nach einem schwierigem und auch emotionalen Prozess wurde die damals mutige und im Nachhinein einzig richtige und verantwortungsvolle Entscheidung getroffen, die GAMM-Jahrestagung 2020 nicht in dem geplanten Zeitraum zu veranstalten. Es ist den Veranstalter*innen sehr bewusst, welche Konsequenzen dies für die angemeldeten Teilnehmer*innen der Jahrestagung hatte, Transfer und Hotel waren gebucht und die Vorbereitung der wissenschaftlichen Vorträge bereits abgeschlossen. Die ohne Zweifel entstandenen Unannehmlichkeiten bedauern wir sehr.

Dank der Flexibilität und Unterstützung der nachfolgenden Organisatoren der GAMM-Jahrestagungen in Aachen, Dresden und Magdeburg und des Vorstands der GAMM konnte der wissenschaftliche Austausch an der Universität Kassel um ein Jahr, in den Zeitraum 15. bis 19. März 2021, verlegt werden. Dabei ist es unser Wunsch, das Programm nach Möglichkeit weitestgehend erhalten zu können. Diesem Wunsch schließt sich



dunklen Zauberer in Harry Potter 'Du weißt schon wer', wollen wir dem Wesen, das unser aller Leben verändert hat, in dem vorliegenden Artikel keinen Namen geben. Die Leser*innen wissen bereits, was die für den Zeitraum vom 16. bis 20. März geplante GAMM-Jahrestagung 2020 ins Wanken und schlussendlich zum Scheitern brachte. Zu einem Zeitpunkt als sich Entscheidungsträger*innen von Politik und Gesund-

die an alle Hauptvortragenden, Sektionsleiter*innen und Minisymposia-Organisator*innen gerichtete Bitte an, ihre für den Erfolg der Tagung sehr bedeutenden Beiträge auch im Jahr 2021 zu leisten. Angenommene Vortragende für das Jahr 2020 sind herzlich eingeladen, ihre wissenschaftlichen Arbeiten in diesem Jahr zur Publikation in der PAMM einzureichen. Die Publikation der sich im kommenden Jahr weiter entwickelnden wissen-



schaftlichen Erkenntnisse in neuen PAMM-Beiträgen im Jahr 2021 wird zusätzlich ermöglicht werden.

Die aktuelle Ungewissheit um, Sie wissen schon was, lässt aktuell leider keine konkrete Aussage zur Gestaltung der GAMM 2020 im Jahre 2021 in Kassel zu. Unser aller Wunsch, die Jahrestagung in Kassel, wie gewohnt in persönlichem Miteinander erleben zu können, wird begleitet von intensiven Überlegungen und Planungen wirksamer Infektionsschutzmaßnahmen. Auch an einem Plan B, der ersten Online-Jahrestagung in der Geschichte der Gesellschaft für angewandte Mathematik und Mechanik e.V., wird intensiv gearbeitet. Bis zum Frühjahr 2021 werden die meisten Tagungsteilnehmer*innen aus der Lehrendenperspektive großer Gruppen von Online-Studierenden in Mathematik und Mechanik bereits sehr gut online-erfahren sein. Die neue Möglichkeit, zwei oder mehreren gleichzeitig stattfindenden spannenden Vorträgen zeitlich flexibel lauschen zu können, würde den menschlichen Kontakt unserer Wissenschafts-Community nicht ersetzen, aber hoffentlich ein wenig Trost spenden können.

