# RUNDBRIEF

GAMM

## GESELLSCHAFT FÜR ANGEWANDTE MATHEMATIK UND MECHANIK

AUS DEM INHALT:


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



MICHAEL F. HERBST UND BENJAMIN STAMM:
NUMERISCHE METHODEN FÜR ATOMISTISCHE SIMULATIONEN

VANESSA VALDES Y BECK, PETER BETSCH UND MARK SCHIEBL:
GENERIC ALS GRUNDLAGE NUMERISCHER METHODEN FÜR GEKOPPELTE PROBLEME DER FESTKÖRPERDYNAMIK

JUNGE WISSENSCHAFTLERINNEN UND WISSENSCHAFTLER:
ULRICH RÖMER
MARKUS WEIMAR



1/2022

www.gamm-ev.de

IMPRESSUM

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

Umschlagbild:
*Scientific animation* by Visual Science, 2021, www.go.visual-science.com

**ISSN 2196-3789**

INHALT

**4 Numerische Methoden für atomistische Simulationen**
Michael F. Herbst und Benjamin Stamm

**17 GENERIC als Grundlage numerischer Methoden für gekoppelte Probleme der Festkörperdynamik**
Vanessa Valdes y Beck, Peter Betsch und Mark Schiebl

**19 Steckbrief Ulrich Römer**

**21 Steckbrief Markus Weimar**

**23 SAMM 2021 – Form- und Topologieoptimierung**
Peter Gangl und Kathrin Welker

**25 Nachruf Prof. Dr.-Ing. Dr.techn.E.h. Dr.h.c. Jürgen Zierep**
Karl Bühler

**Berichte aus den Fachausschüssen:**

**26 Angewandte Operatortheorie**

**26 Optimierung mit partiellen Differentialgleichungen**

**27 Analysis partieller Differentialgleichungen**

**28 Dynamik und Regelungstheorie**

**29 Mathematische Signal- und Bildverarbeitung (MSIP)**

**30 Analysis von Mikrostrukturen**

**31 Modellierung, Analysis und Simulation molekularer Systeme**

**31 Numerische Analysis**

**32 Stochastische Optimierung**

**32 Angewandte und Numerische Lineare Algebra (ANLA)**

**33 Computational Biomechanics**

**34 Computational Science and Engineering (CSE)**

**34 Data-driven modeling and numerical simulation of micro-structured materials (AG Data)**

**35 Phasenfeldmodellierung**

**35 Uncertainty Quantification (UQ)**

**36 Experimentelle Festkörpermechanik**

**36 Computational and Mathematical Methods in Data Science**

**37 Moderne Lehre und Didaktik**

**40 Die mathematische Forschungsdateninitiative in der NFDI: MaRDI (Mathematical Research Data Initiative)**
P. Benner, M. Burger, D. Göddeke3, C. Görgen, C. Himpe, M. Hintermüller J. Heiland, T. Koprucki, M. Ohlberger, S. Rave, M. Reidelbach, J. Saak,, A. Schöbel, K. Tabelow, M. Weber

**44 Wissenschaftliche Veranstaltungen**

**45 Ausschreibung: Richard-von-Mises-Preis 2021**

**46 Vorstand der GAMM**

**47 Ehrenmitglieder der GAMM**

# LIEBE LESERIN, LIEBER LESER,

# LIEBE GAMM-MITGLIEDER,

die Simulation auf atomistischer Ebene und die dazu benötigten numerischen Methoden sind das Thema des ersten Leitartikels der vorliegenden Ausgabe. Die Autoren Michael Herbst und Benjamin Stamm von der RWTH Aachen beschreiben anhand der Dichtefunktionaltheorie verschiedene Aspekte numerischer Methoden, die für die Simulation molekularer Systeme benötigt werden. Modellierung, Analysis und Simulation solcher Systeme sind gleichermaßen für die Mathematik und die Ingenieurwissenschaften von Interesse. Es ist auch das Thema des gleichnamigen GAMM-Fachausschusses, der im Jahr 2017 gegründet wurde.

Im zweiten Leitartikel beschreiben Vanessa Valdes Y Beck, Peter Betsch und Mark Schiebl, wie der ursprünglich für komplexe Fluide entwickelte GENERIC Formalismus für thermo-elastische Festkörper genutzt werden kann. Entsprechend gewonnene numerische Zeitintegrationsverfahren erfüllen nicht nur automatisch die Bilanzen des Drehimpulses und der Energie, sondern gewährleisten gleichzeitig die Einhaltung des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik. Beispiele für diskrete sowie kontinuierliche Systeme zeigen die Anwendbarkeit im Bereich der thermomechanischen Strukturdynamik.

Als Nachwuchswissenschaftler aus der Mechanik stellt sich Ulrich Römer von der TU Braunschweig und aus der Mathematik Markus Weimar von der Ruhr-Universität Bochum vor.

Für die GAMM Juniors berichten in dieser Ausgabe Peter Gangl und Kathrin Welker von der achten GAMM Sommerschule für Angewandte Mathematik und Mechanik, die dieses Mal das Thema Form- und Topologieoptimierung behandelt hat. Lesen Sie mehr dazu auf S. 23.

Traditionell schreiben in der Frühjahrsausgabe des GAMM-Rundbriefes die aktuell existierenden GAMM-Fachausschüsse über ihre Aktivitäten des vergangenen Jahres. Derzeit hat die GAMM 18 aktive Fachausschüsse. Neu hinzugekommen ist der GAMM-Fachausschuss Moderne Lehre und Didaktik. Sie finden die Beiträge ab S. 26.

Forschungsdatenmanagement nimmt eine immer wichtigere Rolle in allen Bereichen der Wissenschaft ein. Der Verein Nationale Forschungsdateninfrastruktur (NFDI) e.V. (https://www.nfdi.de) wurde 2020 gegründet, um dem gesteigerten Bedarf nachzukommen. In bisher zwei Auswahlrunden wurden verschiedene, fachlich orientierte Konsortien ausgewählt. In der vorliegenden Ausgabe wird ab S. 40 über MaRDI (Mathematical Research Data Initiative), die geförderte Initiative aus der Mathematik, berichtet.

Hinweisen möchten wir auch wieder auf die Ausschreibung des Richard-von-Mises-Preises auf S.45; der Stichtag für Nominierungen ist der 30. September 2022.

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

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

Köln und Bochum im April 2022

Axel Klawonn und Daniel Balzani

# NUMERISCHE METHODEN FÜR ATOMISTISCHE SIMULATIONEN

VON MICHAEL F. HERBST UND BENJAMIN STAMM

## Einleitung

Entscheidende Forschungsfelder des 21. Jahrhunderts, wie die Entwicklung neuer Medikamente, Verfahren zur Nutzung und Speicherung erneuerbarer Energien, grüne Prozesse in der chemischen Industrie, oder die immer kleiner und leistungsfähiger werdenden Bauteile der Halbleiterelektronik, stehen direkt mit der Entwicklung neuartiger Materialien im Zusammenhang. Um notwendige innovative Prozesse zu begleiten und zu beschleunigen ist ein genaues Verständnis der physikalischen und chemischen Vorgänge auf atomarer Ebene zwingend notwendig. Dazu werden in einem immer größeren Maß Simulationsrechnungen durchgeführt.

Dieser Beitrag betrachtet anhand zweier Bespiele die Rolle der Mathematik, und im Speziellen die Rolle der numerischen Mathematik, in diesem Forschungsfeld.

Um auf atomarer Ebene Aspekte wie den Wirkmechanismus eines Medikamentes, Katalyse, Fotosyntese oder die chemische Reaktivität zu beschreiben, müssen Modelle der Quantenmechanik verwendet werden. Diese leiten sich von der Schrödingergleichung ab, einem hoch-dimensionalen Eigenwertproblem. Wie wir im Folgenden noch genauer beleuchten werden, verhindert sowohl diese hohe Dimensionalität als auch die Komplexität der betrachteten physikalischen Systeme eine exakte Lösung für alle praktisch relevanten Probleme. Deshalb bedient man sich einer Reihe approximativer Modelle. Als ein Beispiel sei die Dichtefunktionaltheorie (DFT) genannt, welche heutzutage im Bereich der rechengestützten Chemie, der Festkörperphysik oder den Materialwissenschaften unersetzlich ist.

Aus diesem Grund überrascht es nicht, dass eine Suche nach dem Stichwort *Dichtefunktionaltheorie* ca. 1,9 Millionen Treffer bei Google Scholar liefert. Zum Vergleich: Für *Navier-Stokes* erhält man “nur” 1 Million Treffer. Ein umgekehrtes Bild ergibt sich bei einer Suche nach diesen beiden Begriffen auf der mathematischen Plattform MathSciNet. Während *Navier-Stokes* mit 11000 Ergebnissen ebenfalls prominent vertreten ist, ergeben sich lediglich 226 Resultate für *Dichtefunktionaltheorie*. Dies belegt eindrücklich, dass die Mathematik in diesem Themenfeld unterrepräsentiert ist. Dabei sind die DFT-Gleichungen ein klassisches variationelles Minimierungsproblem, dessen Diskretisierung und numerische Lösung also klar mathematische Kompetenzen erfordert. Woran liegt dies? Liegt dies daran, dass historisch bedingt die angewandte Mathematik eng mit den Ingenieurwissenschaften verknüpft ist? Die GAMM ist hier das beste Beispiel, wobei zu beachten ist, dass die atomistische Skala auch im Ingenieurwesen stärker Einzug hält. Als Beispiel wäre hier die Simulation von unstrukturierten Materialen auf atomarer Skala zu nennen welches einen der Autoren beschäftigt.

Um die Komplexität der Thematik zu verdeutlichen, wollen wir kurz auf die Größenordnung üblicher Simulationsprobleme eingehen. Wir betrachten ein Molekül mit $M$ Atomen und $N$ Elektronen und widmen uns, für fixe Position der Atomkerne, der Beschreibung der Struktur der Elektronen. Die Wellenfunktion als Lösung der Schrödingergleichung für das entsprechende Vielteilchensystem hängt von $3\,N$ Variablen ab, i.e. $\Psi\colon \mathbb{R}^{3N} \longrightarrow \mathbb{C}$. Bereits für Kohlenstoffdioxid ($CO_2$, ein sehr kleines Molekül) ist dies eine Funktion in 66 Dimensionen! Approximative Methoden ermöglichen diesen Fluch der Dimensionalität zu brechen. Zum Beispiel erhält man bei der DFT unabhängig von $N$ ein dreidimensionales Problem, welches üblicherweise innerhalb von Minuten bis zu einigen Stunden lösbar ist. Obwohl viele chemische und physikalische Eigenschaften exzellent durch die DFT beschrieben werden, gibt es auch eine Reihe wichtiger Größen, z.B. im Bereich optischer oder magnetischer Eigenschaften, bei welchen die DFT manchmal versagt. Von einem mathematischen Gesichtspunkt sind diese Aspekte kaum verstanden. Soll zudem die Bewegung der Atomkerne betrachtet werden, meist unter der vereinfachten Annahme, dass Atomkerne klassische Teilchen sind, so muss die Elektronenstruktur in jedem Zeitschritt neu berechnet werden. Um beispielsweise die Bindung des Coronavirus (siehe Abb. 1) an den menschlichen ACE2 Rezeptor zu verstehen sind Schrittweiten von zwei Femtosekunden bei einer Simulation von vier Mikrosekunden, also 2 Millionen Zeitschritte, nötig [1]. Dabei ergibt sich die Schrittweite aus der Notwendigkeit die dynamischen Eigenschaften des Bindungsvorganges akkurat zu beschreiben und die Dauer daraus, dass thermodynamische Mittel einer Observablen über eine zeitabhängige Trajektorie bestimmt werden.

Zudem sollte beachtet werden, dass die Anzahl der Simulationen, welche üblicherweise zur Beantwortung einer Forschungsfrage benötigt werden, in den letzten Jahren enorm zugenommen hat. Beispielsweise ist es üblich bei

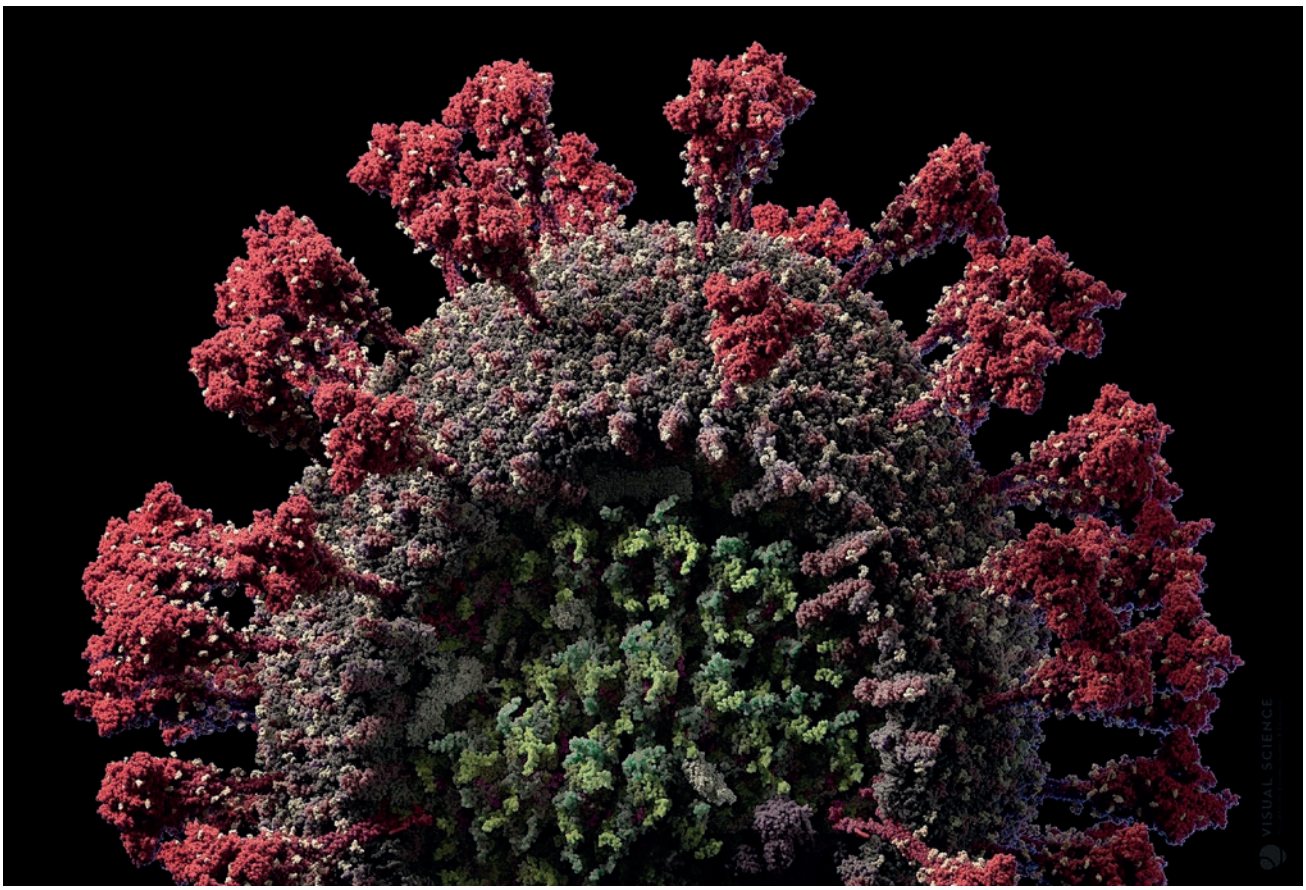


*Abb. 1: Visualisierung des Coronavirus, ein Molekül mit Millionen von Elektronen und einer komplexen Geometrie (Scientific animation by Visual Science, 2021, www.go.visual-science.com).*

der Entwicklung neuer Materialien verstärkt Simulationsprotokolle einzusetzen, welche mittels systematischer Hochdurchsatzrechnungen unter Millionen von Strukturen zunächst automatisch die aussichtsreichsten Kandidaten für die weitere Untersuchung identifizieren. Bei einer derart großen Zahl von Simulationen spielen Fragen wie die Zuverlässigkeit und Stabilität von Algorithmen, aber auch die Effizienz eine deutlich größere Rolle als in den Anfängen der atomistischen Simulationen. Demgegenüber steht die übliche Praxis numerische Parameter heuristisch zu bestimmen. Hier besteht ohne Zweifel die Notwendigkeit für adaptive Algorithmen sowie robuste Fehlerkontrolle um numerische Parameter automatisiert wählen zu können, sodass ein optimales Gleichgewicht aus Genauigkeit und Laufzeit erreicht wird. Im Hinblick auf die zunehmende Verbreitung datengetriebener Methoden in den angesprochen Anwendungsfeldern, ist davon auszugehen dass die Wichtigkeit von Hochdurchsatzrechnungen nur noch zunehmen wird, um den weiter wachsenden Datenhunger zu stillen.

Bedingt durch die grundlegende Komplexität atomistischer Simulationen ist die Rolle der Mathematik in diesem Themenbereich ebenfalls vielfältig: Sie beinhaltet auf einer übergeordneten Ebene sowohl das Abstrahieren, Formulieren und Analysieren von Modellen als auch das Entwickeln von modernen, präzisen und effizienten Lösungsverfahren, sowie deren Fehlerkontrolle. Neben Funktionalanalysis, numerische Analysis und numerische lineare Algebra betrifft dies auch Bereiche der Mathematik wie Differentialgeometrie, Quantifizierung von Unsicherheiten und Stochastik.

Anhand von zwei Beispielen möchten wir nun aufzeigen wie moderne Mathematik im Bereich der atomistischen Simulationen etwas bewirken kann. Zum einen werden wir genauer auf die Dichtefunktionaltheorie eingehen, welche oft in Form eines nicht-linearen (in den Eigenvektoren) Eigenwert-Problems betrachtet wird. Zum anderen werden wir sogenannte Kontinuums-Lösungsmittelmodelle und deren Diskretisierung betrachten. Diese Probleme können als Grenzflächenprobleme oder Integralgleichungen betrachtet werden wobei die Schwierigkeit oft in der sehr komplexen Geometrie von Molekülen liegt (vergleiche Abb. 1).

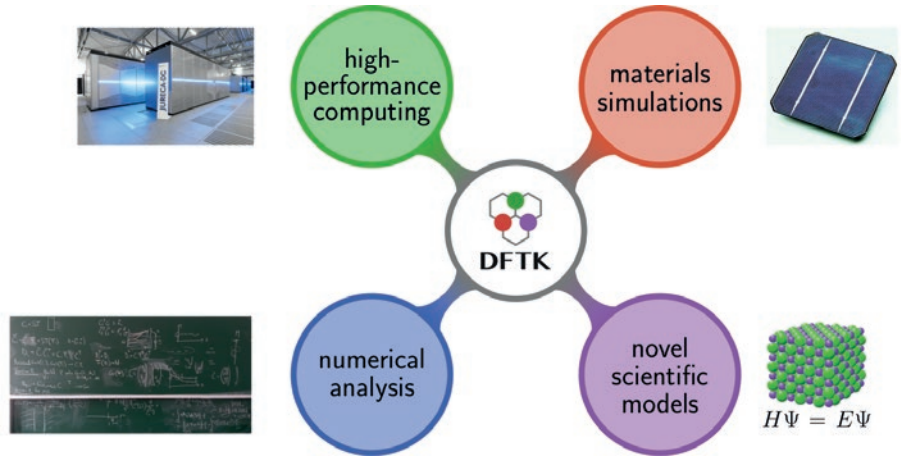



*Abb. 2: Die durch DFTK im Bereich der atomistischen Simulationen verbundenen Forschungsfelder* [2].

**Dichtefunktionaltheorie (DFT)**

Für den einfachsten Fall eines Moleküls oder Nichtleiters lässt sich das der DFT zugrunde liegende nichtlineare Eigenproblem wie folgt formulieren:

$$\forall i \in 1, \ldots, N: \quad \left(-\frac{1}{2}\Delta + V[\rho_\Phi]\right)\psi_i = \varepsilon_i \psi_i, \quad (1)$$

wobei üblicherweise die $N$ Kohn-Sham Orbitalfunktionen $\psi_i$ mit der niedrigsten Kohn-Sham Eigenenergie $\varepsilon_i$ gesucht werden. Dabei ist $\Delta$ der Laplace-Operator in $\mathbb{R}^3$ und $V$ ein Potential, welches über die Elektronendichte

$$\rho_\Phi(r) = \sum_{i=1}^{N} |\psi_i(r)|^2 \quad (2)$$

selbst wieder von den Orbitalen abhängt. Die genaue Form von $V$ unterscheidet sich zwischen den DFT Modellen, ist aber stets nicht-linear. Das betrachtete Gebiet und die Wahl der Randbedingungen des gekoppelten Differentialgleichungssystems (1) unterscheidet sich je nach Anwendung. Üblich sind z.B. periodische Randbedingungen beim Betrachten der Einheitszelle eines Festkörpers oder gar keine für Moleküle auf ganz $\mathbb{R}^3$.