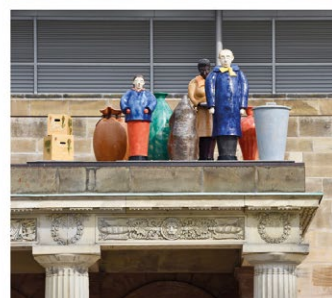
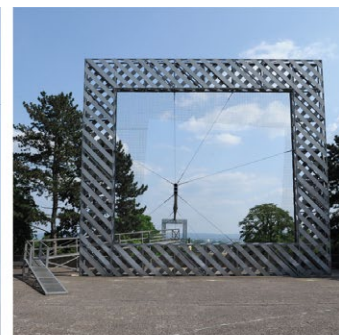
Auch der, dessen Name nicht genannt werden darf, mag die Freude an der aufregenden Auswahl an fabelhaften Süßigkeiten im Honigtopf nicht mildern. Genauso ist die Freude auf die GAMM-Jahrestagung in Kassel bei den Organisatoren*innen ungebrochen. Das Vergnügen an der Vorbereitung, geplanten Durchführung und der ehrenvollen Rolle der Gastgeber verdanken wir der Mathematik- und Mechanik-Community für die wir gemeinsam mit einem tollen Kasseler Team die Tagung veranstalten dürfen. Sehr dankbar sind wir auch den Organisatoren*innen aus Wien, Josef Eberhardsteiner, Joachim Schöberl und Martina Pöll und dem GAMM-Sekretariat Michael Kaliske und Doreen Göhlert für die langjährige und intensive Unterstützung bei der Vorbereitung der GAMM-Tagung in Kassel. Der Dank für die präzise Vorbereitung der GAMM 2020 gebührt dem GAMM 2020 Konferenzbüro mit Tobias Gleim und Christina Franke und der Dank für die Übernahme dieser Aufgaben für die GAMM-Tagung im Jahr 2021 geht an Kevin Watzl. Un-

seren ganz besonderen Dank richten wir an die mehr als eintausend angemeldeten Teilnehmer*innen, die mit ihren Beiträgen, Hauptvorträgen, Sektionsleitungen, Minisymposia, Ehrenvorträgen, Reden und den Public Lectures die GAMM 2020 zu einem strahlenden Ereignis der Wissenschaftswelt gestaltet hätten und im nächsten Jahr sicherlich auch werden.

Ein paar Eindrücke der documenta Stadt Kassel, der Universität Kassel und vorbereiteter Tagungsspecials finden sich als Begleitmaterial zu diesem Artikel. Das Original des GAMM 2020 Graffiti von Cornelius Lustig wird auch im Jahr 2021 in der Größe 5.6m x 1.4m für die Unterschriften und Skizzen ausgewählter wissenschaftlicher Inhalte der Tagungsteilnehmer zu Verfügung stehen.

Wie der der reichen Fantasie einer weltberühmten Autorin entsprungene 'du weißt schon wer', hat leider auch das sehr reale 'du weißt schon was' das Leben und auch die Wissenschaftswelt verändert. Wir schließen den Artikel mit unserem Wunsch, dass diese dramatische Situation den Drang nach Wissen und die Freude am freien Austausch von Erkenntnissen nicht bremsen, sondern weiter beflügeln möge.

Mit herzlichen Grüßen, Ihr GAMM 2020 Organisationsteam aus Kassel



BERICHT AUS DER GAMM

VON MICHAEL KALISKE

Liebe GAMM-Mitglieder,
anstelle des sonst üblichen Protokolls zur Mitgliederversammlung möchte ich in diesem Jahr auf diesem Wege über aktuelle Aspekte der GAMM berichten. Natürlich ist auch unsere wissenschaftliche Gesellschaft stark von den Auswirkungen der Corona-Pandemie betroffen. Mit Zuversicht und Kreativität wurden trotzdem die entsprechenden Maßnahmen umgesetzt, um die Ziele der GAMM auch weiterhin zu erreichen.

Die Jahrestagung der GAMM in Kassel musste leider in diesem Jahr ausfallen und auf das nächste Jahr verschoben werden. Die Pandemie wird sich sicher auch deutlich auf das Format der Jahrestagung 2021 auswirken. Die Diskussion zur angemessenen Gestaltung findet unter Einbeziehung der angemeldeten Teilnehmenden der aktuellen Jahrestagung gerade statt. Über das Ergebnis und das finale Format wird rechtzeitig informiert werden.

Die wesentlichen Schritte und Entscheidungen in der GAMM wurden auch in diesem besonderen Jahr umgesetzt. Die Wahl zum Vorstandsrat konnte natürlich nur elektronisch durchgeführt werden. Allerdings wurde ausnahmsweise und wie vorab angekündigt das Zeitfenster für die Abstimmung erweitert. Die Abstimmung führte zu folgendem Ergebnis:

Schatzmeisterin	Andrea Walther	399 Stimmen (27 Enth)
Sekretär	Michael Kaliske	393 Stimmen (33 Enth)

Vorstandsratsmitglieder:

Strömungsmechanik	Olga Shishkina	352 Stimmen (74 Enth)
Angewandte Funktionalanalysis	Benjamin Stamm	362 Stimmen (64 Enth)
Festkörpermechanik	Kerstin Weinberg	371 Stimmen (55 Enth)

Eine wichtige wissenschaftliche Säule der GAMM bilden die Fachausschüsse, die auf Zeit eingerichtet und regelmäßig evaluiert werden. Für dieses Jahr stand die Berichterstattung zu den Fachausschüssen „Computational Science and Engineering“, „Uncertainty Quantification“ und „Mathematische Signal- und Bildverarbeitung“ auf der Agenda. Herzlichen Dank für die Übersendung der Berichte zur Evaluation. Leider wurde die Sitzung des erweiterten Vorstandsrats in Kassel, der über das Ergebnis der Begutachtung befindet, aufgrund der Corona-Situation abgesagt. Wir haben daher im engeren Vorstand die Verlängerung der begutachteten Fachausschüsse um ein Jahr beschlossen und werden die endgültige Entscheidung in der Sitzung des erweiterten Vorstandsrats 2021 nachholen. Die erneute Vorlage eines Berichts ist nicht erforderlich. Für das Jahr 2021 steht die Evaluierung der Fachausschüsse „Data-driven modeling and numerical si-

mulation of microstructured materials“, „Phasenfeldmodellierung“, „Angewandte und Numerische Lineare Algebra“ und „Analysis partieller Differentialgleichungen“ an.

Selbstverständlich wurden auch in diesem Jahr wieder die Preise der GAMM verliehen. Die Richard-von-Mises-Preisträger sind PD Dr. Elisa Davoli und Dr.-Ing. Fadi Aldakheel. Wir gratulieren den Ausgezeichneten ganz herzlich für ihre herausragenden wissenschaftlichen Leistungen. Ihre Lebensläufe sind in diesem Rundbrief angegeben.

Nach einem intensiven, kompetitiven Evaluationsprozess wurden die vier diesjährigen Dr.-Klaus-Körper-Preise Dr. rer. nat. Dominik Stöger, Dr. rer. nat. Philip Saltenberger, Dr.-Ing. Julian Kochmann und Dr.-Ing. Julian Heß zugesprochen. Den Preisträgern sei herzlich gratuliert, verbunden mit den besten Wünschen für die nächsten Schritte in der wissenschaftlichen Karriere.

Die neue Kohorte der GAMM-Junioren wurde nominiert und evaluiert. Die Namen können auf der Homepage der GAMM eingesehen werden. Herzlichen Glückwunsch den neuen Junioren für diese Auszeichnung.

Erfreulicherweise bilden sich weitere neue GAMM-Nachwuchsgruppen. Sowohl an der Universität Stuttgart als auch am Karlsruher Institut für Technologie wurden wissenschaftliche Gruppen des GAMM-Nachwuchses eingerichtet. Die Links zu den lokalen Gruppen sind auf der Homepage der GAMM zu finden.

Die Kassenlage der GAMM wurde rechtskonform am 14.02.2020 in Dresden von den Kassenprüfern Prof. Michael Beitelschmidt und Prof. Stefan Neukamm überprüft. Die Finanzsituation der Gesellschaft wird im Rahmen der nächsten Mitgliederversammlung – voraussichtlich am 17. März 2021 und sicher auch in einem virtuellen Format – erläutert werden.

Positiv kann berichtet werden, dass sowohl im Jahr 2020 als auch 2021 die Proceedings of Applied Mathematics and Mechanics (PAMM) erscheinen werden. Dank der großzügigen Unterstützung der Organisatoren in Kassel haben die für die Jahrestagung 2020 angemeldeten Teilnehmenden die Möglichkeit, sowohl im Jahr 2020 als auch nach der Präsentation ihres Vortrags 2021 einen Beitrag in den PAMM zu veröffentlichen.