Die gekoppelten Gleichungen (1) und (2) definieren ein Fixpunktproblem $F(\rho) = \rho$ in der Dichte $\rho$, wobei $F$ das Lösen von (1) sowie die Konstruktion der neuen Dichte (2) abstrakt zusammenfasst. Dieses Problem wird in der Praxis iterativ, mittels der Methode der selbstkonsistenten Felder (self-consistent field, SCF) ρ

$$\rho_{n+1} = \rho_n + \alpha P^{-1}[F(\rho_n) - \rho_n], \quad (3)$$

gelöst. Hierbei wird der Vorkonditionierer $P$ und der Dämpfungsparameter $\alpha$ so gewählt, dass die Folge der Dichten $\rho_n$ auf den Fixpunkt konvergiert. Man beachte, dass jede Anwendung von $F$ das (iterative) Diagonalisieren des Operators in (1) impliziert, sodass es sich beim SCF um zwei ineinander verschachtelte iterative Algorithmen mit einer Vielzahl numerischer Parameter wie $P$ und $\alpha$ handelt. Nicht zuletzt deshalb steckt die numerische Analysis für SCF Probleme noch in den Kinderschuhen und Parameter werden in der Praxis oft nach dem Prinzip “Trial and Error” gewählt. In Anbetracht von üblichen Laufzeiten in der Größenordnung von Stunden ist dies sicherlich nicht zufriedenstellend.

Um dem entgegen zu wirken und zwischen der numerischen Analysis, der mathematischen Physik, dem Höchstleistungsrechnen und den Anwendungen in Physik, Chemie und Materialwissenchaften eine Brücke zu schlagen hat einer von uns vor ungefähr drei Jahren das Julia-Programmpacket DFTK (Density-Functional ToolKit, https://dftk.org) ins Leben gerufen[2]. Ziel dieses Projektes ist es eine gemeinsame Plattform für interdisziplinäre Forschung im Bereich atomistischer Simulationen zu bieten (vgl. Abb. 2). Konkret bedeutet dies, dass DFTK nicht nur die heute üblichen DFT-Methoden, sondern auch beliebige vereinfachte Modelle behandeln kann, welche der numerischen Analysis zugänglich sind. Auf diese Weise können neue Algorithmen und Fehlerschätzer sowohl auf Basis exakter Analysis entwickelt als auch *direkt* im Kontext praktischer Anwendungsprobleme getestet werden. Mit 7000 Zeilen Code ist DFTK im Vergleich zu anderen DFT-Programmen äußerst zugänglich und unterstützt darüber hinaus beliebige Fließkommagenauigkeiten oder algorithmisches Differenzieren, was DFTK insgesamt zu einer idealen Plattform für die mathematische Forschung im Bereich der DFT macht. siehe Abb. 2.

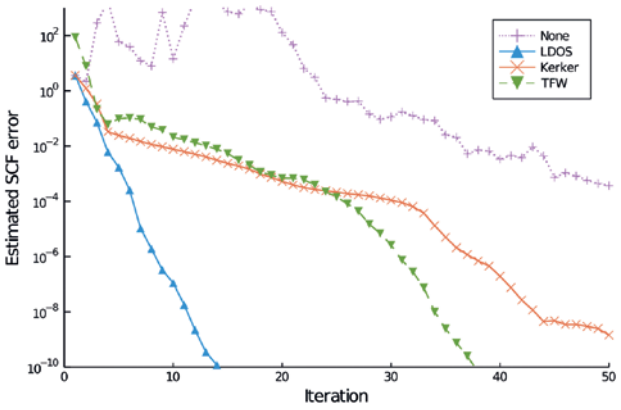



*Abb. 3: Konvergenz der SCF Iterationen eines inhomogenen Festkörpers aus Aluminium und Silika in Abhängigkeit des Vorkonditionierers P. Der LDOS Vorkonditionierer (blau) zeigt eine deutlich bessere Konvergenz als übliche Alternativen. Nachdruck von [4] mit freundlicher Genehmigung von IOP Publishing.*

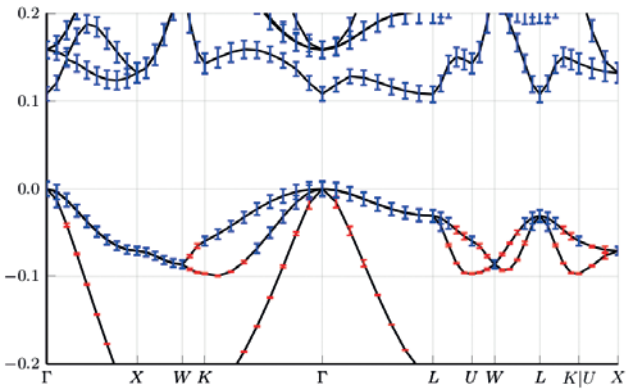



*Abb. 4: Garantierter Fehler für die Bandstruktur von Silizium modelliert in einem zur DFT verwandten Kohn-Sham-Modell. Der angegebene Fehlerbalken entspricht dem geschätzten numerischen Fehler inklusive Fließkommafehler und Diskretisierungsfehler. Nachdruck aus Referenz [8] mit freundlicher Genehmigung der Royal Society of Chemistry.*

Mittels DFTK konnten unlängst eine Reihe von Fortschritten bezüglich der Zuverlässigkeit von DFT-Simulationen erzielt werden. Zwei wollen wir kurz skizzieren. Zum einen wurde in einer kürzlich erschienenen Arbeit ein Verfahren vorgeschlagen, um den Dämpfungsparameter $\alpha$ im SCF Verfahren (3) automatisiert zu bestimmen[3]. Dazu wird das DFT-Problem als Minimierungsproblem aufgefasst und $\alpha$ adaptiv über eine rückverfolgende Liniensuche (backtracking line search) gewählt. Die Konstruktion des Verfahren verhindert es, teure Größen im Falle eines erfolgreichen SCF-Schrittes neu berechnen zu müssen. Insgesamt erhöht dies die Stabilität des SCF für schwierige Probleme, verteuert aber die Simulation einfacher Probleme kaum. Zum zweiten konnte ein adaptives Vorkonditionierungsverfahren entwickelt werden, welches $P$ basierend auf der lokalen Zustandsdichte (local density of states, LDOS) approximiert[4]. Da die LDOS als physikalische Größe Aufschluss über grundlegende Materialeigenschaften (z.B. Metall versus Nichtmetall) gibt, bleibt der dadurch erhaltene Vorkonditionierer parameterfrei und kann sich dennoch auf die Physik des simulierten Systems anpassen. Insbesondere für inhomogene Systeme, in welchen Metalle (wie Aluminium) und Nichtmetalle (wie Silika) gemeinsam betrachtet werden müssen, erlaubt dieses Verfahren eine deutlich schnellere Konvergenz als bestehende Alternativen, siehe Abb. 3.

Im Hinblick auf Eigenprobleme, wie den Kohn-Sham-Eigenproblemen der Dichtefunktionaltheorie (1) steckt die Fehleranalyse noch in den Kinderschuhen. Motiviert durch die Anwendung in der Elektronenstrukturtheorie wurden in den letzten Jahren allerdings in einer Reihe von Arbeiten die nötigen theoretischen Grundlagen geschaffen. Zu nennen sind die Methoden für *a posteriori* Fehlerschätzer für Eigenvektoren und Eigenwerte, welche auch Eigenwertcluster behandeln[5], sowie störungstheoretische Ansätze zur Kontrolle des Diskretisierungsfehlers[6]. Letztere wurden auch im Kontext nicht-linearer Eigenwertprobleme wie der zur DFT verwandten Gross-Pitaevskii Gleichung[7] angewandt. Mittels DFTK konnten unlängst einige dieser Ansätze so erweitert werden, sodass für die Praxis geeignete *a posterori* Fehlerschätzer entwickelt werden können. Beispielsweise ist es nun bei der Simulation eines Siliziumkristalles möglich die Bandstruktur, eine wichtige Größe in der Festkörperphysik, mit Fehlerbalken zu versehen[8], siehe Abb. 4. Diese sind durch einen garantierten Fehlerschätzer bestimmt, welcher neben dem Diskretisierungsfehler auch andere numerische Fehler wie die Fehler durch beschränkte Fließkommagenauigkeit enthält.

## Implizite Lösungsmittelmodelle

Im zweiten Beispiel betrachten wir die Simulation von Lösungsmitteleffekten durch ein implizites, makroskopisches Kontinuumsmodell. Bei einer Vielzahl von Anwendungen sind die simulierten Moleküle weder in Gasphase noch in Vakuum, sondern gelöst in einem Lösungsmittel. Natürlich könnte man alle Lösungsmittelmoleküle ebenfalls quantenmechanisch beschreiben. Allerdings erhöht dies die Anzahl an Freiheitsgraden beträchtlich, obwohl in den meisten Fällen eine atomistische Beschreibung des Lösungsmittels nicht erforderlich ist. Ein gute Alternative sind implizite Kontinuumsmodelle, welche den Effekt des Lösungsmittels auf das gelöste Molekül in erster Linie durch die Polarisation zwischen den beiden Komponenten beschreiben.

Ein Kontinuumsmodell ist ein elliptisches Grenzflächenproblem wie schematisch in Abb. 5 dargestellt. Dabei bezeichnet $\boldsymbol{\rho}_{\text{el}}$ und $\boldsymbol{q}_{\text{i}}\boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{r}_{\text{i}}}$ die elektronische Ladungsdichte der Elektronen bzw. der Atomkerne, $\Omega$ den Lösungshohlraum und $\varepsilon$ die makroskopische dielektrische Konstante des Lösungsmittels, z.B. $\varepsilon \approx 80$ für Wasser bei Raumtemperatur.

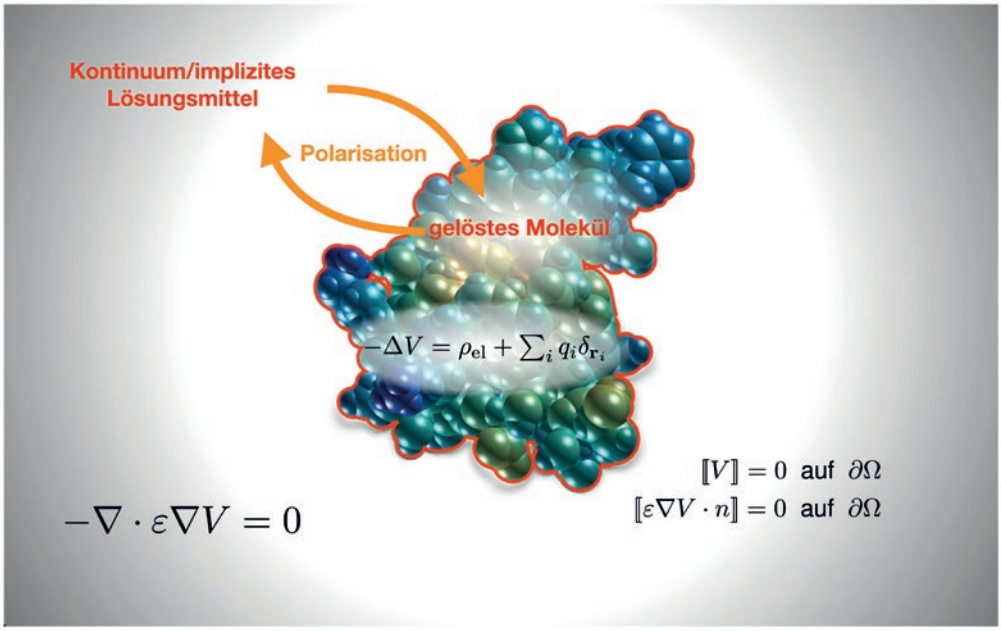



*Abb. 5: Illustration der Kopplung eines Moleküls mit einem impliziten Lösungsmittel mittels einer allgemeinen Poisson-Gleichung in Form eines Grenzflächenproblems.*

Das elektrostatische Potenzial $V$ wird erzeugt durch die Ladung $\boldsymbol{\rho}_{\mathrm{el}} + \sum_i \boldsymbol{q}_i \boldsymbol{\delta}_{r_i}$ des gelösten Moleküls. Ebenfalls fließt $V$ in den Hamilton-Operator des gelösten Moleküls ein, z.B. als Teil des Potenzials $V[\rho_\Phi]$ im Falle der DFT (1). Deshalb sind das quantenmechanische Modell zur Beschreibung des gelösten Moleküls und das Kontinuumsmodell nichtlinear gekoppelt. Eine Folge davon ist, dass das Kontinuumsmodell sehr oft (in jedem SCF-Schritt) gelöst werden muss. Während die Theorie für solche Grenzflächenprobleme bekannt ist, ist das effiziente Lösen für eine große Anzahl an Atomen, idealerweise in linearer Skalierung die Herausforderung.

Standardmethoden benutzen oft Integralgleichungen und dessen Diskretisierung in Form von Randelementmethoden, wobei bereits die Gittergenerierung an der Molekülоberfläche extrem teuer ist. Ein relativ neuer Ansatz [9-11] verbindet für eine Vielzahl von Kontinuumsmodellen Gebietszerlegungsverfahren mit Integralgleichungen indem der Lösungsmittelhohlraum $\Omega$ als eine Vereinigung von Kugeln dargestellt wird (eine Kugel pro Atom). Auf jeder Kugel kann nun das Problem mittels Kugelflächenfunktionen und Radialfunktionen diskretisiert werden, wodurch ein numerisches Verfahren ohne numerische Gitter möglich wird. Das Gebietszerlegungsverfahren erlaubt eine effiziente, d.h. linear skalierende, Diskretisierungen des nicht-lokalen Dirichlet-zu-Neumann-Operators[12], welche dann mit Integral-Operatoren verknüpft werden kann um die verschiedenen impliziten Modelle anhand von Integralgleichungen zu berechnen.

Nachdem gängige Kontinuumsmethoden nun auch gemäß dieses Diskretisierungsansatzes aufgestellt wurden, richten sich aktuelle Bestrebungen darauf diese in einer gebündelten Bibliothek “ddX” einheitlich und effizient zu implementieren und ddX mit bestehenden Programmpaketen der rechengestützten Chemie zu koppeln. Des weiteren steckt die mathematische Analyse der Konvergenz dieser Methoden bezüglich der Diskretisierungsparameter und Iterationen noch in den Kinderschuhen und wird aktuell verfolgt.

## Schlussbemerkung

Anhand dieser zwei Beispiele haben wir eine Reihe interessanter interdisziplinärer Fragestellungen im Themengebiet der atomistischen Simulationen illustriert, welche es gilt mathematisch zu beleuchten. Unsere kleine Auswahl ist hier bei weitem nicht repräsentativ und lässt eine Reihe von relevanten Verbindungen zu anderen mathematischen Disziplinen außen vor. Nichtsdestoweniger stellt sich die Frage warum nicht mehr Mathematiker:innen in diesem Anwendungsfeld arbeiten. Dieser Gedanke war auch eine der Motivationen im Jahr 2017 den GAMM-Fachausschuss “Modellierung, Analysis und Simulation molekularer Systeme” zu gründen.

Unsere Erfahrung ist, dass die Mathematik im Bereich atomistischer Simulationen durchaus etwas verändern kann. Wie unsere Beispiele zeigen gestaltet sich die Zusammenarbeit nicht als einseitiger Transfer von Wissen von der Mathematik in die Anwendung, sondern es ergeben sich ebenfalls eine Vielzahl mathematischer Forschungsfragen (und Antworten) motiviert aus der Anwendung oder empirischen Beobachtungen bei Simulationen.

## Literatur


[1] J. K. Williams, B. Wang, A. Sam, C. L. Hoop, D. A. Case, J. Baum. Molecular dynamics analysis of a flexible loop at the binding interface of the SARS-CoV-2 spike protein receptor-binding domain Proteins (2021) DOI 10.1002/prot.26208 ρ

[2] M. F. Herbst, A. Levitt, E. Cancès. JuliaCon Proceedings, 3, 69 (2021). DOI 10.21105/jcon.00069

[3] M. F. Herbst and A. Levitt. A robust and efficient line search for self-consistent field iterations. (submitted). arXiv:2109.14018

[4] M. F. Herbst and A. Levitt. Journal of Physics: Condensed Matter, 33, 085503 (2021). DOI 10.1088/1361-648X/abcbdb

[5] E. Cancès, G. Dusson, Y. Maday, B. Stamm, M. Vohralík. Mathematics of Computation, 89, 2563 (2020). DOI 10.1090/mcom/3549

[6] E. Cancès, G. Dusson, Y. Maday, B. Stamm, M. Vohralík. Journal of Computational Physics, 307, 446 (2016). DOI 10.1016/j.jcp.2015.12.012

[7] G. Dusson and Y. Maday. IMA Journal of Numerical Analysis, 37, 94 (2017). DOI 10.1093/imanum/drw001

[8] M. F. Herbst, A. Levitt, E. Cancès. Faraday Discussions, 224, 227 (2020). DOI 10.1039/D0FD00048E

[9] E. Cancès, Y. Maday, and B. Stamm, Domain decomposition for implicit solvation models DOI 10.1063/1.4816767

[10] B. Stamm, E. Cancès, F. Lipparini,Y. Maday, A new discretization for the Polarizable Continuum Model within the domain decomposition paradigm, J. Chem. Physics, Vol. 144, 054101 (2016) DOI 10.1063/1.4940136

[11] Ch. Quan, B. Stamm, Y. Maday, A Domain Decomposition Method for the Poisson-Boltzmann Solvation Models, SIAM J. Sci. Comput., Vol. 41, No. 2, pp. B320-B350 (2019). DOI 10.1137/18M119553X

[12] A. Reusken, B. Stamm, Analysis of the Schwarz domain decomposition method for the conductor-like screening continuum model. SIAM J. Numer. Anal., Vol. 59, No. 2, pp. 769–796 (2021). DOI 10.1137/20M1342872

**Dr. rer. nat. Michael F. Herbst** ist seit März 2021 Postdoc in der Gruppe von Professor Stamm. Nach einem Studium der Natural Sciences an Universität Cambridge promovierte er an der Universität Heidelberg in theoretischer Chemie. 2019 wechselte er im Rahmen eines Postdoc an der École des Ponts ParisTech bei Eric Cancès in die angewandte Mathematik. Seine Forschungsinteressen bewegen sich breit und interdisziplinär im Bereich der atomistischen Simulationen. Er kombiniert dabei mathematische und physikalische Ansätze gleichermaßen, um bestehende Methoden zuverlässiger und effizienter zu gestalten, sowie deren Fehler robust zu kontrollieren.

**Prof. Dr. rer. nat. Benjamin Stamm** ist seit 2016 Professor für angewandte und computergestützte Mathematik an der RWTH Aachen University. Benjamin Stamm studierte und promovierte an der École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) von 2000-2008. Danach war er Post-doc an der Brown University (2008-2010) bevor er von 2010-2012 eine Position als Charles B. Morrey Visiting Professor an der UC Berkeley inne hatte. Darauf folgte eine Stelle als Maître de Conférences an der Sorbonne Université (damals Université Pierre et Marie Curie). 2017 hat er mit zwei Kollegen den GAMM-Fachausschuss “Modellierung, Analysis und Simulation molekularer Systeme”, welchem er auch vorsteht, ins Leben gerufen. Seine Forschungsschwerpunkte sind die Diskretisierung von Partiellen Differentialgleichungen und im Speziellen Eigenwertprobleme, Simulationsverfahren auf der atomistischen Skala und Modellreduktion.struktion von Lösungsverfahren.

# GENERIC ALS GRUNDLAGE NUMERISCHER METHODEN FÜR GEKOPPELTE PROBLEME DER FESTKÖRPERDYNAMIK

VON VANESSA VALDES Y BECK, PETER BETSCH UND MARK SCHIEBL

## Einleitung

In dieser Abhandlung soll dargelegt werden, dass der GENERIC Formalismus einen attraktiven Ausgangspunkt für die Entwicklung numerischer Diskretisierungsverfahren darstellt. Hierbei soll das Hauptaugenmerk auf thermomechanisch gekoppelte Probleme der Festkörpermechanik gelegt werden. Ursprünglich wurde der GENERIC Formalismus im Rahmen komplexer Fluide entwickelt. Dabei steht das Akronym GENERIC für "General Equation for the Non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling". Eine sehr gute Abhandlung der Entwicklungen bis Mitte der 2000er Jahre ist in der Monographie von Öttinger [13] zu finden.

Im Spezialfall reversibler, isothermer Systeme reduziert sich GENERIC auf die Hamiltonsche Beschreibung dynamischer Systeme. Dies ist vorteilhaft im Hinblick auf numerische Verfahren, die in den letzten Dekaden im Rahmen Hamiltonscher Systeme mit Symmetrie entwickelt wurden. In diese Kategorie fallen insbesondere Probleme der nichtlinearen Struktur- und Elastodynamik, einschließlich der Dynamik flexibler Mehrkörpersysteme. In diesem Bereich werden vorrangig Finite Elemente für die räumliche Diskretisierung eingesetzt. Unter der Voraussetzung, dass die Dynamik des semidiskreten Modells wiederum in den Rahmen Hamiltonscher Systeme passt, bieten sich strukturerhaltende Verfahren für die zeitliche Diskretisierung an. Bei der Strukturerhaltung stehen hierbei insbesondere die gesamte mechanische Energie sowie der Drehimpuls im Vordergrund. Symplektische Verfahren erfüllen in aller Regel die Drehimpulserhaltung, sind jedoch nicht energieerhaltend. Dies steht im Gegensatz zu *Energy-Momentum* (EM) Verfahren, die in der Lage sind, sowohl Drehimpuls als auch Energie zu erhalten. Die Erfahrung zeigt, dass EM Verfahren besondere Vorzüge bezüglich numerischer Stabilität und Robustheit bieten.

## Ein Modellproblem

Wesentliche Entwicklungen strukturerhaltender Zeitintegrationsverfahren im Bereich der Strukturdynamik hatten das Modellproblem eines elastischen Federpendels als Ausgangspunkt. Das elastische Federpendel wurde unter Verwendung eines nichtlinearen Stabelements bereits in [1, Sec. 9.5] betrachtet und wird daher auch als Bathe-Pendel bezeichnet [7]. Trotz seiner Einfachheit besitzt das elastische Federpendel wesentliche Strukturmerkmale weitaus komplizierterer semidiskreter elastischer Systeme. Insbesondere gilt dies im Hinblick auf die wesentliche Quelle der Nichtlinearität, die für kontinuumsbasierte semidiskrete Strukturmodelle charakteristisch ist: Nichtlineare Verzerrungsmaße, die eine objektive Beschreibung der Bewegung ermöglichen, die durchaus große Starrkörperanteile enthalten kann.

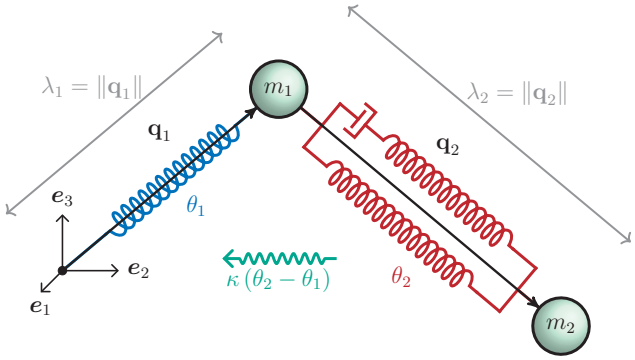



*Abb. 1: Das Modellproblem des thermoviskoelastischen Doppelpendels.*

Im weiteren soll eine Erweiterung des elastischen Federpendels betrachtet werden, die wesentliche Strukturmerkmale thermomechanisch gekoppelter dissipativer Systeme besitzt: Das in Abb. 1 dargestellte thermoviskoelastische Doppelpendel. Ursprünglich wurde ein derartiges Modellproblem in [14] eingeführt. Die Grundzüge der Beschreibung mittels GENERIC sollen nun im Rahmen des Modellproblems dargelegt werden. Für detailliertere Abhandlungen sei auf [5, 6, 11] und insbesondere [16, 17] verwiesen. Die räumliche Beschreibung des Doppelpendels beruht auf Koordinaten $\mathbf{q}_\alpha \in \mathbb{R}^3$, $(\alpha = 1, 2)$, die die Lage der Massenpunkte $m_\alpha$ charakterisieren. Hierbei erfasst $\mathbf{q}_2$ die Lage von $m_2$ relativ zu $m_1$, was auf die Massenmatrix

$$\mathbf{m} = \begin{bmatrix} (m_1 + m_2)\mathbf{I} & m_2\mathbf{I} \\ m_2\mathbf{I} & m_2\mathbf{I} \end{bmatrix} \tag{1}$$

führt, wobei $\mathbf{I}$ für die Einheitsmatrix steht. Fasst man die Koordinaten im Vektor $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)$ zusammen, so lassen sich die konjugierten Impulse $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$ als $\mathbf{p} = \mathbf{m}\dot{\mathbf{q}}$ schreiben, wobei der hochgestellte Punkt für die Zeitableitung steht. Der gesamte Drehimpuls des Systems relativ zum Koordinatenursprung ist durch

$$\mathbf{J} = \sum_{\alpha=1}^{2} \mathbf{q}_\alpha \times \mathbf{p}_\alpha \tag{2}$$

gegeben. Die Streckung der beiden Thermoelemente wird durch $\lambda_\alpha = \sqrt{\mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{q}_\alpha}$ erfasst. Hierbei verbindet eine thermoelastische Feder den Ursprung des Intertialsystems mit $m_1$. Es wird davon ausgegangen, dass sich das thermoelastische Verhalten durch eine freie Energiefunktion $\psi_1(\lambda_1, \theta_1)$ beschreiben lässt, wobei $\theta_1$ die Temperatur kennzeichnet. Dabei wird auch der Gough-Joule-Effekt berücksichtigt. Das zweite Thermoelement verbindet $m_1$ mit $m_2$ und soll als generalisiertes Thermo-Maxwell Element ausgeführt werden, dessen inelastische Verzerrungen durch eine interne Variable $\gamma$ beschrieben werden. Die zugehörige freie Energiefunktion sei durch $\psi_2(\lambda_2, \theta_2, \gamma)$ gegeben, wobei $\theta_2$ wiederum die Temperatur kennzeichnet. Zwischen den beiden Thermoelementen findet Wärmeübertragung statt, die in Anlehnung an das Fourier-Gesetz proportional zur Temperaturdifferenz der beiden Thermoelemente angenommen wird.

Die Transformationseigenschaften von GENERIC bieten den Vorteil einer freien Wahl der thermodynamischen Zustandsgröße, dies wurde in [12] gezeigt. Dementsprechend stehen jeweils die Temperatur $\theta_\alpha$, die innere Energie $u_\alpha$ sowie die Entropie $s_\alpha$ als thermodynamische Zustandsgrößen zur Auswahl, d.h. $\tau_\alpha \in \{\theta_\alpha, u_\alpha, s_\alpha\}$. Ausgehend von den beiden freien Energiefunktionen können nun zugehörige Funktionen für die innere Energie, $U_1(\lambda_1, \tau_1)$ sowie $U_2(\lambda_2, \tau_2, \gamma)$, und die Entropie, $S_1(\lambda_1, \tau_1)$ sowie $S_2(\lambda_2, \tau_2, \gamma)$, ermittelt werden. Es lässt sich zeigen (vgl. [12, 13]), dass sich die Temperaturen der beiden Thermoelemente über

$$\Theta_\alpha = \frac{\partial_{\tau_\alpha} U_\alpha}{\partial_{\tau_\alpha} S_\alpha} \tag{3}$$

darstellen lassen. Die Zustandsgrößen des betrachteten Doppelpendels können im Zustandsvektor

$$\mathbf{z} = (\mathbf{q}, \mathbf{p}, \tau, \gamma) \tag{4}$$

zusammengefasst werden, wobei $\tau = (\tau_1, \tau_2)$ gesetzt wurde. Die zeitliche Änderung des Systemzustandes lässt sich nun im Rahmen von GENERIC gemäß

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{L}(\mathbf{z}) \nabla E(\mathbf{z}) + \mathbf{M}(\mathbf{z}) \nabla S(\mathbf{z}) \tag{5}$$

beschreiben. Hierbei werden reversible Vorgänge über den Gradienten der gesamten Energie $E$ in Verbindung mit der schiefsymmetrischen Poissonmatrix $\mathbf{L}$ generiert. Demgegenüber werden irreversible Prozesse über den Gradienten der gesamten Entropie $S$ in Verbindung mit der symmetrischen, positiv-semidefiniten Dissipationsmatrix $\mathbf{M}$ generiert. Die thermodynamische Zulässigkeit des GENERIC Formalismus basiert auf der Einforderung der Degenerationsbedingungen

$$\begin{aligned} \mathbf{L} \nabla S &= \mathbf{0} \\ \mathbf{M} \nabla E &= \mathbf{0} \ . \end{aligned} \tag{6}$$

Damit lässt sich leicht zeigen, dass GENERIC sowohl Energieerhaltung ($\dot{E} = 0$) als auch eine nicht abnehmende Entropie ($\dot{S} \geq 0$) gewährleistet. Unter der Voraussetzung eines geschlossenen Systems gibt GENERIC somit den ersten und zweiten Hauptsatz der Thermodynamik korrekt wieder.

Das Modellproblem stellt ein geschlossenes System dar, wenn keine äußeren Kräfte auf $m_1$ und $m_2$ einwirken und thermische Interaktion mit der Umgebung ausgeschlossen wird. Für die gesamte Entropie ergibt sich

$$S(\mathbf{z}) = S_1(\lambda_1, \tau_1) + S_2(\lambda_2, \tau_2, \gamma) \ . \tag{7}$$

Entsprechend gilt für die gesamte innere Energie $U(\mathbf{z}) = U_1(\lambda_1, \tau_1) + U_2(\lambda_2, \tau_2, \gamma)$, sodass sich die gesamte Energie als

$$E(\mathbf{z}) = \frac{1}{2} \mathbf{p} \cdot \mathbf{m}^{-1} \mathbf{p} + U(\mathbf{z}) \tag{8}$$

schreiben lässt. Wird, wie im numerischen Beispiel (s. unten), Gravitation berücksichtigt, so kann das zugehörige Potential zur Energie (8) hinzugefügt werden.

Die Wahl der thermodynamischen Variable $\tau_\alpha \in \{\theta_\alpha, u_\alpha, s_\alpha\}$ hat unter anderem Auswirkung auf die Besetzung der Strukturmatrizen $\mathbf{L}$ und $\mathbf{M}$ in GENERIC (5). Dies ist in Abb. 2 illustriert. Beispielsweise liefert die Wahl der Entropie ($\tau_\alpha = s_\alpha$) keine weiteren Beiträge zur Poissonmatrix $\mathbf{L}$, bei der lediglich die von den kanonischen Hamilton-Gleichungen bekannten Einträge verbleiben. Demgegenüber liefert die Wahl der Temperatur ($\tau_\alpha = \theta_\alpha$) die maximale Besetzung.

## Zeitliche Diskretisierung

Im Kontext impliziter Zeitintegrationsverfahren ist es naheliegend, zunächst die Mittelpunktregel auf (5) anzuwenden, da sie in der Regel Drehimpulserhaltung ermöglicht und darüber hinaus bei linearen Systemen energieerhaltend ist. Bei gegebenen Anfangswerten $\mathbf{z}_0$ für den

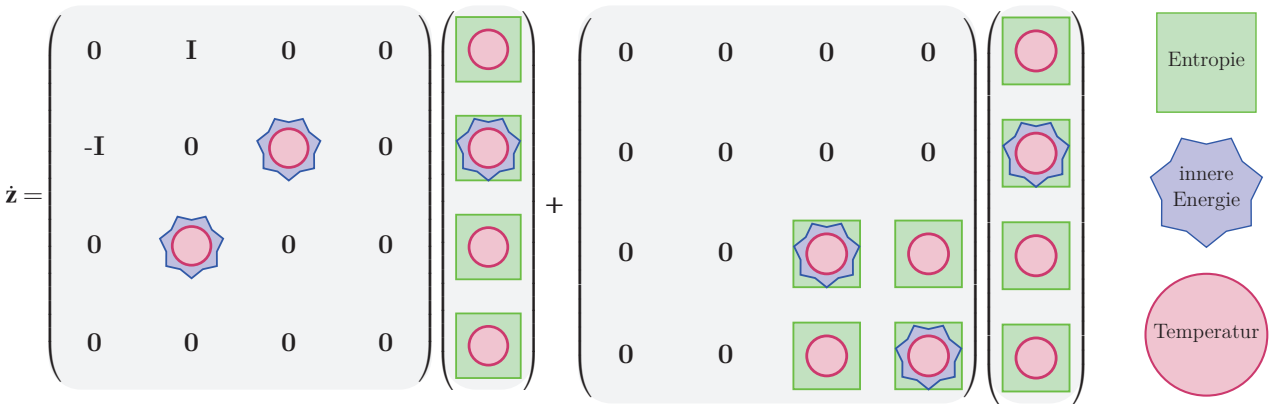



*Abb. 2: Struktur der Evolutionsgleichung (5) im Modellproblem, abhängig von der Wahl der thermodynamischen Variable* $\tau_\alpha \in \{\theta_\alpha, u_\alpha, s_\alpha\}$.

Zustandsvektor (4) zum Zeitpunkt $t = 0$ ergibt sich die Rekursionsformel

$$\frac{\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n}{h} = \mathbf{L}(\widehat{\mathbf{z}})\nabla E(\widehat{\mathbf{z}}) + \mathbf{M}(\widehat{\mathbf{z}})\nabla S(\widehat{\mathbf{z}}) \qquad (9)$$

zur Bestimmung von $\mathbf{z}_{n+1}$, $(n = 0, 1, \ldots, N)$, bei vorgegebener Zeitschrittweite $h = t_{n+1} - t_n$. Hierbei kennzeichnet $\mathbf{z}_n$ die Approximation von $\mathbf{z}(t_n)$ und $\widehat{\mathbf{z}} = (\mathbf{z}_n + \mathbf{z}_{n+1})/2$. Interessanterweise liefert die Mittelpunktregel in Abhängigkeit der Wahl von $\tau_\alpha \in \{\theta_\alpha, u_\alpha, s_\alpha\}$ bereits partiell strukturerhaltende Integratoren. Dies ist in Tab. 1 zusammengefasst.

| $\tau_\alpha$ | $\theta_\alpha$ | $u_\alpha$ | $s_\alpha$ |
|---|---|---|---|
| Energie | - | x | - |
| Drehimpuls | x | x | x |
| Entropie | - | - | x |
| Bezeichnung | $(\mathrm{M})_\theta$ | $(\mathrm{EM})_u$ | $(\mathrm{ME})_s$ |

Tab. 1: Konsistenzeigenschaften der Mittelpunktregel (9) im Hinblick auf Energie, Drehimpuls und Entropie, abhängig von der Wahl für $\tau_\alpha \in \{\theta_\alpha, u_\alpha, s_\alpha\}$ ϕ ρ

Wählt man beispielsweise die innere Energie ($\tau_\alpha = u_\alpha$), so ist der Integrator in der Lage sowohl den Drehimpuls als auch die Energie zu erhalten (im Sinne von $E_{n+1} = E_n$). Ein derartiger EM ("Energy-Momentum") Integrator würde im Falle eines Hamiltonschen Systems die numerische Stabilität gewährleisten. Dies gilt jedoch nicht mehr für thermomechanisch gekoppelte, dissipative Systeme wie das Modellproblem. Anstelle der Gesamtenergie hat sich hier

$$V(\mathbf{z}) = E(\mathbf{z}) - \theta_R S(\mathbf{z}) \qquad (10)$$

als sehr guter Indikator zur Beurteilung der numerischen Stabilität erwiesen. Dabei steht $\theta_R$ für eine konstante Referenztemperatur. Es kann leicht gezeigt werden, dass bei den betrachteten geschlossen Systemen $V$ eine Lyapunov-Funktion darstellt.
Ein Integrator, der in der Lage ist den ersten und zweiten Hauptsatz für beliebige Schrittweiten korrekt abzubilden, erfüllt das Stabilitätskriterium $V_{n+1} \leq V_n$ und ist thermodynamisch konsistent. Ist er zusätzlich in der Lage, den Drehimpuls zu erhalten, so bezeichnen wir ihn als EME ("Energy-Momentum-Entropy") Integrator. Ersetzt man in der Mittelpunktregel die Ableitungen durch diskrete Ableitungen im Sinne von [8], so erhält man EME Integratoren für jedwede Wahl der thermodynamischen Variable $\tau_\alpha \in \{\theta_\alpha, u_\alpha, s_\alpha\}$. Die entsprechenden Integratoren werden hier mit $(\mathrm{EME})_\theta$, $(\mathrm{EME})_u$ und $(\mathrm{EME})_s$ bezeichnet. Repräsentative Simulationsergebnisse sind in den Abb. 4 und 5 dargestellt. Hierbei wurde eine einheitliche Zeitschrittweite $h = 0.15$ verwendet. Der zugehörige Bewegungsablauf ist aus Abb. 3 ersichtlich.

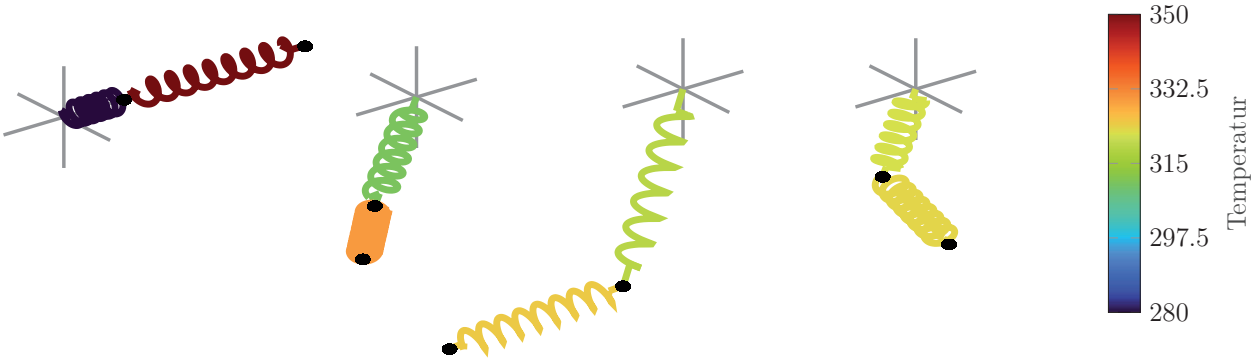



*Abb. 3: Schnappschüsse der Bewegung des Doppelpendels (von links nach rechts) zu den Zeitpunkten $t_n \in \{0,8,16,24\}$. Die Farbkodierung gibt die Temperatur der Thermoelemente wieder.*

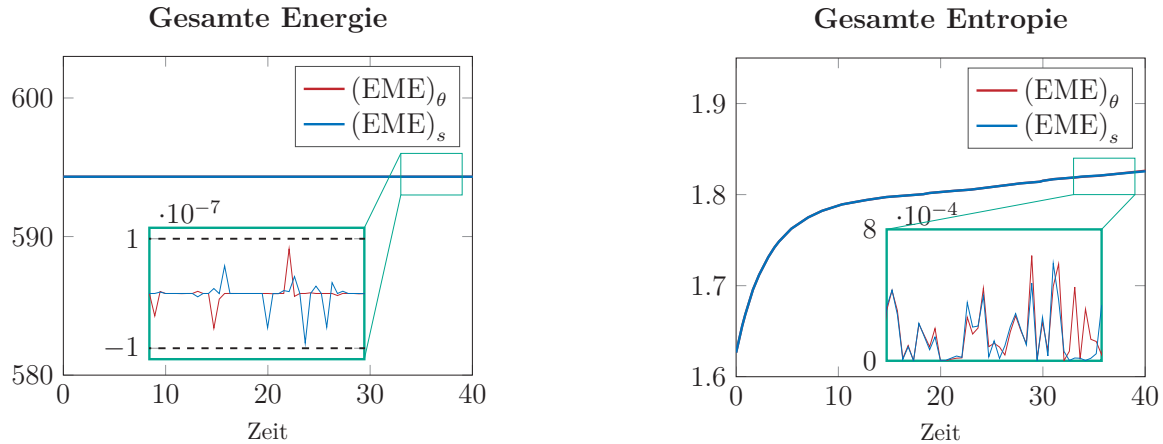



*Abb. 4: Numerische Ergebnisse, die die thermodynamische Konsistenz der EME Integratoren zeigen: Energieerhaltung (bis auf numerische Abweichungen, die unterhalb der vorgegebenen Toleranz des Newton-Verfahrens liegen) sowie Zunahme der Entropie ($S_{n+1} \geq S_n$) infolge Wärmeleitung und inelastischen Deformationen.*

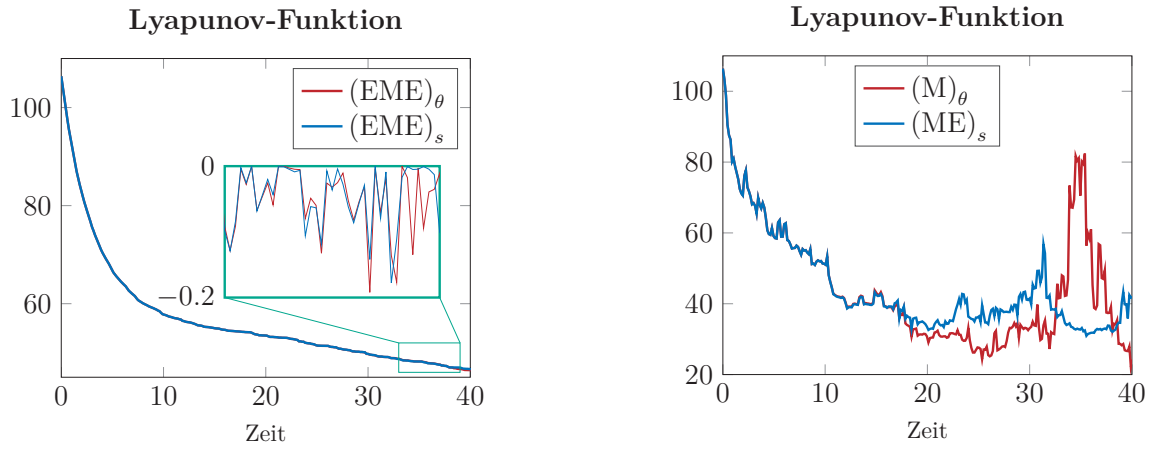



*Abb. 5: Während die EME Verfahren (links) eine Abnahme der Lyapunov-Funktion (10) gewährleisten ($V_{n+1} \leq V_n$), ist dies bei der Mittelpunktregel (9) (rechts) nicht der Fall.*

## Kontinuierliche Systeme

Die in der Festkörpermechanik gebräuchliche Lagrangesche Beschreibung der Kontinuumsmechanik bildet die Grundlage der in [9, 10, 12] behandelten GENERIC-Beschreibung thermomechanisch gekoppelter Probleme. In der Klammerdarstellung lautet GENERIC

$$\dot{A} = \{A, E\} + [A, S] \ . \tag{11}$$

Die zeitliche Evolution des Funktionals $A$ ergibt sich analog zur diskreten Form (5) aus der additiven Zerlegung in reversible und irreversible Beiträge. Im Spezialfall diskreter Systeme liefert (11) wiederum (5), wobei sich dann für die Poisson-Klammer $\{A(\mathbf{z}), E(\mathbf{z})\} = \nabla A(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{L}(\mathbf{z}) \nabla E(\mathbf{z})$ und die dissipative Klammer $[A(\mathbf{z}), S(\mathbf{z})] = \nabla A(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{z}) \nabla S(\mathbf{z})$ ergibt.