Die nachfolgenden, bereits beschlossenen Austragungsorte der GAMM-Jahrestagungen bleiben unverändert, verschieben sich allerdings um ein Jahr (2022 Aachen, 2023 Dresden, 2024 Magdeburg). Alle lokalen Organisatoren haben die Kollegialität und nötige Flexibilität gebracht, um Reibungsverluste insgesamt zu minimieren.

Abschließend möchte ich alle örtlichen GAMM-Mitgliedsgruppen bitten zu prüfen, ob die Informationen zu den Repräsentanten auf der GAMM-Homepage noch aktuell sind und gegebenenfalls zu aktualisieren.

Ich verbleibe mit herzlichen Grüßen und den besten Wünschen für eine gute Gesundheit.

NACHRUF PROF. DR.-ING. OSKAR MAHRENHOLTZ (1931 – 2020)

VON EDWIN KREUZER

Oskar Mahrenholtz's größtes Interesse galt in jungen Jahren der Geschichte, doch es kam anders. Er absolvierte nach einer Schmiedelehre zunächst ein Fachhochschulstudium in Hamburg. Von 1954 – 1958 folgte ein Studium des Maschinenbaus und der Verfahrenstechnik an der Technischen Hochschule Hannover. Von 1958 – 1966 arbeitet er als Wissenschaftlicher Assistent und später als Wissenschaftlicher Rat am Institut für Mechanik der Technischen Hochschule Hannover, das von Eduard Pestel geführt wurde. Mit einer Arbeit aus dem Gebiet der Biofluid-dynamik wurde er 1962 promoviert und 1966 mit einer Schrift zur analogen Simulationstechnik habilitiert. Bereits im Jahr 1966 wurde Mahrenholtz Ordentlicher Professor und gleichzeitig Direktor des Instituts für Mechanik in Hannover. Im Jahr 1982 folgte er einem Ruf als Leiter des Arbeitsbereichs Meerestechnik II – Strukturmechanik der Technischen Universität Hamburg-Harburg, der er bis zu seiner Emeritierung im Jahr 1996 treu blieb.

Herausragend war sein Engagement für das Wissenschaftssystem der Bundesrepublik Deutschland. Er wirkte in vielen wissenschaftlichen Gremien mit. 1973 – 1979 war er Mitglied des Wissenschaftsrates und hatte von 1977 – 1979 den Vorsitz der wissenschaftlichen Kommission inne. In der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) war er von 1977 – 1983 gewählter Fachgutachter und Vorsitzender des Fachausschusses "Allgemeine Ingenieurwissenschaften", bevor er von 1983 – 1989 Vizepräsident der DFG wurde. Von 1989 – 1992 war er Präsident der Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik (GAMM); 1997 wurde er zum Ehrenmitglied der GAMM gewählt. Er war Organisator vieler Tagungen und Konferenzen. Die wichtigste war ICIAM 1995 mit mehr als 2000 Teilnehmern. Von 1996 – 2000 war er President of ECCOMAS (European Community on Computational Methods in Applied Sciences) und von 1989 – 2001 Delegierter der Bundesrepublik Deutschland im NATO Science Committee. Mahrenholtz war Herausgeber bzw. Mitherausgeber zahlreicher nationaler und internationaler wissenschaftlicher Zeitschriften und hat selbst fleißig zu Themen seines reichhaltigen Forschungsspektrums publiziert. Neben vielen Zeitschriftenartikeln tragen auch einige Buchveröffentlichungen seinen Namen. Seine Neigung zu geschichtsbezogenen Themen wird an einer Reihe von Publikationen deutlich, die sich mit historischen Fragen auseinandersetzen. Darunter sind sehr lesenswerte Aufsätze zur ‚Geschichte der Mechanik‘ aus den Jahren 1976 bis 1982.

Durch eine Reihe von Gastprofessuren baute er seine Auslandskontakte sowohl fachlich als auch persönlich aus. Besonders zu erwähnen sind das Indian Institute of Technology Madras, die University of Toronto, Kanada, die University of Kiushu, Japan, und die Universität Leuven,



Foto: AdWHH

Belgien. Vor allem lagen ihm die Verbindungen mit polnischen Wissenschaftlern am Herzen. Er hat damit sehr früh einen Beitrag für die Aussöhnung mit unserem unmittelbaren östlichen Nachbarn geleistet. Die deutsch-polnischen Symposien über die Stabilität nichtlinearer Strukturen gehen mit auf seine Initiative zurück.

Von den zahlreichen Auszeichnungen, die Mahrenholtz erhalten hat, soll hier neben den Ehren-Doktor-Titeln der Universitäten Saarbrücken, Rostock und Bremen sowie der TU Krakau das Große Verdienstkreuz des Verdienstordens der Bundesrepublik Deutschland erwähnt werden. Er war gewähltes Mitglied und Ehrenmitglied vieler wissenschaftlicher Gesellschaften im In- und Ausland. 1989 wurde er in die Joachim Jungius-Gesellschaft der Wissenschaften gewählt. Seit deren Gründung 2005 gehörte er der Akademie der Wissenschaften in Hamburg an. Oskar Mahrenholtz starb am 6. April 2020 im 89. Lebensjahr. Er war ein Mensch mit leicht herbem Charme aber sensiblem Kern, er war mit einer subtilen Ironie gesegnet, stets humorvoll und immer zu einem Scherz aufgelegt. Er war ein einfühlsamer, fürsorglicher Ratgeber. Mit ihm verliert die GAMM einen wichtigen Förderer und engagierten Gesprächspartner, den wir sehr vermissen werden.

Hamburg im April 2020

Edwin Kreuzer

RICHARD-VON-MISES-PREIS 2020

PD DR. ELISA DAVOLI



1) Allgemeine Angaben

- Nationalität: Italienisch
- Geburtsdatum: 30.10.1985
- Familie: Verheiratet
- Web: <https://www.asc.tuwien.ac.at/~edavoli/>
- Email: elisa.davoli@tuwien.ac.at

- Position: Project leader und (FWF) Elise Richter fellow -- Institut für Analysis und Scientific Computing (ASC) – TU Wien

2) Ausbildung

- Habilitation: 04.11.2019.
Thesis: “Multiscale problems in mechanics of materials”,
Fakultät für Mathematik, Universität Wien

- Promotion: 26.10.2012
Thesis: “Thin structures in Nonlinear elasticity and in plasticity: a variational approach”
SISSA (ISAS), Trieste, Italien.
Betreuer: Prof. Maria Giovanna Mora.

3) Berufliche Erfahrung

- Seit 01/2020 Project leader und FWF Elise Richter fellow, ASC – TU Wien
- 06/2019 – 01/2020 Project leader und FWF Elise Richter fellow -- Universität Wien
- 01/2017 – 05/2019 Universität Assistentin, Fakultät für Mathematik, Universität Wien
- 06/2015 – 01/2017 Postdoc, Fakultät für Mathematik, Universität Wien
- 07/2012 – 05/2015 Postdoc, Department of Mathematical Sciences, Carnegie Mellon University, Pittsburgh (PA), USA

4) Third-party funding, Auszeichnungen, Ehrungen und Veröffentlichungen

- 2020 – 2026 Tunable materials: geometry, nonlocality chirality. (FWF START prize, Principal Investigator)
- 2020 Richard-von-Mises-Preis
Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik (GAMM)
- 2019 – 2020 Mathematical Frontiers in Large Strain Continuum Mechanics
(OeAD-WTZ, Principal Investigator)
- 2019 – 2022 Large Strain Challenges in Materials Science
(FWF-GACR, Co-Principal Investigator mit Prof. M. Kruzik)
- 2019 – 2023 High contrast materials in plasticity and magnetoelasticity
(FWF, Principal Investigator)
- Seit 04/2019 Member of the Young Academy of the Austrian Academy of Sciences
- 2018 Faculty Teaching Award, Fakultät für Mathematik, Universität Wien
- 2018 Grant für die Organisation des ESI (Erwin Schrödinger Institute) Workshop “New trends in the variational modeling of failure phenomena”
(mit JProf. M. Friedrich und Dr. R. Scala)
- 2010 Marco Reni Graduation Prize, Università degli Studi di Trieste
- Bis 06/2020 23 Artikel in Journals | 5 Preprints | 1 Proceeding | 33 Invited Talks | 16 Invited Seminars