Im Hinblick auf die zeitliche Diskretisierung lassen sich wesentliche Zusammenhänge, die zuvor im Rahmen des Modellproblems skizziert wurden, auf das verwandte Kontinuumsproblem übertragen. Allerdings muss hier nun beachtet werden, dass die räumliche Diskretisierung nicht zu einer Zerstörung der GENERIC-Struktur führt. In diesem Zusammenhang wurde in [3] der Begriff der "GENERIC-konsistenten räumlichen Diskretisierung" geprägt. Für weitere Details zur GENERIC-basierten Diskretisierung in Raum und Zeit sei an dieser Stelle auf [3, 4, 15] verwiesen. In Abb. 6 ist das numerische Beispiel einer rotierenden thermoelastischen Scheibe dargestellt, das [3] entnommen wurde.

## Erweiterungen

Auch wenn sich die Grundform von GENERIC, (5) bzw. (11), zunächst auf geschlossene Systeme bezieht, so kann die Interaktion mit der Umgebung über das Randgebiet problemlos ergänzt werden. Die Überführung der lokalen Feldgleichungen, die (11) entspringen, in die schwache Form liefert Randintegrale, die diesem Zweck dienen. Im diskreten Modellproblem kann die Interaktion mit der Umgebung über einen Zusatzterm erfasst werden, so dass sich

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{L}(\mathbf{z}) \nabla E(\mathbf{z}) + \mathbf{M}(\mathbf{z}) \nabla S(\mathbf{z}) + \mathbf{B}(\mathbf{z}) \mathbf{u} \tag{12}$$

als Erweiterung von (5) ergibt. Die Eingangsgrößen $\mathbf{u}$ können nun äußere Kräfte auf $m_1$ und $m_2$ sowie den Wärmestrom von den Thermoelementen in die Umgebung enthalten.

Die Darstellung (12) erlaubt auch die Erfassung von Zwangsbedingungen. Dies soll im Rahmen des Modellproblems illustriert werden. Behindert man die Streckung des ersten Thermoelements, entspricht dies der Hinzunahme einer holonomen Bindung $g_1(\mathbf{q}_1) = 0$ mit $g_1 = \frac{1}{2}(\lambda_1^2 - \bar{l}_1^2)$, wobei $\bar{l}_1$ dem vorgegebenen Abstand

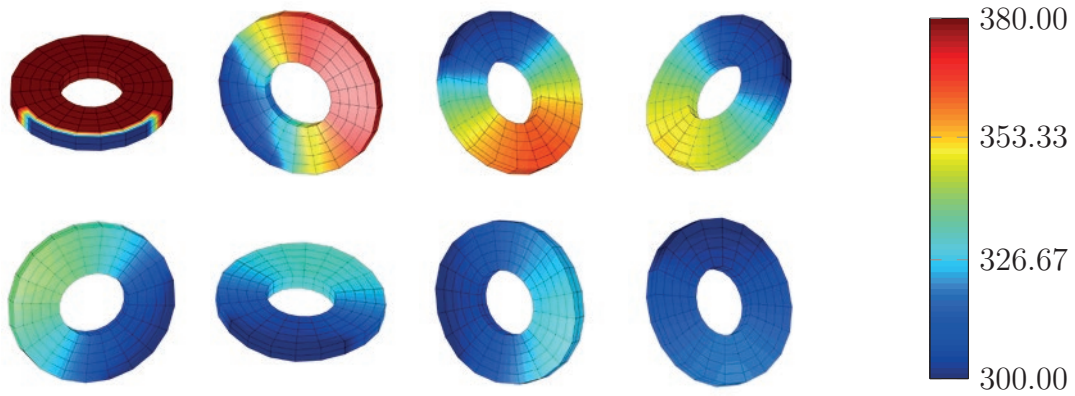



*Abb. 6: Bewegungsablauf einer drehenden Scheibe, deren Temperaturverteilung sich nach einer anfänglichen Abkühlung (Wärmefluss über einen Teil des Randes, siehe Konfiguration links oben) im weiteren Verlauf infolge Wärmeleitung und thermomechanischer Kopplung verändert (thermisch isoliertes System).*
*Für die Simulation wurde ein $(EME)_\theta$ Verfahren verwendet, siehe [3] für weitere Details.*

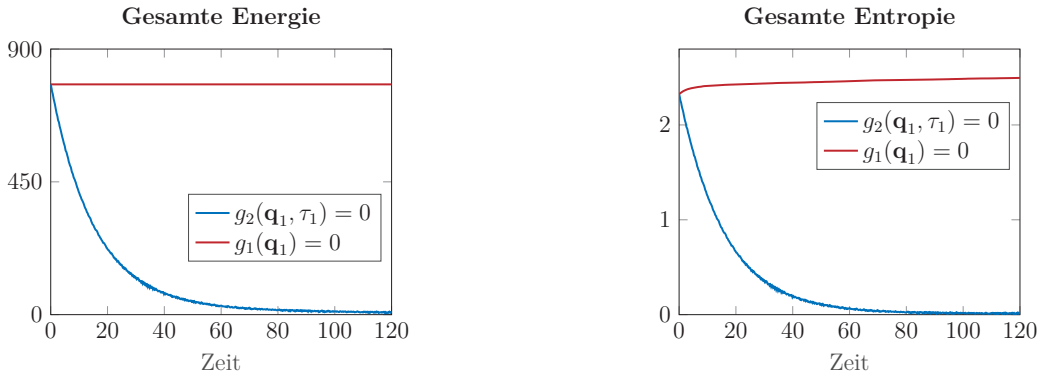



*Abb. 7: Numerische Ergebnisse des $(EME)_\theta$ Integrators bei Hinzunahme der Bindung $g_2(\mathbf{q}_1, \tau_1) = 0$, die eine Abnahme der Energie und Entropie infolge Wärmefluss über die Systemgrenze mit sich bringt. Hingegen führt die Hinzunahme der holonomen Bindung $g_1(q_1) = 0$ nach wie vor auf ein geschlossenes System.*

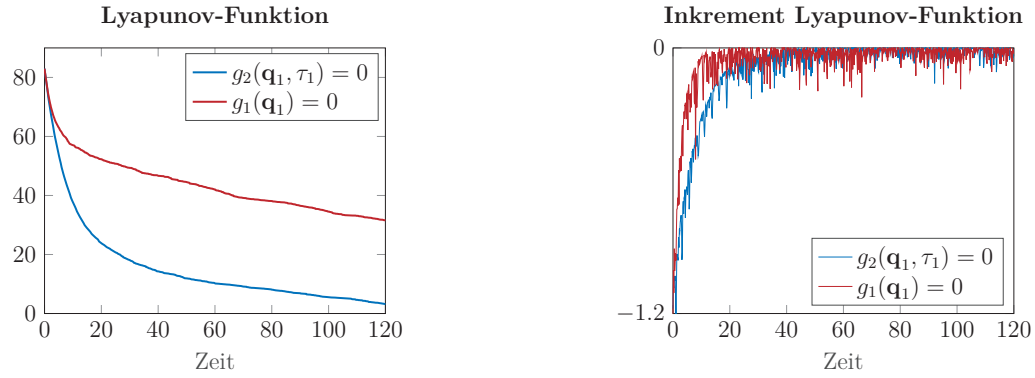



*Abb. 8: Auch bei Hinzunahme der betrachteten Zwangsbedingungen stellt (10) eine Lyapunov-Funktion dar, deren Abnahme durch den $(EME)_\theta$ Integrator weiterhin gewährleistet wird. Dementsprechend wird für das Inkrement stets $(V_{n+1} - V_n) \leq 0$ erfüllt (rechts).*

von $m_1$ zum Aufhängepunkt entspricht. Der zugehörige Eintrag im Vektor $\mathbf{u}$ liefert dann in Verbindung mit der Matrix $\mathbf{B}$ die Zwangskraft im ersten Pendel, die notwendig ist, um die Bindung zu realisieren. Als zweite Zwangsbedingung soll $g_2(\mathbf{q}_1, \tau_1) = 0$ betrachtet werden, mit $g_2 = \Theta_1 - \tilde{\theta}_1$, wobei sich $\Theta_1$ aus (3) ergibt. Damit wird die Temperatur $\tilde{\theta}_1$ des ersten Thermoelements vorgeschrieben. Der zugehörige Eintrag im Vektor $\mathbf{u}$ reguliert dann den Wärmefluss zwischen Thermoelement und Umgebung, der notwendig ist, um die Temperaturbedingung zu realisieren. Repräsentative numerische Ergebnisse sind in den Abb. 7 und 8 dargestellt.

Abschließend soll die gemischte Erweiterung GENERIC-basierter Formulierungen angesprochen werden. Beispielsweise können gemischte Hu-Washizu-artige Beschreibungen durch die Einführung von Verzerrungsgrößen mittels geeigneter Zwangsbedingungen gewonnen werden. Im Modellproblem können Verzerrungsvariablen mit Hilfe von Zwangsbedingungen $g_3(\varepsilon_\alpha, \mathbf{q}_\alpha) = 0$ hinzugefügt werden, die den Zusammenhang $\varepsilon_\alpha = \frac{1}{2}(\lambda_\alpha^2 - l_\alpha^2)/l_\alpha^2$ einfordern ($l_\alpha$ steht hier für die jeweilige Pendel-Länge in der verzerrungsfreien Referenzkonfiguration). Im Zuge der Einführung von $\varepsilon_\alpha$ sind die Funktionen der inneren Energie $U_\alpha$ sowie der Entropie $S_\alpha$ in Abhängigkeit von $\varepsilon_\alpha$ anstelle von $\lambda_\alpha$ zu formulieren. Im Fall von isothermen Problemen kann eine derartige Verfahrensweise beispielsweise [2] entnommen werden.

## Zusammenfassung und Ausblick

Für gekoppelte nicht-isotherme, dissipative Probleme der Festkörperdynamik bringen EME Verfahren einen merklichen Gewinn an numerischer Stabilität und Robustheit gegenüber Standard-Verfahren für die Diskretisierung in Raum und Zeit. Dabei bildet der GENERIC Formalismus einen ausgezeichneten Ausgangspunkt für die Entwicklung von EME Verfahren. Dies wurde hier im Hinblick auf die zeitliche Diskretisierung im Rahmen des betrachteten diskreten Modellproblems aufgezeigt.

Für kontinuierliche Probleme ist eine GENERIC-konsistente räumliche Diskretisierung im Sinne von [3] entscheidend für die Entwicklung von EME Verfahren. Im Kontext thermoelastisch gekoppelter Kontinua ist eine GENERIC-konsistente räumliche Diskretisierung bislang nur für Finite Elemente gelungen, die auf isoparametrischen Lagrange-Ansätzen für die Zustandsgrößen beruhen. Diese Elemente können als direkte Erweiterung verschiebungsbasierter Elemente für isotherme Probleme angesehen werden. Für gemischte Elemente, die beispielsweise für inkompressible Materialien von Bedeutung sind, steht eine GENERIC-konsistente räumliche Diskretisierung noch aus. Entsprechendes gilt für die Klasse der isogeometrischen Elemente.

Die im Beitrag skizzierte Einbeziehung von Nebenbedingungen einschließlich der Einführung zusätzlicher Verzerrungsvariablen in GENERIC für diskrete Systeme kann als erster Schritt in Richtung gemischter GENERIC-Formulierungen gesehen werden. Auch thermomechanisch gekoppelte Probleme der flexiblen Mehrkörperdynamik sollten somit einer GENERIC-basierten Formulierung und Diskretisierung zugänglich sein.

**Danksagung**

VVyB, PB und MS möchten sich für die Förderung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) – Projektnummer 388118188 bedanken.

**Literatur**

[1] K.-J. Bathe. Finite Element Procedures in Engineering Analysis. Prentice-Hall, 1982.

[2] P. Betsch und A. Janz. "An energy-momentum consistent method for transient simulations with mixed finite elements developed in the framework of geometrically exact shells". In: Int. J. Numer. Meth. Engng 108(5) (2016), S. 423–455. DOI: 10.1002/ nme.5217.

[3] P. Betsch und M. Schiebl. "Energy-Momentum-Entropy consistent numerical methods for large strain thermoelasticity relying on the GENERIC formalism." In: Int. J. Numer. Meth. Engng 119(12) (2019), S. 1216–1244.

[4] P. Betsch und M. Schiebl. "GENERIC-based formulation and discretization of initial boundary value problems for finite strain thermoelasticity." In: Comput Mech 65 (2020), S. 503–531.

[5] S. Conde Martín, P. Betsch und J. C. García Orden. "A temperature-based thermodynamically consistent integration scheme for discrete thermoelastodynamics." In: Commun Nonlinear Sci Numer Simulat 32 (2016), S. 63–80.

[6] S. Conde Martín und J. C. García Orden. "On Energy-Entropy-Momentum integration methods for discrete thermo-visco-elastodynamics." In: Computers & Structures 181 (2017), S. 3–20.

[7] M.A. Crisfield und J. Shi. "A Co-Rotational Element/Time-Integration Strategy for Non-Linear Dynamics". In: Int. J. Numer. Meth. Engng 37 (1994), S. 1897–1913.

[8] O. Gonzalez. "Time Integration and Discrete Hamiltonian Systems". In: J. Nonlinear Sci. 6 (1996), S. 449–467.

[9] M. Hütter und B. Svendsen. "On the Formulation of Continuum Thermodynamic Models for Solids as General Equations for Non-equilibrium Reversible-Irreversible Coupling." In: Journal of Elasticity 104 (2011), S. 357–368. DOI: 10.1007/s10659-0119327-4.

[10] M. Hütter und B. Svendsen. "Thermodynamic model formulation for visco-plastic solids as general equations for non-equilibrium reversible–irreversible coupling." In: Continuum Mech. Thermodyn. 24 (2012), S. 211–227. DOI: 10.1007/ s00161-011-0232-7.

[11] M. Krüger, M. Groß und P. Betsch. "A comparison of structure-preserving integrators for discrete thermoelastic systems." In: Comput Mech 47 (2011), S. 701–721.

[12] A. Mielke. "Formulation of thermoelastic dissipative material behavior using GENERIC." In: Continuum Mech. Thermodyn. 23 (2011), S. 233–256. DOI: 10.1007/s00161-010-0179-0.

[13] H. C. Öttinger. Beyond equilibrium thermodynamics. John Wiley & Sons Inc., 2005.

[14] I. Romero. "Thermodynamically consistent timestepping algorithms for non-linear thermomechanical systems." In: Int. J. Numer. Meth. Engng 79 (2009), S. 706–732.

[15] M. Schiebl und P. Betsch. "Structure-preserving space-time discretization of large-strain thermoviscoelasticity in the framework of GENERIC." In: Int. J. Numer. Meth. Engng 122(14) (2021), S. 3448– 3488. DOI: 10.1002/nme.6670.

[16] V. S. Valdes y Beck. "Thermodynamisch konsistente Integration gekoppelter thermoviskoelastischer diskreter Systeme". Masterarbeit. Institut für Mechanik, Karlsruher Institut für Technologie, Oktober 2020.

[17] V. S. Valdes y Beck, M. Schiebl und P. Betsch. "Structure-Preserving Discretization in the Framework of a Discrete Model Problem for LargeStrain Thermo-Viscoelasticity". In: Proceedings of the 14th World Congress on Computational Mechanics (WCCM) and ECCOMAS Congress. 2021. DOI: 10.23967/wccm-eccomas.2020.136.

**Vanessa Valdes y Beck** ist seit Februar 2021 Doktorandin in der Arbeitsgruppe von Professor Betsch am Institut für Mechanik des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT). Sie studierte von 2014-2017 im Bachelorstudiengang Bauingenieurwesen an der TU Dortmund, woraufhin ihr Masterstudium im Konstruktiven und Funktionalen Ingenieurbau am KIT folgte. Dort schloss sie 2020 ihr Studium mit ihrer Masterarbeit [16] am Institut für Mechanik bei Professor Betsch ab. Zu ihrem Forschungsbereich gehört die Entwicklung thermodynamisch konsistenter Diskretisierungsverfahren für thermomechanisch gekoppelte Probleme.

**Peter Betsch** ist seit 2013 Professor für Mechanik und Mitglied der kollegialen Leitung des Instituts für Mechanik am KIT. Er studierte von 1985-1991 Luft- und Raumfahrttechnik an der Universität Stuttgart. Danach war er wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik an der Universität Hannover. Nach der Promotion im Jahre 1996 folgte ein Post-Doc Aufenthalt an der University of California at Berkeley. Danach wechselte er 1998 an die TU Kaiserslautern, wo er als wissenschaftlicher Assistent am Lehrstuhl für Technische Mechanik beschäftigt war und sich 2002 habilitierte. Im Jahre 2003 folgte er einem Ruf auf die Professur für Numerische Mechanik an die Universität Siegen. Sein besonderes Forschungsinteresse gilt strukturerhaltenden Diskretisierungsverfahren, wobei insbesondere geometrisch exakte Strukturmodelle für große Deformationen, gemischte Finite Elemente sowie die (Optimal-)Steuerung flexibler Mehrkörpersysteme im Fokus stehen.

**Mark Schiebl** war von 2015-2021 wissenschaftlicher Mitarbeiter in der Arbeitsgruppe von Professor Betsch am Institut für Mechanik des KIT. Er studierte von 2009-2012 im Bachelorstudiengang Bauingenieurwesen am KIT, worauf das Masterstudium von 2012-2015 im Konstruktiven und Funktionalen Ingenieurbau am KIT folgte. Nach einem Forschungsaufenthalt am IMDEA Materials Institute in Madrid im Jahre 2019 schloss er 2021 seine Promotion im Bereich thermodynamisch konsistenter Diskretisierungsverfahren für thermomechanisch gekoppelte Probleme ab. Derzeit ist er als Ingenieur im Bereich Statik und Energieberatung tätig.

# Upcoming Conferences from Society for Industrial and Applied Mathematics

**All SIAM Conferences through July 2022 will be held in hybrid format, with options for participating in person or virtually, unless otherwise noted below.**

February 23–26, 2022

SIAM Conference on
## Parallel Processing for Scientific Computing
*Seattle, Washington, U.S. (hybrid)*

February 23–26, 2022

## SIAM International Meshing Roundtable Workshop 2022
*Seattle, Washington, U.S. (hybrid)*

March 14–18, 2022

SIAM Conference on
## Analysis of Partial Differential Equations
*Fully Virtual*

March 21–25, 2022

SIAM Conference on
## Imaging Science
*Fully Virtual*

April 12–15, 2022

SIAM Conference on
## Uncertainty Quantification
*Atlanta, Georgia, U.S. (hybrid)*

April 28–30, 2022

SIAM International Conference on
## Data Mining
*Alexandria, Virginia, U.S. (hybrid)*

June 13–16, 2022

SIAM Conference on
## Discrete Mathematics
*Pittsburgh, Pennsylvania, U.S. (hybrid)*

July 11–15, 2022

## SIAM Annual Meeting

SIAM Conference on
## Applied Mathematics Education (July 11–12)

SIAM Conference on the
## Life Sciences (July 11–14)

SIAM Conference on
## Mathematics of Planet Earth (July 13–15)
*Pittsburgh, Pennsylvania, U.S. (hybrid)*

August 30–September 2, 2022

SIAM Conference on
## Nonlinear Waves and Coherent Structures
*Bremen, Germany*

September 26–30, 2022

SIAM Conference on
## Mathematics of Data Science
*San Diego, California, U.S.*

Society for Industrial and Applied Mathematics

**For more information visit *siam.org/conferences***

All SIAM Conferences through July 2022 will be held in hybrid format, with options for participating in person or virtually, unless otherwise noted.
This information is current as of November 2021. Please check the SIAM website for most up-to-date information.