DR.-ING. FADI ALDAKHEEL



1) Allgemeine Angaben

- Nationalität: Deutsch & syrisch
- Geburtsdatum: 01.01.1984
- Familie: Verheiratet, zwei Kinder
- Web: <https://www.ikm.uni-hannover.de/de/aldakheel/>
- Email: aldakheel@ikm.uni-hannover.de

- Position: Oberingenieur - Institut für Kontinuumsmechanik (IKM) - LUH

2) Ausbildung

- Habilitation: Thesis: "Simulation of Fracture Processes using Global-Local Approach and Virtual Elements". Tag der Einreichung: 15.06.2020
Fakultät für Maschinenbau, Institut für Kontinuumsmechanik – LUH
Betreuer: Prof. Peter Wriggers | Zweitbetreuer: Prof. Laura De Lorenzis

- Promotion: Dissertation: "Mechanics of Nonlocal Dissipative Solids: Gradient Plasticity And Phase Field Modeling of Ductile Fracture"
Institut für Mechanik (Bauwesen), Universität Stuttgart
Jahr der mündlichen Prüfung: 2016 (mit Auszeichnung)
Betreuer: Prof. Christian Miehe | Zweitbetreuer: Prof. Jörn Mosler

3) Berufliche Erfahrung

- Seit 03/2020 Oberingenieur (Chief Engineer), IKM - LUH
- Seit 08/2017 Bereichsleiter Materialmodellierung und Schädigungsmechanik
Institut für Kontinuumsmechanik, Leibniz Universität Hannover
- 06/2016 – 07/2017 Post-Doc, Institut für Mechanik (Bauwesen), Universität Stuttgart
- 01/2014 – 07/2017 Kursleiter des internationalen Masterprogramms COMMAS Universität Stuttgart
- 01/2014 – 07/2017 Lokaler Kursleiter des EU-Exzellenzprogramms: "Erasmus Mundus Master of Science in Computational Mechanics"
- 01/2012 – 01/2014 Prüfungsbeauftragter des internationalen Masterprogramms COMMAS
- 10/2011 – 05/2016 Wissenschaftlicher Mitarbeiter, Universität Stuttgart, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl für Materialtheorie
- 07/2007 – 08/2009 Lehrassistent, Fakultät für Petrochemieingenieurwesen Alfurat University, Syria
- 06/2006 – 07/2007 HLK-Ingenieur (Heizungs-, Lüftungs- und Klimatechnik) CIAT Middle east north, Aleppo, Syria

4) Auszeichnungen, eingeworbene Fördermittel und Veröffentlichungen

- 2020 Richard-von-Mises-Preis
Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik (GAMM)
- 2019 – 2023 Teilprojektleiter im SFB 1153 & SPP 2020
- 2019 Best Paper Awards
International Federation for Structural Concrete
- 2011 DAAD Stipendium für exzellente Leistungen im Masterstudium COMMAS
- 2009 Stipendium des Bildungsministeriums in Syrien für den Abschluss des Masterstudiums (M.Sc.) in Stuttgart, Deutschland
- 2002 – 2006 unterschiedliche Ehrenurkunden für herausragende Studienleistungen
Fakultät für Maschinenbau, Universität Aleppo, Syrien
- Bis 08/2020 34 Artikel in peer-reviewed Journals | 18 Artikel in Conference Proceedings

AUFRUF · CALL

**Für die Jahrestagung 2022 in Aachen,
28. März - 01. April,
veranstaltet die GAMM einen
Wettbewerb zur Einreichung von**

**For its Annual Meeting 2022 in Aachen,
March 28 - April 1,
GAMM is arranging a Competition for
Submission of**

NACHWUCHS- MINISYMPOSIEN

YOUNG RESEARCHERS MINISYMPOSIA

Wie die klassischen Minisymposien soll sich auch ein Nachwuchs-Minisymposium auf ein spezifisches, aktuelles Forschungsthema konzentrieren. Es stehen zwei Stunden zur Verfügung mit vier bis sechs Vorträgen. Um ein Nachwuchs-Minisymposium bewerben sich zwei Organisatoren von zwei verschiedenen Institutionen. Wie alle Vortragenden sollten sie höchstens 35 Jahre alt und noch nicht zum/zur („tenured“) Professor/in ernannt sein. Die Vortragenden sollen ebenfalls aus verschiedenen Institutionen kommen.