# Jun.-Prof. Dr.-Ing. Ulrich Römer

**studierte Elektrotechnik und Informationstechnik an der TU Darmstadt sowie allgemeines Ingenieurwesen in einem Doppeldiplomprogramm an der École Centrale de Lyon, Frankreich. Nach seinem Abschluss Ende 2009, war er als wissenschaftlicher Mitarbeiter an der TU Darmstadt tätig, an der er 2015 zum Thema Quantifizierung von Unsicherheiten in der Simulation von magnetischen Feldern promovierte und in der anschließenden Postdoc-Zeit zu numerischen Methoden der Unsicherheitsquantifizierung forschte. 2016 folgte ein Auslandsaufenthalt an der Virginia Tech, USA, bevor er 2017 an der TU Braunschweig eine Juniorprofessur zur Quantifizierung von Unsicherheiten in der Modellierung technischer Systeme erhielt. Seit 2020 ist er stellvertretender Sprecher des Zentrums Mechanics, Uncertainty and Simulation in Engineering – MUSEN. Von 2015-2018 war er Mitglied der GAMM Juniors.**

Fehlende Gewissheit bezüglich der Modellparameter und -form, sowie Variabilität in den Fertigungsbedingungen sind im Ingenieurwesen eine zunehmende Herausforderung. In der Modellierung und Simulation werden daher neue Lösungen zur Quantifizierung von Unsicherheiten gesucht, beispielsweise mit stochastischen Verfahren und deren Erweiterungen. Problematisch dabei ist allerdings der mitunter sehr hohe Rechenaufwand, der mit der Anzahl an unsicheren Parametern exponentiell steigt. So werden Unsicherheiten, beispielsweise in inhomogenen Materialparametern, durch hochdimensionale Zufallsfelder repräsentiert. Die daraus resultierenden Differentialgleichungen mit stochastischen Einflüssen erfordern spezielle Verfahren der hochdimensionalen Approximation. Durch die Beschreibung von Unsicherheiten in komplexen Modellen eröffnen sich viele neue Möglichkeiten für die Praxis, insbesondere die Verbesserung der Zuverlässigkeit, Auslegung, Entscheidungen unter Risiko und letztlich eine allgemeine Verbesserung von simulationsbasierten Vorhersagen.

STECKBRIEF

Mit der Quantifizierung von Unsicherheiten beschäftigt sich Ulrich Römer seit seiner Promotion, die im Rahmen des SFBs 634 „Kernstruktur, nukleare Astrophysik und fundamentale Experimente bei niedrigen Impulsüberträgen am supraleitenden Darmstädter Elektronenbeschleuniger (S-DALINAC)“ an der TU Darmstadt unter der Betreuung von Prof. Weiland und Prof. Schöps durchgeführt wurde. Ein Teilchenbeschleuniger arbeitet nahe an physikalischen Grenzen, so dass kleine Abweichungen, beispielsweise in Magnetfeldern, zu Problemen bei der Führung und Fokussierung von Teilchenstrahlen führen können. Ulrich Römer arbeitete hier an der stochastischen Modellierung von Magnetfeldern und ferromagnetischen Materialien, sowie der Quantifizierung von Unsicherheiten mit sparse grids und spektralen Verfahren. Ein besonderes Augenmerk wurde auf die Nichtlinearitäten der zugrundeliegenden magnetischen Gleichungen gelegt [1,2]. Die erforschten Methoden sind auch außerhalb der Beschleunigerphysik, beispielsweise für die Modellierung von elektrischen Maschinen von Interesse [3].

Nach der Promotion war Ulrich Römer als Postdoc am EU FP-7 Projekt nanoCOPS „Nanoelectronic COupled Problems Solutions“ beteiligt, das sich mit Modellen reduzierter Ordnung und Unsicherheiten in der Nanoelektronik beschäftigte. Hier spielt beispielsweise die Ausbeute in der Produktion eine wichtige Rolle, für die schnell auszuwertende Ersatzmodelle zur Berechnung von Ausfallwahrscheinlichkeiten und zur Optimierung essentiell sind [4]. In dieser Zeit erfolgte auch ein Forschungsaufenthalt am Computational Science Laboratory an der Virginia Tech, USA, bei dem Untersuchungen zur Assimilation von Daten und zur Ausbreitung von Fehlern in gekoppelten dynamischen Systemen im Mittelpunkt standen [5,6].

Auch während seiner Juniorprofessur am Institut für Dynamik und Schwingungen an der TU Braunschweig ist das Forschungsthema die Beherrschung von Unsicherheit in der Modellierung und Simulation. Hier war Ulrich Römer zunächst im SFB 880 „Hochauftrieb künftiger Verkehrsflugzeuge“ involviert. Die simulationsbasierte Analyse von Lärmemissionen von neuen Hochauftriebskonzepten wird durch zahlreiche Unsicherheiten, beispielsweise in der Beschreibung turbulenter Strömungen, oder den Eigenschaften poröser Materialien beeinträchtigt. Trotz des hohen Rechenaufwands gelingt deren Quantifizierung durch eine Kombination von Modellen reduzierter Ordnung und stochastischen Spektralverfahren [7,8]. Bei Letzteren spielen adaptive Ansätze auf Basis von adjungierter Fehlerkontrolle eine wichtige Rolle, sowie Methoden der Konvergenzbeschleunigung mit konformen Abbildungen [9].

Ein weiteres laufendes Forschungsvorhaben ist das Graduiertenkolleg 2075 „Modelle für die Beschreibung der Zustandsänderung bei Alterung von Baustoffen und Tragwerken“. Hier sind Methoden zur Fusion von Daten und Finite Elemente Simulationen von Alterung und Schädigung unter Unsicherheit, von Interesse. In diesem Zusammenhang ist auch die stochastische Beschreibung von Rissausbreitung ein aktuelles Forschungsthema [10]. Die Rissbildung reagiert häufig sehr sensitiv auf Variationen in der Geometrie

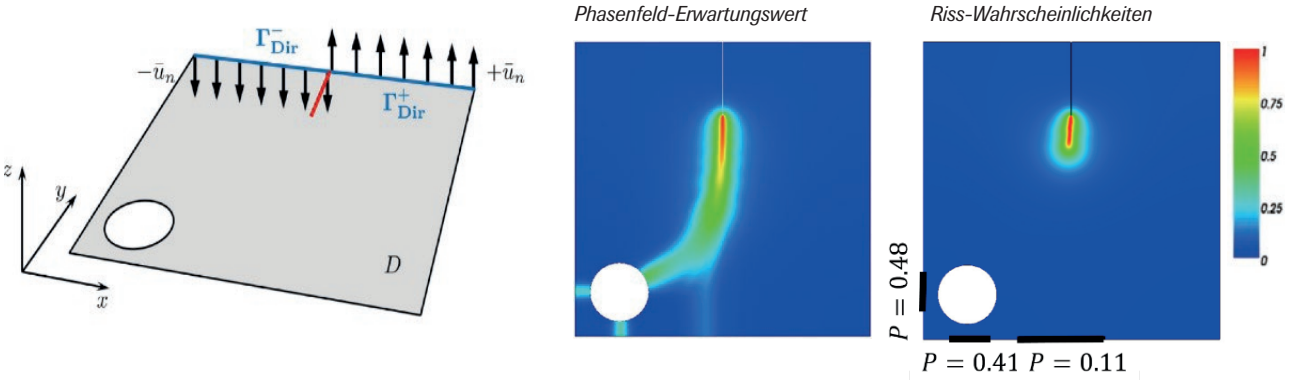



*Abb. 1: Rissausbreitung mit einem Phasenfeldmodell aus [10]. Links: Geometrie und Krafteinwirkung, wobei die Geometrie des Lochs in der linken unteren Ecke stochastisch variiert wurde (gezeigt ist die Nominalgeometrie). Mitte: Erwartungswert des Phasenfelds (mit Werten in* [0,1]*, 0/1 entspricht einem intakten/geschädigten Material). Rechts: Eintrittswahrscheinlichkeiten in verschiedenen Gebieten, die bedingt auf die aktuell vorhandene Rissausbreitung berechnet werden können. Für das gezeigte Rissmuster ergeben sich Wahrscheinlichkeiten von* $P = 0.48$*,* $P = 0.41$ *und* $P = 0.11$ *für einen Rissverlauf in den schwarz markierten Bereichen.*

und den Materialparametern; zudem kann es mehrere Lösungen der zugrundeliegenden Variationsprobleme geben. Stochastische Formulierungen können hier zur Unsicherheitsquantifizierung verwendet werden, aber auch, um mit der fehlenden Eindeutigkeit der Lösung umzugehen, indem Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf dem Raum aller zulässigen Rissmuster berechnet werden. Abbildung 1 zeigt ein numerisches Beispiel aus [10], indem die Rissausbreitung durch Variation der Lochgeometrie beeinflusst wird. In der Abbildung ist nur die Nominalgeometrie gezeigt und die Lösung des Phasenfelds. Der in der Mitte gezeigte Erwartungswert entspricht dem arithmetischen Mittel aller Rissmuster in der Monte Carlo Simulation und zeigt gleichzeitig viele mögliche Risspfade auf. Die Abbildung rechts zeigt die Wahrscheinlichkeiten, dass ein Riss in den mit schwarz gekennzeichneten Gebieten endet. Diese Wahrscheinlichkeiten können mit dem Satz von Bayes auf das fortschreitende Rissmuster konditioniert werden.

Seit 2019 ist Ulrich Römer Mitglied des Exzellenzclusters SE2A „Sustainable and Energy Efficient Aviation“, das neue Konfigurationen des emissionsarmen Fliegens untersucht. Aktuelle Forschungsfragen betreffen unter anderem die Auslegung von Energiesystemen, die neue Komponenten wie Batterien und Brennstoffzellen beinhalten und signifikante Unsicherheiten bezüglich der Performance-Parameter enthalten. Aufgrund der zum Teil recht spärlichen Datenbasis spielen auch robuste Erweiterungen von stochastischen Ansätzen, beispielsweise mit Wahrscheinlichkeitsboxen eine Rolle. Ein weiteres Thema adressiert die Erfassung von Böen zur Lastminderung an der Struktur unter Messunsicherheit [11]. Eine grundsätzliche Herausforderung ist die Kombination und Kopplung von Modellen unterschiedlicher Güte und Komplexität auf Systemebene. Um den Rechenaufwand beherrschbar zu halten sind Strategien zur automatischen Selektion der einzelnen Modelle erforderlich, die die Ausbreitung von Modellfehlern und Unsicherheiten auf Systemebene berücksichtigen und die Modellkomplexität entsprechend anpassen.

## Literatur


[1] Ulrich Römer, Sebastian Schöps und Thomas Weiland. „Stochastic Modeling and Regularity of the Nonlinear Elliptic curl--curl Equation.“ SIAM/ASA Journal on Uncertainty Quantification 4.1 (2016): S. 952-979.

[2] Radoslav Jankoski, Ulrich Römer und Sebastian Schöps. „Stochastic modeling of magnetic hysteretic properties by using multivariate random fields.“ International Journal for Uncertainty Quantification 9.1 (2019): S. 85-102.

[3] Ion Gabriel Ion, Zeger Bontinck, Dimitrios Loukrezis, Ulrich Römer, Oliver Lass, Stefan Ulbrich, Sebastian Schöps und Herbert De Gersem. „Robust shape optimization of electric devices based on deterministic optimization methods and finite-element analysis with affine parametrization and design elements.“ Electrical Engineering 100.4 (2018): S. 2635-2647.

[4] Mona Fuhrländer, Niklas Georg, Ulrich Römer und Sebastian Schöps. “Yield optimization based on adaptive Newton-Monte Carlo and polynomial surrogates.” International Journal for Uncertainty Quantification 10.4 (2020): S. 351-373.

[5] Ulrich Römer, Mahesh Narayanamurthi und Adrian Sandu. „Solving parameter estimation problems with discrete adjoint exponential integrators.“ Optimization Methods and Software 33.4-6 (2018): S. 750-770.

[6] Mahesh Narayanamurthi, Ulrich Römer und Adrian Sandu. “Goal-oriented a posteriori estimation of numerical errors in the solution of multiphysics systems.“ arXiv preprint arXiv:2001.08824 (2020).

[7] Shreyas M. Guruprasad, Prem R. Mohan Ram, Christopher Blech, Ulrich Römer und Sabine C. Langer. “Aircraft Cabin Noise Prediction Under Uncertainty.” Fundamentals of High Lift for Future Civil Aircraft (S. 247-261). Springer, Cham (2021).

[8] Ulrich Römer, Matthias Bollhöfer, Harik Sreekumar, Christopher Blech und Sabine C. Langer. “An adaptive sparse grid rational Arnoldi method for uncertainty quantification of dynamical systems in the frequency domain.” International Journal for Numerical Methods in Engineering 122.20 (2021): S. 5487-5511.

[9] Niklas Georg, Dimitrios Loukrezis, Ulrich Römer und Sebastian Schöps, S. “Enhanced adaptive surrogate models with applications in uncertainty quantification for nanoplasmonics.” International Journal for Uncertainty Quantification 10.2 (2020): S. 165-193.

[10] Tymofiy Gerasimov, Ulrich Römer, Jaroslav Vondřejc, J., Hermann G. Matthies und Laura De Lorenzis. “Stochastic phase-field modeling of brittle fracture: computing multiple crack patterns and their probabilities.” Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 372 (2020), 113353.

[11] André Bauknecht, Yannic Beyer, Julius Schultz, Salvatore Asaro, Khalid Khalil, Ulrich Römer, Meiko Steen, Davide Cavaliere und Nicolas Fezans. „Novel Concepts for Active Load Alleviation.“ AIAA SCITECH 2022 Forum, (2022).


## Kontakt


Jun.-Prof. Dr.-Ing. Ulrich Römer,
Institut für Dynamik und Schwingungen,
TU Braunschweig,
Schleinitzstr. 20,
38106 Braunschweig,
u.roemer@tu-braunschweig.de

# Jun.-Prof. Dr. Markus Weimar

**studierte Mathematik mit Nebenfach Informatik an der Friedrich-Schiller-Universität Jena. Nach seiner Diplomarbeit über Haar-Wavelets in Funktionenräumen schloss er dort 2013 auch seine Promotion zum „Fluch der Dimension“ in der theoretischen Numerik ab. Seit einer Postdoc-Phase an der Philipps-Universität Marburg befasst er sich hauptsächlich mit approximationstheoretischen Fragen im Kontext von adaptiven Methoden zur Lösung von Operatorgleichungen sowie ihrer Regularitätstheorie. Nach Forschungsaufenthalten an der UNSW in Sydney und der KU Leuven war er von 2015 bis 2017 als Vertretungsprofessor für Numerik sowie als akademischer Oberrat a. Z. an der Universität Siegen tätig. Im Anschluss wurde Herr Weimar auf die Juniorprofessur für Numerik an die Ruhr-Universität Bochum berufen, wo er seit dem Sommersemester 2020 eine Professur für Numerische Analysis vertritt.**

## STECKBRIEF

Die enormen Leistungssteigerungen moderner Computertechnik in den letzten Dekaden führten zur Entwicklung immer komplexerer mathematischer Modelle in den Natur- und Ingenieurwissenschaften sowie der Finanzindustrie. Ihre Analyse und vor allem ihre effiziente numerische Simulation gewinnt zunehmend an Bedeutung. Besonderes Interesse gilt dabei hochdimensionalen Problemstellungen, welche sich oftmals dem sogenannten Fluch der Dimension ausgesetzt sehen; ihre intrinsische Komplexität wächst mindestens exponentiell mit der Dimension. Nur durch ein tiefes Verständnis ihrer strukturellen Eigenschaften sowie ausgereifte adaptive Lösungsstrategien lassen sich hier zufriedenstellende numerische Ergebnisse erzielen.

Während seiner Promotion an der FSU Jena bei Prof. Dr. Erich Novak untersuchte Markus Weimar verschiedene Methoden, den Fluch der Dimension für klassische Approximations- und Integrationsprobleme der angewandten Mathematik zu umgehen [1]. Die maßgebliche Idee dieser Ansätze besteht darin, die zugrundeliegenden Funktionenräume geeignet einzuschränken, um die (Informations-) Komplexität der Problemstellungen zu reduzieren. Dies ist gerechtfertigt, da praktisch relevante hochdimensionale Funktionen oftmals nur eine sehr geringe effektive Dimensionalität oder aber spezielle Symmetrieeigenschaften aufweisen (Abb. 1); so sind beispielsweise Lösungen der elektronischen Schrödingergleichung antisymmetrisch bezüglich der Vertauschung von Elektronen mit gleichem Spin. Die Theorie der Reproducing Kernel Hilbert Spaces erlaubt daher die adaptive Component-By-Component-Konstruktion sogenannter Rank-1 Lattice Rules mit optimaler Konvergenzrate und dimensionsunabhängigen Konstanten für derartige Integrationsprobleme [2,3]. In weiteren Arbeiten zur Information-Based Complexity entwickelte Herr Weimar unter anderem optimale Diskrepanzschranken zufälliger Matrizen [4] sowie eine verfeinerte Klassifikation von Problemen mit (sub)exponentieller Komplexität [5].

Auch im Zusammenhang mit der effizienten numerischen Lösung von Operatorgleichungen - wie etwa Randwertproblemen partieller Differentialgleichungen (PDEs) - spielen Struktureigenschaften in Form von Funktionenräumen eine zentrale Rolle. Hier zeigt die angewandte Analysis, dass die maximale Konvergenzrate adaptiver Wavelet- oder Finite-Elemente-Verfahren basierend auf optimalen a posteriori Fehlerschätzern einzig durch die Zugehörigkeit der unbekannten Lösung zu bestimmten (quasi-) Banachräumen vom Besov- oder Triebel-Lizorkin-Typ bestimmt wird. Daher führt die Konstruktion und Analyse effizienter Algorithmen hier in natürlicher Weise auf die Regularitätstheorie der zugrundeliegenden Gleichungen jenseits der klassischen Sobolev-Hilbertraum-Skala (Abb. 2).

In der Gruppe von Prof. Dr. Stephan Dahlke (Marburg) konnte Markus Weimar in Kooperation mit dem Institut für Schallforschung der ÖAW und der Research Group of Computational Mathematics der Universität Basel erstmals entsprechende Regularitätsaussagen für Randintegralgleichungen im Zusammenhang mit akustischen 3D-Wellenphänomenen herleiten [6]. Mithilfe der Wavelet Boundary Element Method wurden die daraus resultierenden theoretischen Vorhersagen zur Konvergenzrate adaptiver Verfahren später eindrucksvoll numerisch validiert [7,8], vgl. Abb. 3. Im Gegensatz zu PDEs auf Gebieten stellt dabei die Irregularität der betrachteten, nur Patchweise glatten Oberflächen (bspw. erzeugt durch CAGDs) eine große Herausforderung dar, denn klassische Konstruktionen von Glattheitsräumen höherer Ordnung sind hier nicht wohldefiniert. Einen Ausweg bieten neue Funktionenräume vom Besov-Typ basierend auf Wavelet-Entwicklungen [9] sowie gewichtete Sobolev-Ungleichungen.

In einer Reihe weiterer Arbeiten widmete sich Herr Weimar ähnlichen Regularitätsfragen auch für quasilineare PDEs. Als Prototyp wurde hier der p-Laplace-Operator betrachtet, der beispielsweise in Modellen nicht-Newtonischer Flüssigkeiten oder der turbulenten Strömung von Gas durch poröse Medien Anwendungen findet. Mittels Wavelet-Techniken, komplexer Interpolation und lokalen Hölder-Abschätzungen konnten in [10,11] erste scharfe Resultate zur Besov-Regularität nachgewiesen werden. Unter anderem konnte er darüber hinaus in Kooperation mit der Gruppe von Prof. Dr. Lars Diening (Bielefeld) kürzlich optimale lokale Shift-

Theoreme für die p-Poisson-Gleichung in allgemeinen Besov- und Triebel-Lizorkin-Räumen zeigen [12,13]. Diese neue, nichtlineare Calderón-Zygmund-Theorie basiert auf dem Nachweis des nahezu linearen Abfalls der lokalen Oszillationen der beteiligten Vektorfelder sowie entsprechenden Charakterisierungen der zugrundeliegenden Funktionenräume. Sie verallgemeinert klassische Regularitätsaussagen in vielerlei Hinsicht und stellt einen wichtigen Meilenstein auf dem Weg zu optimalen adaptiven Lösungsverfahren dar.

Zusammen mit seiner Doktorandin Janina Hübner beschäftigt sich Markus Weimar aktuell unter anderem mit der Analyse von Approximationsverfahren basierend auf Baumstrukturen, welche in der numerischen Mathematik und Informatik eine fundamentale Rolle spielen. Im Rahmen eines weiteren Projekts werden optimale Wavelet-Algorithmen zur (nicht) linearen Approximation von Funktionen mit dominiert-gemischter Regularität in klassischen isotropen Glattheitsräumen untersucht.

Neben Lehre und Forschung in der angewandten numerischen Analysis engagiert sich Herr Weimar fortwährend in Projekten zur Nachwuchsförderung wie beispielsweise dem Early Career Researchers Board der Ruhr-Universität sowie im Rahmen von interdisziplinären Projekten [14] wie etwa der Global Young Faculty der Stiftung Mercator und UA Ruhr.

### Literatur


[1] M. Weimar: Breaking the curse of dimensionality. Dissertationes Math. 505, 1–112, 2015.

[2] D. Nuyens, G. Suryanarayana, and M. Weimar: Rank-1 lattice rules for multivariate integration in spaces of permutation-invariant functions: Error bounds and tractability. Adv. Comput. Math. 42(1), 55–84, 2016.

[3] D. Nuyens, G. Suryanarayana, and M. Weimar: Construction of quasi-Monte Carlo rules for multivariate integration in spaces of permutation-invariant functions. Constr. Approx. 45(2), 311–344, 2017.

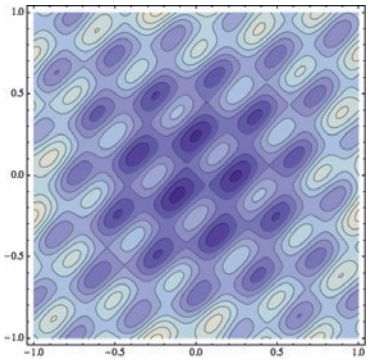



*Abb. 1: Beispiel einer permutationsinvarianten Funktion in 2D.*

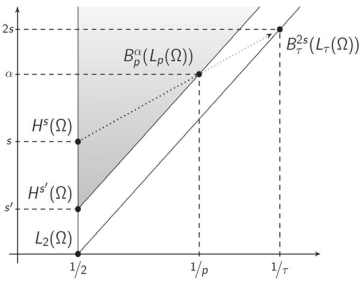



*Abb. 2: Erhöhte Besov-Regularität visualisiert im DeVore-Triebel-Diagramm.*


[4] C. Aistleitner and M. Weimar: Probabilistic star discrepancy bounds for double infinite random matrices. In: J. Dick, F.Y. Kuo, G.W. Peters, and I.H. Sloan (eds.), Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2012, Vol. 65 of Springer Proceedings in Mathematics & Statistics, pp. 271–287. Springer, Berlin, 2013.

[5] P. Siedlecki and M. Weimar: Notes on (s,t)-weak tractability: A refined classification of problems with (sub)exponential information complexity. J. Approx. Theory 200, 227–258, 2015.

[6] S. Dahlke and M. Weimar: Besov regularity for operator equations on patchwise smooth manifolds. J. Found. Comput. Math. 15, 1533–1569, 2015.

[7] S. Dahlke, H. Harbrecht, M. Utzinger, and M.Weimar: Adaptive wavelet BEM for boundary integral equations: Theory and numerical experiments. Numer. Funct. Anal. Optim. 39(2), 208–232, 2018.

[8] W. Kreuzer, T. Hrycak, and M. Weimar: Wavelet und Frame Techniken für BEM in der Akustik. In: M. Vorländer and J. Fels (eds.), Fortschritte der Akustik, DAGA 2016, 42. Jahrestagung für Akustik, pp. 855–858. Dt. Gesell. für Akustik e.V., Aachen, 2016.

[9] M. Weimar: Almost diagonal matrices and Besov-type spaces based on wavelet expansions. J. Fourier Anal. Appl. 22(2), 251–284, 2016.

[10] S. Dahlke, L. Diening, C. Hartmann, B. Scharf, and M. Weimar: Besov regularity of solutions to the p-Poisson equation. Nonlinear Anal. 130, 298–329, 2016.

[11] P. A. Cioica-Licht and M. Weimar: On the limit regularity in Sobolev and Besov scales related to approximation theory. J. Fourier Anal. Appl. 26(1), Art. 10, 1–24, 2020.

[12] A. Kh. Balci, L. Diening, and M. Weimar: Higher order Calderón-Zygmund estimates for the p-Laplace equation. J. Differential Equations 268(2), 590–635, 2020.

[13] A. Kh. Balci, L. Diening, and M. Weimar: Higher order regularity shifts for the p-Poisson problem. In: F.J. Vermolen and C. Vuik (eds.), Numerical Mathematics and Advanced Applications ENUMATH 2019, Vol. 139 of Lecture Notes in Computational Science and Engineering, pp. 1147–1155. Springer, Cham, 2021.

[14] Ch. Lübke, S. Hanke, and M. Weimar: Barrieren beim Umstieg vom Individualverkehr auf den öffentlichen Personennahverkehr: Ein Mobilitätsexperiment zum Pendleralltag im Ruhrgebiet. In: H. Proff (ed.), Making Connected Mobility Work: Technische und betriebswirtschaftliche Aspekte, pp. 371–379. Springer Gabler, Wiesbaden, 2021.


### Kontakt


Jun.-Prof. Dr. rer. nat. Markus Weimar
Fakultät für Mathematik
Ruhr-Universität Bochum
Universitätsstraße 150, 44801 Bochum
markus.weimar@rub.de
http://www.rub.de/ffm/Lehrstuehle/Weimar

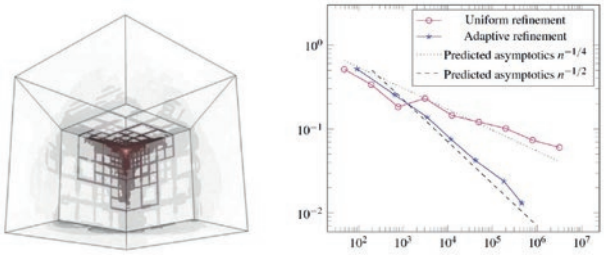
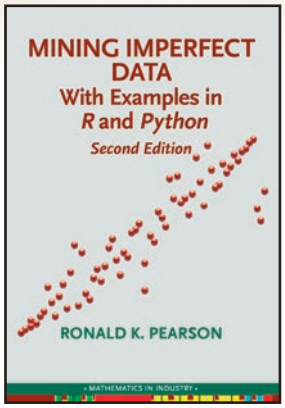




*Abb. 3: Adaptiv approximierte Dichte auf der Fichera-Ecke (links) und Energienormen der Residualvektoren bei uniformer bzw. adaptiver Verfeinerung mit n Freiheitsgraden (rechts).*

# Rundbrief Readers

## Save up to 30% on these titles & more!

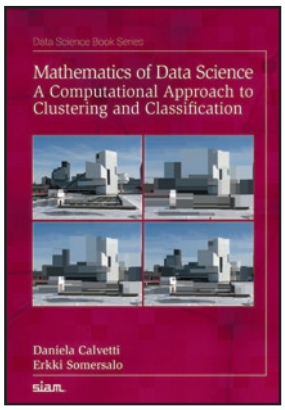



### Mining Imperfect Data
#### With Examples in *R* and *Python*, *Second Edition*

**Ronald K. Pearson**

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

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

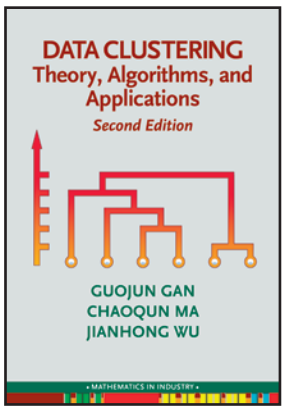



### Mathematics of Data Science
#### A Computational Approach to Clustering and Classification

**Daniela Calvetti and Erkki Somersalo**

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

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




### Data Clustering
#### Theory, Algorithms, and Applications, *Second Edition*

**Guojun Gan, Chaoqun Ma, and Jianhong Wu**

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

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

## To order, visit *bookstore.siam.org*

Use coupon code **BKGM22** to receive **20%** off all books in the SIAM bookstore. SIAM members automatically receive **30% off**. Members and customers outside North and South America can order at *eurospanbookstore.com/siam* and save on shipping.

siam®
Society for Industrial and Applied Mathematics

# GAMM Archive for Students

An Open-Access Online Journal run by the GAMM Juniors

STUDY

DISCOVER

PUBLISH RESULTS

Submission of student research results at

www.gamm-ev.de ► Publications ► GAMMAS

GAMM Juniors

# SAMM 2021 – FORM- UND TOPOLOGIEOPTIMIERUNG

VON PETER GANGL UND KATHRIN WELKER

Die achte GAMM Junioren Sommerschule für Angewandte Mathematik und Mechanik (SAMM) beschäftigte sich mit dem Thema Form- und Topologieoptimierung und fand vom 26. bis 30. Juli 2021 in einem hybriden Format an der Technischen Universität Graz statt. Unter Einhaltung der geltenden Sicherheitsmaßnahmen im Rahmen der COVID-19 Pandemie konnten 15 junge Forscherinnen und Forscher in Präsenz teilnehmen, weitere 29 verfolgten die Sommerschule virtuell. Der wissenschaftliche Teil der Sommerschule bestand hauptsächlich aus Vorlesungsblöcken der drei Hauptvortragenden Michael Stingl (FAU Erlangen-Nürnberg), Benedikt Wirth (WWU Münster) und Kevin Sturm (TU Wien). An zwei Tagen fand zudem eine Poster-Session statt, um den jungen Nachwuchswissenschaftlerinnen und Nachwuchswissenschaftlern die Möglichkeit zu geben, ihre Forschungsergebnisse zu präsentieren und zu diskutieren. Abgerundet wurde die Sommerschule durch zwei Forschungsvorträge von Grégoire Allaire (Ecole Polytechnique Paris) und Jun Wu (TU Delft).

Im ersten Vorlesungsblock startete Michael Stingl zunächst mit einer Einführung in die Material- und Topologieoptimierung und endete mit einem Einblick in aktuelle Forschungsergebnisse zur stochastischen Strukturoptimierung. Der Vorlesungsblock von Benedikt Wirth widmete sich der Analyse von Mustern (Pattern Analysis) und deren Anwendung in der Formoptimierung. Kevin Sturm präsentierte Zugänge zur Sensitivitätsanalyse bezüglich Form und Topologie sowie entsprechende numerische Optimierungsalgorithmen.

In der Poster-Session konnten die Teilnehmerinnen und Teilnehmer ihre aktuellen Forschungsergebnisse vorstellen und mit den Vortragenden sowie den anderen Teilnehmenden diskutieren. Auf Grund des hybriden Formates der SAMM 2021 fand die Poster-Session vollständig virtuell statt. Eine Auswahl der Poster wurde in einer Sonderausgabe der PAMM vom Wiley Verlag nach einem Peer-Review-Prozess veröffentlicht.

In den zwei abschließenden Forschungsvorträgen standen die Anwendung von Form- und Topologieoptimierungsmethoden auf Probleme aus der realen Welt im Mittelpunkt. So beschäftigten sich die Vorträge von Grégoire Allaire und Jun Wu mit der Optimierung von Gitterstrukturen und dem Zusammenspiel von Topologieoptimierung und additiver Fertigung von Bauteilen.

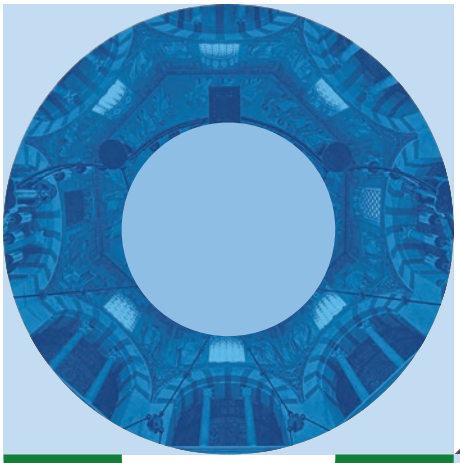
Auch unter Einhaltung der strikten Abstandsregeln wurde das Networking in der Veranstaltung nicht vernachlässigt. So erlaubte das gute Wetter für die Präsenz-Teilnehmenden Kaffeepausen unter freiem Himmel sowie einer Stadtführung inklusive Besteigung des Grazer Schlossbergs. Ein gemeinsames Abendessen mit vielen anregenden Diskussionen im Gastgarten rundete die sozialen Aktivitäten ab.

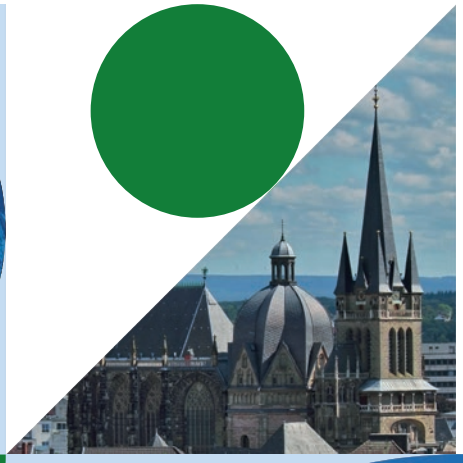
An dieser Stelle bedanken wir uns bei allen, die diese Veranstaltung möglich gemacht haben. Insbesondere gilt unser Dank der Technischen Universität Graz, der Helmut-Schmidt-Universität Hamburg, der Dr.-Klaus-Körper-Stiftung, der AVL List GmbH, der GAMM und den GAMM Junioren.

GESELLSCHAFT für
ANGEWANDTE MATHEMATIK und MECHANIK e.V.
INTERNATIONAL ASSOCIATION of APPLIED MATHEMATICS and MECHANICS

# 92ND ANNUAL MEETING

## of the International Association of Applied Mathematics and Mechanics





**August 15-19 2022**
**Aachen (Germany)**

RWTH AACHEN UNIVERSITY

### Local Organizers

**Stefanie Reese**
RWTH Aachen

**Bernd Markert**
RWTH Aachen

### Plenary Speakers

**Valeria Simoncini**
University Bologna

**Andres Kecskemethy**
Universität Duisburg-Essen

**Eduard Feireisl**
Czech Academy of Sciences Prag

**Ellen Kuhl**
Stanford University

**Martin Burger**
University Erlangen-Nürnberg

**Claus-Dieter Munz**
Universität Stuttgart

**Jan Hesthaven**
EPFL

**Bai-Xiang Xu**
TU Darmstadt

Bildnachweis: www.medien.aachen.de / Andreas Herrmann; www.medien.aachen.de / Andreas Steindl

gamm22.de / info@gamm22.de

# NACHRUF PROF. DR.-ING. DR. TECHN. E.H. DR. H.C. JÜRGEN ZIEREP

VON KARL BÜHLER

Am 29. Juli 2021 verstarb im 93. Lebensjahr Professor Dr.-Ing. Dr.techn.E.h. Dr.h.c. Jürgen Zierep. Damit hat sich der Kreis eines erfüllten Wissenschaftlerlebens geschlossen. Dieser Kreis umschließt eine Fläche mit einem Leben voller beruflicher Schaffenskraft gepaart mit der Liebe und Fürsorge für seine Familie.

Dieses Forscherleben war von so einer Vielfalt und umfassenden Tiefe, wie wir es nur in Teilen erahnen können. Deshalb sollen die folgenden Ausführungen aus Wissenschaft, Forschung und Lehre einen Einblick in die Persönlichkeit von Jürgen Zierep ermöglichen.

Jürgen Zierep wurde am 29.01.1929 in Berlin geboren. 1947-1951 folgte das Studium im zerbombten Berlin. Begonnen mit Mathematik an der Humboldt-Universität folgte der Abschluss in den Ingenieurwissenschaften an der TU Berlin als Dipl.-Ing., im gleichen Jahr 1951 folgte die Promotion zum Dr.-Ing. an der TU Berlin. 1952 führte ein Auslandsauenthalt zu Prof. Ackeret an das Aerodynamische Institut der ETH in Zürich und zu zusätzlicher Industrietätigkeit. Anschließend folgte eine Tätigkeit als Assistent an der TU Berlin mit der Habilitation 1956 in Angewandter Mathematik. Es folgte der Wechsel als Priv. Doz. an die TH Aachen verbunden mit der wissenschaftlichen Mitarbeit am Institut für theoretische Gasdynamik bei Prof. Oswatitsch.

Diese Tätigkeit bei Oswatitsch, die Mitarbeit bei Prof. Akkeret und die Begegnung mit Ludwig Prandtl in Göttingen, der mit seiner Grenzschicht-Theorie aus dem Jahre 1904 die moderne Strömungsmechanik begründete, entfalteten prägende Wirkung auf Prof. Zierep. Die Gasdynamik hat Prof. Zierep 1961 nach Karlsruhe geführt. Der Lehrstuhl für Strömungslehre und das Institut für Strömungslehre und Strömungsmaschinen waren seine wissenschaftliche Heimat. Hier wurde eine weltweit beachtete Schule der Strömungsmechanik aufgebaut.

Wissenschaft, Forschung und Lehre waren eine unzertrennliche Einheit. Die Wissenschaft lebt vom Austausch, dem sich die Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik, die GAMM, verpflichtet fühlt. Dieser Organisation hat Prof. Zierep von 1983-1986 als Präsident, danach als Vizepräsident und lange Jahre als Schatzmeister und im Vorstandsrat gedient. Die GAMM bot ihm die Möglichkeit für Kontakte hinter dem Eisernen Vorhang mit GAMM-Jahrestagungen unter anderem in Budapest und Dubrovnik. Bis ins entfernte China reichten damals die Verbindungen.

Die Forschung ermöglicht dem Drang nach neuen wissenschaftlichen Erkenntnissen nachzugehen. Von der Meteorologie, der Gasdynamik bis zu den aktuellen Themen der Strömungsmechanik reichten die Arbeitsfelder von Prof. Zierep. Experimente dienten zur Begründung und Bestätigung mathematischer Theorien und Analysen. Hier zeigte sich meisterhaft die geniale Kombination von Theorie und Praxis. Die Ähnlichkeitsmechanik diente zur Übersicht in den Wissensgebieten. Zahlreiche Veröffentlichungen enthalten die wissenschaftlichen Erkenntnisse zur Dokumentation, Verbreitung und Diskussion. Einen großen Beitrag zur Verbreitung des Wissens hat die Zeitschrift ACTA MECHANICA geleistet, deren Mitherausgeber Prof. Zierep im Zeitraum von 1965-2001 war.

Wissenschaft, Forschung und Lehre waren für Jürgen Zierep untrennbar verbunden. In der Lehre konnte er junge Studierende auch für schwierigste Wissensgebiete begeistern. Mut, Tatkraft und Vertrauen waren Maxime, die Ihn dabei leiteten. Seine Vorlesungen und Vorträge waren legendär, von besonderer Klarheit und Präzision, vorgetragen mit Enthusiasmus. Zahlreiche Lehrbücher zu den Themen Gasdynamik, Ähnlichkeitsgesetze und Modellregeln, Strömungsmechanik und Grundzüge der Strömungslehre bildeten die Basis für die eigene Lehrtätigkeit und den Zugang für viele Studierende an den Universitäten und Hochschulen.

Die Erfolge in Forschung und Lehre führten zu zahlreichen Ehrungen und Auszeichnungen. Es sind dies unter anderem: Die Ehrenprofessur der Beijing University of Aeronautics und Astronautics (1988), die Ehrendoktorwürden der Technischen Universitäten Wien (1989) und Budapest (2006).

Im Jahre 1995 wurde Jürgen Zierep das Bundesverdienstkreuz 1. Klasse für seine Forschungstätigkeit und internationalen Wissenschaftsaustausch verliehen.

Eine Herzensangelegenheit war für Jürgen Zierep die Arbeit in der GAMM, der Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik, die im Jahre 1999 mit der Ehrenmitgliedschaft gewürdigt wurde.

Ein Höhepunkt war 1978 die Ludwig-Prandtl Gedächtnisvorlesung. Die Verleihung des Ludwig-Prandtl-Rings 1998, der höchsten aerodynamischen Auszeichnung, war etwas Besonderes. Den Begründer der modernen Strömungslehre, Ludwig Prandtl, hatte Jürgen Zierep noch persönlich kennengelernt. Oft berichtete er von dieser Begegnung. Einige der hier erwähnten Begebenheiten und weitere sind auch in der Beschreibung von W. Schneider (1994) dargestellt.