Like classical minisymposia, a young researchers' minisymposium shall focus on a specific, timely research subject. It will last two hours with four to six lectures. Two organisers from two different institutions apply for a young researchers' minisymposium. Like all other speakers, they should be at most 35 years old and not yet hold a tenured professor position. The speakers should also come from different institutions.

Das Programmkomitee wird aus den eingegangenen Bewerbungen die Nachwuchs-Minisymposien auswählen. Eine finanzielle Förderung der Teilnehmer ist nicht möglich.

From the applications received, the programme committee will select the young researchers' minisymposia. There is no financial support for the participants.

Zeitplan:

bis 31. Dezember 2020

Einreichung von Vorschlägen per e-mail (plain ASCII) an die Geschäftsstelle: gamm@mailbox.tu-dresden.de

Die Bewerbung besteht aus einer einseitigen Zusammenfassung, den Titeln der einzelnen Vorträge sowie der Angabe von Geburtsdatum, derzeitiger Stellung und Institution für alle Organisatoren und Vortragende.

28. März - 01. April 2022

Durchführung der ausgewählten Minisymposien.

Schedule:

until December 31, 2020

Submission of proposals by e-mail (plain ASCII) to the GAMM office: gamm@mailbox.tu-dresden.de

A proposal consists of a one page abstract, the titles of all lectures and information about the date of birth and the current position and affiliation of all organisers and speakers.

March 28 - April 1

Carrying out the nominated minisymposia.

AUFRUF · CALL

WAHLEN ZUM VORSTANDSRAT

Aufruf des Präsidenten
mit Bitte um Wahlvorschläge zur Vorstandsratswahl 2021

Wahlvorschläge

Wahlvorschläge können bei der Geschäftsstelle der GAMM per E-Mail unter GAMM@mailbox.tu-dresden.de eingereicht werden.

Vorschlagsberechtigt sind persönliche Mitglieder der GAMM sowie korporative Mitglieder.

Die folgenden Ämter des GAMM-Vorstandsrats sind 2021 zu wählen. Die Amtszeiten werden zum 01.01.2022 beginnen.

Mitglieder des Vorstandsrates

Prof. T. Ricken, Stuttgart, Festkörpermechanik, 1. Amtszeit bis 2021, wieder wählbar

Prof. R. Seifried, Hamburg, Dynamik und Regelungstheorie, 2. Amtszeit bis 2021, nicht wieder wählbar

Prof. R. Herzog, Chemnitz, Angewandte Analysis und Numerische Simulation, 1. Amtszeit bis 2021, wieder wählbar

Die Quorenregelung der Wahlordnung verlangt, dass der/die PräsidentIn von mindestens 25 Mitgliedern, der Vizesekretär von mindestens 10 Mitgliedern und die zu wählenden Mitglieder des Vorstandsrats von mindestens 5 Mitgliedern schriftlich für die Nominierung unterstützt werden. Wahlvorschläge und Unterstützungserklärungen, auch für eine Wiederwahl, müssen spätestens acht Wochen vor der Mitgliederversammlung, also bis zum 20.01.2021, bei der Geschäftsstelle eintreffen.

Vorstandsratswahl 2021

Die Stimmabgabe zur Vorstandsratswahl erfolgt entweder mittels Urnenwahl im Rahmen der Mitgliederversammlung der Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik e.V. in Kassel am Mittwoch, den 17.03.2021, oder mittels elektronischer Stimmabgabe. Als Mitglied der GAMM erhalten Sie eine gesonderte Einladung. Stimmberechtigt sind persönliche Mitglieder der GAMM sowie namentlich benannte Delegierte der korporativen Mitglieder.

Ich bitte Sie, an der Mitgliederversammlung in Kassel teilzunehmen und sich an der Wahl zu beteiligen. Die elektronische Stimmabgabe ist in dem Zeitraum vom 10.02.2021 bis 10.03.2021 über die Internetseite der GAMM möglich.