Zahlreiche Kollegen, Mitarbeiter und Studierende werden sich an Prof. Zierep als Meister der Strömungsmechanik und liebenswürdigen Menschen erinnern.

**Literatur**

W. Schneider: Professor Dr.-Ing. Dr. techn. E.h. Dr. h.c. Jürgen Zierep, ACTA MECHANICA SUPPLEMENTUM 4, Fluid- and Gasdynamics, Ed. by G.H. Schnerr, R. Bohning, K. Bühler and W. Frank, Springer-Verlag, Wien, 1994

## JAHRESBERICHT 2021 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# ANGEWANDTE OPERATORTHEORIE

Martin Grothaus

Birgit Jacob

Christian Seifert

Christiane Tretter

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

**Aktivitäten des Fachausschusses 2020:**

- QGraph 2021: Quantum graphs in Mathematics, Physics and Applications IX, Stockholm, December 08-10, 2021
  Organisation: Pavel Kurasov and Jonathan Rohleder (Stockholm University)
  Webseite:
  https://staff.math.su.se/kurasov/QGRAPH/Meeting1221.html
- 3rd Workshop on Stability and Control of Infinite-Dimensional Systems (SCINDIS 2020), Wuppertal, September 27-29, 2021.
  Organisation: Sergey Dashkovskiy (Würzburg), Birgit Jacob (Wuppertal), Andrii Mironchenko (Passau) und Fabian Wirth (Passau).
  Webseite:
  https://www.fan.uni-wuppertal.de/de/scindis-2020.html
- Special Session “Spectral Theory and Differential Operators”, IWOTA 2021 in Chapman, Orange, USA.
  Organisation: Jussi Behrndt (Graz), Carsten Trunk (Ilmenau).
- Special Session “Operator semigroups and functional calculus”, IWOTA 2020 (2021) in Lancaster, Großbritannien Organisation: Markus Haase (Kiel), Yuri Tomilov (Warschau).
- Sektion „Angewandte Operatortheorie“, Jahrestagung der GAMM 2021 in Kassel.
  Organisation: Birgit Jacob und Hafida Laasri (Bergische Universität Wuppertal).

**Geplante Aktivitäten des Fachausschusses 2021:**

- Workshop of the GAMM Activity Group Applied Operator Theory, Stockholm University, May 20-22, 2021
  Organisation: Sabine Bögli (Durham), Jonathan Rohleder (Stockholm).
  Webseite:
  https://staff.math.su.se/jonathan.rohleder/gamm-ot21/
- Sektion „Angewandte Operatortheorie“, Jahrestagung der GAMM 2022 in Aachen
  Organisation: Christian Seifert/Technische Universität Hamburg.

## JAHRESBERICHT 2021 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# OPTIMIERUNG MIT PARTIELLEN DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

Anton Schiela

Gerd Wachsmuth

Der Fachausschuss fördert die Kommunikation und Zusammenarbeit aller Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler sowie Industrievertretern, die an der Optimierung mit partiellen Differentialgleichungen interessiert sind. Er vertritt außerdem das Fachgebiet innerhalb der GAMM.
Das Treffen des FA fand am 2. September 2021 im Zuge eines gemeinsamen Workshops mit dem Fachausschuss „Dynamik und Regelungstheorie” in Bayreuth als hybride Veranstaltung statt.
Mitglieder des FA haben an zahlreichen Konferenzen und Workshops teilgenommen und ebensolche Veranstaltungen mit organisiert. Zu nennen sind hier insbesondere

- gemeinsamer Workshop der GAMM Fachausschüsse „Dynamik and Regelungstheorie“ und „Optimierung mit partiellen Differentialgleichungen“
- Sektionen und Minisymposien bei der (virtuellen) GAMM-Jahrestagung

Eine erweiterte Liste von Veranstaltungen sowie bevorstehende Tagungsaktivitäten für 2022 werden über die Homepage des Fachausschusses http://www.gamm.optpde.net bekanntgegeben. Das nächste Jahrestreffen soll im Rahmen des Chemnitzer Finite Elemente Symposiums, September 15-17, 2022 in Herrsching am Ammersee stattfinden.

JAHRESBERICHT 2021 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# ANALYSIS PARTIELLER DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

Helmut Abels

Dorothee Knees

Carolin Kreisbeck

Der Fachausschuss „Analysis partieller Differentialgleichungen“ fördert den wissenschaftlichen Austausch von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern, die in unterschiedlichen Bereichen der Analysis partieller Differentialgleichungen arbeiten, verstärkt und koordiniert diesen. Insbesondere soll die Interaktion zwischen unterschiedlichen Forschungsgemeinschaften und Anwendungsgebieten intensiviert werden und damit ein wichtiger Wissenstransfer geschaffen werden. Seit der Neuwahl im Oktober besteht der Vorstand aus: Helmut Abels (stellvertretender Vorsitzender), Karoline Disser, Julian Fischer, Dorothee Knees (Vorsitzende), Carolin Kreisbeck (stellvertretende Vorsitzende), Martin Kružík, Matthias Röger, Marita Thomas und Mathias Wilke. Der Fachausschuss hat die erfreuliche Entwicklung bezüglich der Mitgliederzahlen weiter fortgesetzt, und zählt aktuell 82 Mitglieder, darunter zahlreiche Postdocs und NachwuchswissenschaftlerInnen. Anträge auf Aufnahme in den Fachausschuss können jeder Zeit an die Vorsitzende (Dorothee Knees, e-mail: gammanapde@mathematik.uni-kassel.de) gestellt werden. Genauere Informationen findet man auf der WWW-Seite des Fachausschusses (http://www.uni-regensburg.de/mathematics/partial-differential-equations/index.html).

Im vergangenen akademischen Jahr waren unsere Mitglieder an der Organisation diverser Konferenzen, Workshops und Schulen beteiligt, wobei diese - bis auf wenige Ausnahmen - digital abgehalten wurden und einige davon ursprünglich für 2020 angesetzt gewesen wären:
Vom 5.-7. Oktober 2021 fand das durch P. Dondl und A. Maione organisierte achte Jahrestreffen des Fachausschusses im hybriden Format mit ca. 60 Teilnehmenden statt. Das Programm umfasste 9 eingeladene und 17 weitere wissenschaftliche Vorträge, die ein breites Themenspektrum abdeckten, darunter z.B. elliptische Systeme, Phasenfeldmodelle und deren singulärer Limes und Homogenisierung von heterogenen Systemen.

Auf der GAMM-Jahrestagung 2020-2021 wurde die Sektion „Applied Analysis” von D. Knees und M. Thomas organisiert. Von Oktober 2020 bis Februar 2021 gab es verschiedene Workshops und Winterschulen im Rahmen des „Thematic Einstein Semester on Energy Based Methods for Reactive Multiphase Flows” (MATH+, Berlin). Auch bei der SIAM Conference on Mathematical Aspects of Materials Science, dem 8th EMC, sowie dem Jahrestreffen der DMV 2021 waren zahlreiche Mitglieder des Fachausschusses durch Organisation von Minisymposia und Vorträge vertreten. Die „15th International Conference on Free Boundary Problems” (HU Berlin) fand vom 13.-17. September 2021 statt. Vom 20.-22. September 2021 organisierten A. Ghosh und A. Giunti den Workshop „Young Women in PDEs and Applications“. Ein online Kick-off Meeting für den Lorentz Center Workshop „Nonlocality: Analysis, Numerics and Applications“ fand vom 27.-29. Oktober 2021 statt (Organisation: A. Antil, P. Dondl, Q. Du, C. Kreisbeck).

Auch für das nächste Jahr sind zahlreiche Aktivitäten mit Beteiligung von Mitgliedern des Fachausschusses geplant. Im Folgenden werden nur Veranstaltungen genannt, bei denen schon ein Termin feststeht:
Das zehnte Jahrestreffen des Fachausschusses wird vom 5.-7. Oktober 2022 stattfinden (Organisation: J. Fischer, IST). Bei der GAMM-Jahrestagung 2022 in Aachen wird unser Mitglied E. Feireisl einen Plenarvortrag halten und K. Disser wird die Sektion „Applied Analysis” leiten. Vom 21. bis 26. Februar 2022 findet die Winterschule „Nonlocal Equations: Analysis and Numerics“ in Bielefeld (Organisation: Balci, Diening, Kassmann) statt und vom 14. bis 18. März 2022 wird die SIAM Conference on Analysis of Partial Differential Equations, die ursprünglich in Berlin geplant war, virtuell stattfinden. Außerdem ist für den 9.-13. Mai 2022 die Konferenz „Nonlinear PDEs in Fluid Dynamics“ am CIRM (Marseille Luminy, Frankreich) in Präsenz geplant.

JAHRESBERICHT 2021 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# DYNAMIK UND REGELUNGSTHEORIE

Rolf Findeisen

Robert Seifried

Karl Worthmann

Dynamik und Regelungstheorie ist ein interdisziplinäres Gebiet, welches dank stetig steigender Automatisierung und dem Einsatz Autonomer Systeme in vielen Lebensbereichen trotz seiner langen Historie seine Bedeutung beibehalten hat. Im interdisziplinär ausgerichteten Fachausschuss sind Mitglieder verschiedenster Fachrichtungen aktiv: Regelungstheorie, mathematische Systemtheorie, Mehrkörper- und nichtlineare Dynamik, Theorie des maschinellen Lernens für dynamische Systeme und angewandte Mathematik, aber auch Experten und Interessenten aus den Anwendungsfeldern Mechatronik, Energietechnik, Robotik bis hin zum autonomen Fahren. Alle Mitglieder vereint das Interesse am tieferen Verständnis dynamischer Systeme und der Dynamik bei Steuerungen und Regelungen, insbesondere mechanischer und mechatronischer Systeme, aber auch weit darüber hinaus. Neben klassischen Fragestellungen spielen vermehrt Fragen der Analyse, Synthese und Beeinflussung dynamischer Systeme über Kommunikationsnetzwerke, die Betrachtung großer Systeme bestehend aus einer Vielzahl an Einzelsystemen sowie die Verschmelzung klassischer Verfahren mit Techniken des Maschinellen Lernens und der Künstlichen Intelligenz eine Rolle.

Aufgrund der geltenden Restriktionen wurden die regelmäßigen Treffen und Workshops des Fachausschusses 2021 durch Online-Events ersetzt. In 2021 waren dies die virtuellen Workshops im Februar, Mai und November sowie der hybride Workshop im September an der TU Bayreuth, welcher gemeinsam mit dem GAMM FA „Optimierung mit partiellen Differentialgleichungen“ abgehalten wurde. Die virtuellen und hybriden Treffen erlauben es, die Aktivitäten des Fachausschusses, insbesondere die Diskussionen und Interaktionen zwischen den Mitgliedern und Gästen, trotz der schwierigen Bedingungen fortzuführen und sogar zu weiter auszubauen. Im Gegensatz zu den Präsenzworkshops wurden die virtuellen Sitzungen kürzer gehalten und bestanden in der Regel aus drei bis sechs Fachvorträgen. Hierbei wurde Wert daraufgelegt, neben erfahrenden Vortragenden jungen Mitgliedern die Möglichkeit zur Präsentation ihrer Forschungsergebnisse zu geben. An den virtuellen Workshops partizipierten im Schnitt 50 bis 100 Teilnehmerinnen und Teilnehmer. Im Rahmen der an die Vorträge anschließenden Diskussionen wurden zahlreichen Fragen angesprochen und Anregungen gegeben. Hauptanliegen ist eine offene wissenschaftliche Diskussion und weniger die Präsentation ausgereifter Ergebnisse. Dies fördert die Diskussion aktueller Themen und das Aufgreifen neuer Herausforderungen, was für eine stetige Weiterentwicklung und Neufindung des Fachausschusses essentiell ist.

Mitglieder des GAMM Fachausschusses waren 2021 auch wieder stark an der Organisation diverser Konferenzen und Workshops beteiligt. Ebenso waren viele Mitglieder bei der GAMM Jahrestagung vertreten, besonders in den Sektionen S1 „Multi-body Dynamics“, S5 „Nonlinear Oscillations“ und S20 „Dynamics and Control“, welche von Fachausschussmitgliedern organisiert wurden. Auch haben die Fachausschussmitglieder T. Faulwasser und K. Worthmann das Virtual Seminar des IFAC TC “Optimal Control” zum Thema “Optimal Control and Data-driven Methods in Control” am 8. Juli 2021 organisiert, welches eine hohe inhaltliche Nähe zum Fachausschuss aufwies.

Für 2022 sind momentan zwei Präsenzworkshops geplant, am 31. März und 1. April an der Universität Stuttgart (Organisatoren: Henrik Ebel, Simon Eugster und Malte Krack), siehe https://www.ila.uni-stuttgart.de/gammfa2022, und im Herbst zusammen mit den GMA-Fachausschüssen 1.30 und 1.40 in Anif. Des Weiteren wird von Mitgliedern des Fachausschusses im September das 25th International Symposium on Mathematical Theory of Networks and Systems in Bayreuth (Lars Grüne) sowie vom 14. bis 17. März der 15. Elgersburg Workshop organisiert (Lars Grüne, Achim Ilchmann und Eva Zerz). .

JAHRESBERICHT 2021 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# MATHEMATISCHE SIGNAL- UND BILDVERARBEITUNG (MSIP)

Gitta Kutyniok

Felix Krahmer

Stefan Kunis

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

Für das Jahr 2021 wurden von Mitgliedern des Fachausschusses u.a. folgende Veranstaltungen geplant:

- Jahrestagung der GAMM 2021: Sektion " Mathematical Signal and Image processing", Organisation: G. Plonka (Göttingen), M. Möller (Siegen) und Session "SPP 1798: Compressed Sensing in Information Processing (CoSIP)", Jahrestagung der GAMM 2020. Organisation: R. Kunsch (Aachen), G. Kutyniok (München), H. Rauhut (Aachen).

- Online International Conference on Compu-tational Harmonic Analysis, 13.-17.9.2021, Organisation: A. Caragea (Eichstätt/Ingolstadt), T. Fuchs, A. Kaplan (beide München), T. Klock (Oslo), D. Gwan Lee (Eichstätt/ Ingolstadt), R. Levie (München), J. Maly (Eichstätt/Ingolstadt), C. Mayrink Verdun), P. Römer, H. Veselovska (alle München).

- Thematic Einstein Semester on Mathematics of Imaging in Real-World Challenges (Hans-C. Hege, M. Hintermüller, T. Schäffter, G. Steidl; F. Ambellan, R. Beinert, C. Kolbitsch, K. Papafitsoros, C. von Tycowicz (alle Berlin).

Bedingt durch die COVID19-Pandemie wurden leider diverse andere Veranstaltungen abgesagt oder auf die folgenden Jahre verschoben.

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

- One World Mathematics of INformation, Data, and Signals (1W-MINDS) Seminar, Organisation: M. Hirn, M. Iwen, D. Needell, R. Saab, R. Wang (USA), U. Molter (Argentinien), S. Ling (China), F. Krahmer (Deutschland), A. Bandeira (Schweiz), B. Bah (Südafrika).

- Codes and Expansions (CodEx) Seminar, Organisation: J. Iverson, J. Jasper, E. King, D.Mixon (USA).

Das von G. Kutyniok aus unserer Fachgruppe zum Thema „Theoretical Foundations of Deep Learning" initiierte DFG-Schwerpunktprogramm (SPP 2298) startete im Oktober 2021. Das Organisationskommittee besteht desweiteren aus M. Burger (Erlangen), M. Hein (Tübingen), S. Pokutta (Berlin), I. Steinwart (Stuttgart). Zudem sind viele der PIs Mitglieder unserer Fachgruppe.
Desweiteren wurde im Jahr 2021 von Mitgliedern des Fachausschusses ein Scientific Programme am Newton Institute zum Thema Mathematics of Deep Learning koorganisiert. Organisation: P. Bartlett (Berkeley), A. Hansen (Cambridge), A. Jentzen (Münster), G. Kutyniok (München), C. Schönlieb (Cambridge).

Seit Beginn des Jahres 2022 hat der Fachausschuss einen neuen Vorstand bestehend aus Felix Krahmer, Gabriele Steidl (TU Berlin) und Stefan Kunis. Die neuen Vorstandsmitglieder danken Gitta Kutyniok für ihr langjähriges Engagement als Vorsitzende des Fachausschusses.

Für 2022 sind Mitglieder des Fachausschusses bei der Organisition folgender Veranstaltungen beteiligt:

- Im März 2022 findet die SIAM Conference on Imaging Science virtuell statt, Organisation: M. Hintermüller, T. Schäffter, G. Steidl (alle Berlin).

- Im September 2022 findet in München die International Conference on Computational Harmonic Analysis statt, Organisation: H. Boche (München), C. Chui (Hongkong), M. Fornasier, F. Krahmer, G. Kutyniok (alle München), G. Pfander (Eichstätt/Ingolstadt).

Zusätzliche Informationen zu den Aktivitäten des Fachausschusses sind auf der Seite https://www.math.uos.de/msip zu finden. Bei Interesse laden wir alle herzlich dazu ein, Mitglied zu werden.

JAHRESBERICHT 2021 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# ANALYSIS VON MIKROSTRUKTUREN

Kerstin Weinberg

Ben Schweizer

Der Fachausschuss „Analysis von Mikrostrukturen“ fördert die mathematische Modellierung mikromechanischer Phänomene sowie deren Analyse und numerische Simulation. Die Wechselwirkung von Mechanismen auf unterschiedlichen Skalen erfordert eine Zusammenarbeit von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern in den angrenzenden Disziplinen der Ingenieur- und Naturwissenschaften sowie der Mathematik, da einerseits viele Fragen der Modellierung nicht geklärt sind und andererseits die Potentiale moderner mathematischer Methoden wie Homogenisierung, Relaxierung und nichtlokaler Modellierung noch nicht angemessen Anwendung finden.
Unser Interessenschwerpunkt liegt dabei weniger auf der Entwicklung numerischer Methoden zur Behandlung von Skalenübergängen als auf der Herleitung und Analyse von Modellen, welche Mikrostruktureigenschaften auf der Makroskala repräsentieren. Dazu gehört natürlich auch die Generierung angepasster numerischer Verfahren für die Berechnung dieser Modelle.
Auch wenn die Weiterentwicklung und Verfeinerung von Mikrostrukturmodellen und ihre effiziente numerische Umsetzung im Zentrum der Arbeit unseres Fachausschusses stehen, begrüßen wir den Vergleich unserer Ergebnisse mit experimentellen Befunden. In diesem Sinne wollen wir sowohl durch koordinierte Forschungsplanung als auch durch Seminare und Tagungen die Thematik „Mikrostrukturen“ vorantreiben.

Als besonderen Erfolg der Arbeit unseres Fachausschusses können wir das Schwerpunktprogramms der DFG „Variationelle Methoden zur Vorhersage komplexer Phänomene in Strukturen und Materialien der Ingenieurwissenschaften (SPP 2256)“ berichten. Die Initiatorengruppe des SPP 2256 besteht aus den Fachausschussmitgliedern Georg Dolzmann (als Sprecher), Dorothee Knees, Joern Mosler, Klaus Hackl und Bernd Schmidt. Für das seit Mitte 2020 laufende Programm wurden 19 teilnehmenden Projekte bewilligt. In diesem Jahr fand das Jahrestreffen des Schwerpunktprogramms -online- vom 22. bis 24. September statt. Dieses zweite Jahrestreffen stand ganz im Zeichen des Austauschs der wissenschaftlichen Aktivitäten, die in den einzelnen Projekten geplant sind. Dazu gab es Fachvorträge aus den einzelnen Teilprojekten, welche Themenbereiche wie: Phase-Field Fracture Simulations, Dimension Reduction for Brittle Rods, Volume-Surface Coupling in Homogenisation, Finite Element Formulations for Relaxed Models, Variational Phase-Field Models, Surrogate Models for Data-Driven Problems etc. umspannten.

**Weitere Aktivitäten und Treffen des Fachausschusses:**

- Das 20. GAMM-Seminar on Microstructures fand unter großer Beteiligung des Fachausschusses am 29. und 30. Januar 2021 online statt. Trotz des virtuellen Formats hatten wir ein erfolgreiches Treffen mit 23 Fachvorträgen. Die eingeladenen Hauptvorträge wurden von Bai-Xiang Xu, Ulisse Stefanelli, Michael Ortiz und Elisa Davoli gehalten. Insgesamt nahmen fast 100 Zuhörer teil.