Jörg Schröder, Präsident

Mitglieder der Wahlkommission für die Vorstandsratswahlen 2021

Vorsitzende: H. Faßbender, Braunschweig, Vizepräsidentin

Gewählte Mitglieder: B. Kaltenbacher, Klagenfurt
S. Leyendecker, Erlangen
H. Abels, Regensburg
R. Seifried, Hamburg

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

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

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

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

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

Weitere Mitglieder des Vorstandsrates

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

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

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

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

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

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

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

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

Kassenprüfer

Prof. Michael Beitelschmidt
 Technische Universität Dresden,
 Fakultät Maschinenwesen

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

EHRENMITGLIEDER DER GAMM

Ehrenvorsitzender

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

Ehrenmitglieder

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

Prof. Dr. Aurel Stodola
† 25. Dezember 1942

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Prof. Dr.-Ing. Jürgen Zierep (1999)

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

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

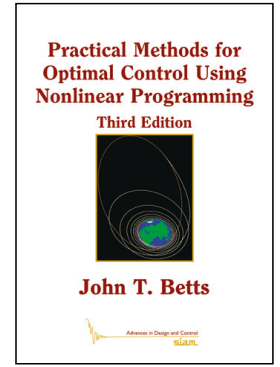
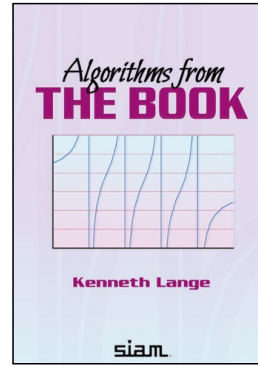
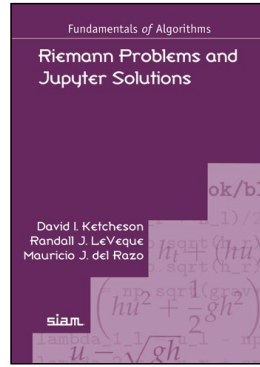
PERSONALIA

Todesfälle, wir gedenken:

Prof. Dr.-Ing. Oskar Mahrenholtz, Hamburg
Prof. Dr.-Ing. Gabriela Atanasiu, Rumänien
Prof. Dr. Boro Döring, Düsseldorf

Prof. Dr. Adrian Carabineanu, Bukarest
Prof. Dr.-Ing. Gustav E. Rosemeier, Hannover
Prof. Dr. Witold Gutkowski, Warschau
Prof. Dr.-Ing. Jerzy Osinski, Warschau

Rundbrief Readers



Save up to 30% on These Titles

Riemann Problems and Jupyter Solutions

David I. Ketcheson, Randall J. LeVeque, and Mauricio J. del Razo

This book covers the fundamental ideas related to classical Riemann solutions, including their special structure and the types of waves that arise, as well as the ideas behind fast approximate solvers for the Riemann problem. The emphasis is on the general ideas, but each chapter delves into a particular application. The book is also available in electronic form as a collection of Jupyter notebooks.

2020 · xii + 166 pages · Softcover · 978-1-611976-20-5 · List \$59.00 · SIAM Members \$41.30 · Rundbrief Readers \$47.20 · FA16

Algorithms from THE BOOK

Kenneth Lange

Written in clear language and with mathematical rigor, the book incorporates Julia code for easy experimentation, includes a large number of classroom-tested exercises at the end of each chapter, and covers background material, often omitted from undergraduate courses, in the appendices.

2020 · xxii + 214 pages · Softcover · 978-1-611976-16-8 · List \$69.00 · SIAM Members \$48.30 · Rundbrief Readers \$55.20 · OT168

Practical Methods for Optimal Control Using Nonlinear Programming, Third Edition

John T. Betts

The book focuses on the direct transcription method for optimal control, and features a summary of relevant material in constrained optimization, including nonlinear programming; discretization techniques appropriate for ordinary differential equations and differential-algebraic equations; and several examples and descriptions of computational algorithm formulations that implement this discretize-then-optimize strategy.

2020 · xiv + 731 pages · Hardcover · 978-1-611976-18-2 · List \$119.00 · SIAM Members \$83.30 · Rundbrief Readers \$95.20 · DC36