- Vom 17. November 2020 bis zum 16. Februar 2021 hielt Klaus Hackl einen Online-Kurs zum Thema „Variational Methods for Inelastic Materials“, parallel für Nachwuchswissenschaftler des SPP 2256 und der Tongji University Shanghai. Die Aufzeichnungen sind weiterhin verfügbar, siehe http://mechmat.rub.de/aktuelles/meldungen/akt00037.html.en

**Kommende Aktivitäten:**

- Das 21th-GAMM-Seminar on Microstructures am 28. Januar 2022 wird den Fachausschuss wieder online zusammenbringen. Das Jahrestreffen wird organisiert von Dirk Pretorius, Georg Dolzmann, Ben Schweizer und Kerstin Weinberg (https:/ /www.asc.tuwien.ac.at/gamm2021/)

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

JAHRESBERICHT 2021 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# MODELLIERUNG, ANALYSIS UND SIMULATION MOLEKULARER SYSTEME

Benjamin Stamm

Gero Friesecke

Reinhold Schneider

Die Pandemie hatte uns weiter fest im Griff. Unser Jahrestreffen fand auch dieses Jahr wieder virtuell statt. Die Teilnehmer:innen zeichneten sich wiederum durch ihre Internationalität aus, wir hatten Teilnehmer:innen von Peking bis Vancouver. Traditionell bietet dieses Treffen speziell den Nachwuchs-Forschenden eine Plattform sich zu präsentieren, was in der Pandemie sehr wichtig ist und auch rege genutzt wurde.
Ein von diesem Fachausschuss organisiertes, großes Mini-Symposium über Elektronenstruktur-Berechnungen an der SIAM Material Science Konferenz fand nun dieses Jahr virtuell statt. Das gut besuchte Mini-Symposium wurde vom Organisationskomitee im Programm speziell hervorgehoben, was die steigende Popularität dieses Forschungsthemas in der Mathematik untermauert.

Wir ko-organisierten auch ein fruchtbares dreimonatiges interdisziplinäres Programm am IPAM (Institute for Pure and Applied Mathematics, UCLA) über ‚Tensor methods in physics and machine learning', molekulare Systeme waren dort eines der zentralen Anwendungsgebiete.
Aktuelle Informationen hierüber sowie über weitere Aktivitäten finden sich auf unserer Website https://moansi.wixsite.com/gamm.

JAHRESBERICHT 2021 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# NUMERISCHE ANALYSIS

Lars Grasedyck

Daniel Peterseim

Der Fachausschuss widmet sich sich der numerischen Analysis, einer Kerndisziplin der angewandten Mathematik. Besonderes Augenmerk liegt auf Anwendungen in den Natur- und Ingenieurwissenschaften. Den inhaltlichen Schwerpunkt des Fachausschusses bildet die Numerik partieller Differentialgleichungen, insbesondere Methoden für mehrskalige, hochdimensionale, datenbasierte oder unsicherheitsbehaftete Probleme. Ausgehend von der engen Verknüpfung von Algorithmenentwicklung und mathematischer Analyse fördert der Fachausschuss zuverlässige und effiziente Computersimulationen als Schlüsseltechnologie für den wissenschaftlichen und industriellen Erkenntnisgewinn.
Dank des Engagements von Sven Beuchler konnten wir 2021 ein Jahrestreffen in Präsenz in Hannover abhalten. Darüber hinaus hat der Ausschuss seine digitalen Initiativen des Vorjahres, wie die Seminarreihe „One World Numerical Analysis Series" (siehe https://www.icms.org.uk/V_OWNumAnal.php), aktiv und erfolgreich fortgesetzt. Die inzwischen traditionellen Nachwuchs-Workshops wurden digital überbrückt. 2022 soll es dann wieder ein Präsenzangebot für den wissenschaftlichen Nachwuchs in Sion/Schweiz geben. Außerdem werden wir gemeinsam mit den GAMM-Junioren am 12.-14.09.22 in Augsburg eine Sommerschule organisieren (direkt vor dem Chemnitz Finite Element Symposium 2022 in Herrsching bei München).

Aktuelle Information siehe:
www.igpm.rwth-aachen.de/gamm_numerical_analysis

JAHRESBERICHT 2020 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# STOCHASTISCHE OPTIMIERUNG IN DER TECHNIK

Thomas Vietor

**1. Zusammenfassender Bericht der Aktivitäten**
Der BMBF-geförderte Forschungscampus „Open Hybrid LabFactory“ https://open-hybrid-labfactory.de bildet eine Basis für die Zusammenarbeit in dem GAMM-Fachausschuss. Im Rahmen der durchzuführenden Projekte kommt es zur Weiterentwicklung und Anwendung stochastischer Verfahren in der Optimierung, erster Schwerpunkt ist die Strukturoptimierung. Damit ist für die Aktivitäten im Rahmen des GAMM FA eine Plattform geschaffen. Neben Mitgliedern aus dieser Forschungseinrichtung sind Wissenschaftler anderer Universitäten beteiligt. Neben der Erforschung und dem Einsatz von stochastischen Optimierungsverfahren in der Anwendung auf Verkehrssysteme, werden Anwendungen in anderen Disziplinen des Maschinenbaus untersucht. In allem stehen die Grundlagendisziplinen Mechanik und Mathematik im Vordergrund zur Erforschung der benötigten Verfahren.

**2. Publikationen/Konferenzen/Sessions 2021**
Im Jahr 2021 wurden keine Konferenzen und Sessions von den Mitgliedern geleitet oder durchgeführt. Für das Jahr 2022 wird die Organisation und eine Session der Konferenz „Future Automotive Production Conference“ https://open-hybrid-labfactory.de/aktuelles/fapc-2022 geplant und dann durchgeführt.
Als eine wesentliche Publikation wird der Beitrag zur Ermittlung von Materialkarten als Basis für die Berechnung und Optimierung von Strukturen an dieser Stelle angegeben, welche 2021 eingereicht und im Januar 2022 publiziert wurde: Meissner, P.; Winter, J.; Vietor, T.: Methodology for Neural Network-Based Material Card Calibration Using LS-DYNA MAT_187_SAMP-1 Considering Failure with GISSMO, Materials 2022, 15(2), 643; https://doi.org/10.3390/ma15020643

**3. Weitere Pläne für das Jahr 2022 und folgende**
Es wurden zwei Anträge im Normalverfahren bei der DFG durch Mitglieder des Auschusses erfolgreich beantragt. Ein größerer Antrag auf Einrichtung einer Forschungsgruppe bei der DFG ist in Vorbereitung.

JAHRESBERICHT 2021 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# ANGEWANDTE UND NUMERISCHE LINEARE ALGEBRA (ANLA)

Jörg Liesen

Stefan Güttel

Der Fachausschuss fördert die Kommunikation und Zusammenarbeit im Bereich der Angewandten und Numerischen Linearen Algebra. Er hat derzeit 99 Mitglieder aus 21 Ländern. Neben seiner Webseite (gammanla.wordpress.com) hat der Fachausschuss einen Twitter Account (@gamm_anla) mit etwa 400 Followern. Auf Twitter findet man unter anderem Konferenzankündigungen, Fotos und Berichte unserer Aktivitäten.
Jährlich richtet der ANLA Fachausschuss einen Workshop aus. Nachdem der Workshop 2020 aufgrund der Corona-Pandemie in einem reduzierten Online-Format stattfand, konnte der diesjährige Workshop am 16. und 17. September 2021 in Präsenz an der Universität Potsdam abgehalten werden. Die lokalen Organisatoren waren Melina Freitag, Thomas Mach und Sylke Pfeiffer. Die Vorträge deckten eine breite Themenvielfalt im Bereich der Angewandten und Numerischen Linearen Algebra ab. Am Abend des ersten Workshop-Tages fand wie üblich ein Business-Meeting des Fachausschusses statt. Da die momentanen Vorsitzenden des Fachausschusses zum Ende des Jahres 2021 ihre Aufgabe abgeben, wurde eine Neuwahl abgehalten, in der Melina Freitag (Universität Potsdam) und Erin Carson (Charles University Prague) als zukünftige Vorsitzende des Fachausschusses gewählt wurden.
Wie üblich war der ANLA Fachausschuss bei der Organisation der GAMM Jahrestagung 2021, welche online gehalten wurde, involviert. Insbesondere hielt die gemeinsam mit dem CSE Fachausschuss vorgeschlagene Laura Grigori (INRIA Paris) einen Hauptvortrag zur Lösung von Problemen der linearen Algebra mittels Randomisierung und unter Vermeidung von Kommunikation. Die von Kirk Soodhalter (Trinity College Dublin), Kathryn Lund (Charles University Prague) und John Pearson (University of Edinburgh) organisierte Sektion hatte 17 Vorträge zu ANLA-relevanten Themen. Zudem organisierten Stefano Massei (EPF Lausanne) und Davide Palitta (MPI Magdeburg) ein Young Researchers Minisymposium zu Rang-strukturierten Matrizen und Tensoren.

JAHRESBERICHT 2021 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# COMPUTATIONAL BIOMECHANICS

Tim Ricken

Silvia Budday

Oliver Röhrle

Der 2018 gegründete Fachausschuss hat zum Ziel, die vielfältigen Aktivitäten im Bereich der rechnergestützten Biomechanik aktiv zu unterstützen und eine gemeinsame Plattform zu bieten. Neben fachauschussspezifischen GAMM-Tagungen, gehören hierzu auch die Organisation von Minisymposien auf wissenschaftlichen Tagungen, die Unterstützung laufender oder geplanter strukturierter Forschungsinitiativen und die Verbreitung von für die rechnergestützte Biomechanik relevanten Informationen.
Vergangene Aktivitäten:

- SPP 2311: Das von mehreren GAMM-Fachausschuss-Biomechanik-Mitgliedern initiierte und 2021 genehmigte Schwerpunktprogramm „Robuste Kopplung kontinuumsbiomechanischer in-silico-Modelle für aktive biologische Systeme als Vorstufe klinischer Applikationen - Co-Design von Modellierung, Numerik und Nutzbarkeit“ (https://www.spp2311.uni-stuttgart.de/) hat seine Arbeit aufgenommen. Ziel des Schwerpunktprogramms ist es, methodische Grundlagen aus Modellierung, Numerik und Anwendung in einem starken Co-Design zu entwickeln. Zur Fokussierung soll sich das Programm auf Kopplungsstrategien für „aktive“ biologische Systeme konzentrieren. Damit versteht sich das SPP als methodisch orientierte Qualifizierung biomechanischer Simulationsmodelle aktiver Systeme für den späteren Einsatz in medizinischen Fragestellungen. Initiatoren sind Oliver Röhrle (Koordinator, Stuttgart), Tim Ricken (stellv. Koordinator, Stuttgart), Rainer Bader (Rostock), Silvia Budday (Erlangen) und Axel Klawonn (Köln). Das Kick-Off-Meeting fand am 04.02.2022 virtuell statt, das SPP-Jahrestreffen soll, wenn möglich, in Präsenz am 23./24.5.2022 in Stuttgart stattfinden.

- DFG Forschungsgruppe QuaLiPerF (FOR 5151): Die Forschungsgruppe QuaLiPerF (https://qualiperf.de/) entwickelt ein kontinuumsbiomechanisches Modell der Durchblutung und Funktion der Leber mit großer räumlicher Auflösung und direkter Kopplung mit systembiologischen Modellen. Ziel ist es, die Auswirkungen einer Resektion und Regeneration der Leber auf die Perfusion und Stoffwechselfunktion aufzuklären (Sprecherin: Professorin Dr. med. Uta Dahmen, Universitätsklinikum Jena). Das Kick-Off Meeting fand vom 02.-03.11.2021 in Jena statt. Das nächste Treffen findet vom 25.-27.04.2022 wenn möglich in Präsenz in Stuttgart statt, das Jahrestreffen 2022 ist für den Herbst in Jena geplant.

*Kick-Off Meeting der FOR 5151 in Jena*

- WCCM 2020/21: Das auf der WCCM 2020/21 vom Vorstand des Ausschusses organisierte Minisymposium “Computational Modeling of Active Biological Systems” wurde in digitaler Form vom 11. - 15.01.2021 durchgeführt. Im Rahmen des Möglichen war es ein Erfolg, dennoch freuen wir uns auf Präsenztagungen im Jahr 2022, um den so wichtigen wissenschaftlichen Austausch auch wieder persönlich ermöglichen zu können.

Für 2022 weisen wir auf folgende Veranstaltungen hin:

- GAMM FA Bio 2022, Stuttgart: Der dritte Workshop des GAMM-Fachausschusses „Computational Biomechanics“ wird im Sommer 2022 wenn möglich in Präsenz in Stuttgart stattfinden. Der Termin wird bekanntgegeben, sobald eine sichere Planung möglich ist. 2021 ist der Workshop aufgrund der Coronapandemie ausgefallen.

- WCCM 2022, Yokohama, Japan: Der Vorstand des Ausschusses organisiert auf dem “15th World Congress on Computational Mechanics (WCCM XV)” vom 31.07. – 05.08.2022 das Minisymposium 422 “Computational Continuum Biomechanics”. Das Minisymposium wird, wenn möglich, in Präsenz in Yokohama (Japan) stattfinden (https://www.wccm2022.org/minisymposia0422.html).

- ECCOMAS 2022, Oslo, Norwegen: Ebenfalls vom Vorstand des Ausschusses organisiert wird das Minisymposium 37 “Continuum Biomechanics of Active Systems” auf dem “8th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering”. Das Minisymposium wird, wenn möglich, in Präsenz in Oslo (Norwegen) stattfinden (https://www.eccomas2022.org/admin/Files/FileAbstract/MS37.pdf).

## JAHRESBERICHT 2021 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# COMPUTATIONAL SCIENCE AND ENGINEERING (CSE)

Andrea Walther

Christian Hesch

Matthias Bolten

Der 2012 gegründete Fachausschuss “Computational Science and Engineering” (kurz: “CSE”) ist der Verknüpfung von Mathematik und Informatik mit den Ingenieur- und Naturwissenschaften gewidmet. Die im Fachausschuss versammelten 109 Kolleginnen und Kollegen wollen technische oder natürliche Phänomene – häufig auf Hochleistungsrechnern – simulieren und benötigen dazu vielfältige Werkzeuge aus den beteiligten Disziplinen.
Am 13. November 2020 fand - Pandemie bedingt - das Herbsttreffen des Fachausschusses CSE via ZOOM statt. Hier wurde beschlossen, einen virtuellen Workshop im Januar zu organisieren, der sich insbesondere an junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler richtet und durch die Sprecher des Fachausschusses koordiniert wird. In Anbetracht der Situation des Nachwuchses, der zu diesem Zeitpunkt darunter leidet, kaum Möglichkeiten zur Vernetzung oder Vorträgen zu haben, wurden Vorträge von (Post-) Doktorandinnen und Doktoranden auf dem Workshop Vorrang gegeben. Bis zu 25 Personen haben an den insgesamt 14 Vorträgen an drei aufeinanderfolgenden Freitagen teilgenommen.
Anfang März fand die SIAM CSE Tagung statt, in deren Organisationskomitee mit Barbara Wohlmuth ein Mitglied des Fachausschusses mitgewirkt hat. Weiter hat sich der Fachausschuss wie in den vergangenen Jahren auch an der Organisation der Sektion 22 “Scientific Computing” bei der Jahrestagung beteiligt. Die Sektion wurde durch zwei der Sprecher, Matthias Bolten und Christian Hesch, organisiert und sie umfasste wie in den vergangenen Jahren zahlreiche Vorträge von Mitgliedern und Nichtmitgliedern des Fachausschusses. Ferner hat auf der GAMM 2020@21 mit Laura Grigori eine Hauptvortragende gesprochen, die mit vom Fachausschuss vorgeschlagen wurde und deren Forschung im Bereich der angewandten Mathematik in hohem Maße für CSE relevant ist.
Auf dem Herbsttreffen des Fachausschusses CSE am 12. November 2021 wurde beschlossen, dass auch im Jahr 2022 wieder ein Workshop organisiert wird. Des Weiteren wurde die von der GAMM vorgesehene Beendigung des Fachausschusses diskutiert und die Möglichkeit einer simultanen Neugründung 2023 besprochen. Hierfür treffen die Sprecher im Jahr 2022 entsprechende Vorbereitungen.

## JAHRESBERICHT 2021 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# DATA-DRIVEN MODELING AND NUMERICAL SIMULATION OF MICRO-STRUCTURED MATERIALS (AG DATA)

Benjamin Klusemann

Felix Fritzen

Der GAMM Fachausschuss Data-driven modeling and numerical simulation of microstructured materials (AG Data) hat das Ziel die vielfältigen Aktivitäten aus den Bereichen der datengetriebenen Modellierung, des maschinellen Lernens und der Mehrskalen-Simulation von komplexen Materialien und Verbundwerkstoffen innerhalb der GAMM zu bündeln. In 2021 war ein Präsenzmeeting in Stuttgart geplant. Dieses Treffen konnte aufgrund der Pandemie nicht realisiert werden. Daher wurde am 15. Dezember 2021 ein innovativer Online-Workshop durchgeführt. Kurze Impulsvorträge flankierten ausgedehnte digitale Postersessions, die in einer virtuellen Umgebung mit lokalen Gesprächsrunden stattfanden. Dadurch fand eine intensive Interaktion zwischen den Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern der AG Data in einer entspannten Atmosphäre statt (Organisation F. Fritzen, B. Klusemann).

In 2022 wird sich die GAMM AG Data wieder intensiv an der Organisation von Minisymposien auf Tagungen engagieren. Das nächste eigene Meeting der AG Data wird in Präsenz voraussichtlich im Sommer 2022 in Stuttgart stattfinden. Die Organisation wird erfreulicher Weise von Tim Ricken und Mitarbeitern übernommen. Zukünftig ist vorgesehen, zusätzlich zum jährlichen Präsenz-/Hybrid-Meeting einen Onlineworkshop anzubieten. Alle weiteren relevanten Informationen werden zeitnah über die Homepage und die Mailingliste der GAMM AG Data bekanntgegeben.

Homepage:
https://www.mib.uni-stuttgart.de/dae/ag-data
Mailingliste: Mail an fritzen@mib.uni-stuttgart.de.

## JAHRESBERICHT 2021 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# PHASENFELDMODELLIERUNG

Laura De Lorenzis

Bernd Markert

Der Fachausschuss Phasenfeldmodellierung ist eine interdisziplinäre Zusammensetzung von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern aus den Bereichen Mathematik, Materialwissenschaft und Mechanik. Das thematische Spektrum umfasst Formulierungen für Erstarrungsvorgänge und allgemeine Phasentransformationen, sowie Modellierungsansätze in Gebieten wie Bruchmechanik, Benetzung und Topologieoptimierung, und deren numerische Umsetzung. Aufgrund der Corona-Pandemie haben im Jahr 2021 kein GAMM-Workshop und keine weiteren Veranstaltungen stattgefunden. Wegen der aktuell unsicheren Situation ist auch für 2022 kein GAMM-Workshop geplant.

## JAHRESBERICHT 2021 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# UNCERTAINTY QUANTIFICATION (UQ)

Claudia Schillings

Tim Sullivan

Der Fachausschuss Uncertainty Quantification (FA UQ) fördert den wissenschaftlichen Austausch zur Quantifizierung von Unsicherheiten in technisch-wissenschaftlichen Berechnungen und vertritt dieses Fachgebiet innerhalb der GAMM. Die AGUQ zählt aktuell 126 Mitglieder; Mitgliedschaft kann jederzeit beantragt werden per E-Mail an gamm-uq@zib.de. Aktuelle Informationen finden sich unter http://gamm-ag-uq.zib.de und werden auch über den eigenen Mailverteiler an die Mitglieder*innen verschickt.

Bei der Jahrestagung in 2021 wurde die Sektion von Andrea Barth (U Stuttgart) und Philipp Petersen (Universität Wien) organisiert. Insgesamt fanden 25 Vorträge zu den Themengebieten „Machine Learning and Inverse Problems“, „(Multilevel) Monte Carlo Methods“, „Stochastic Analysis and Processes“, „Uncertain Problems“, and „Applications“ statt.

Im Februar 2021 fand zudem ein online BIRS Workshop zum Thema „Optimization under Uncertainty: Learning and Decision Making“, organisiert von Johannes Royset (Naval Postgraduate School), Lars Ruthotto (Emory University), Claudia Schillings (U Mannheim), Thomas Surowiec (Philipps-Universität Marburg) statt.

Vom 24. bis 29. Oktober 2021 fand im Schloss Dagstuhl (Leibniz-Zentrum für Informatik) ein von Philipp Hennig (U Tübingen), Ilse Ipsen (North Carolina Statue University), Maren Mahsereci (U Tübingen) und Tim Sullivan (U Warwick) organisiertes Dagstuhl-Seminar unter dem Titel „Probabilistic Numerical Methods – From Theory to Implementation“ statt. Wie viele andere Veranstaltungen im Jahr 2021 erfolgte das Seminar aufgrund der Covid-Pandemie im Hybrid-Modus: es gab ca. 18 Teilnehmer vor Ort im Schloss und 26 Teilnehmer über Zoom. Die probabilistische Numerik (PN) nimmt eine statistische Perspektive auf numerischen Problemen (Quadratur, die Lösung von gewöhnlichen und partiellen Differentialgleichungen, u.s.w.) ein, und ist in den jüngsten 5 bis 10 Jahren ein aktives, interdisziplinäres Forschungsgebiet geworden, in dem Mathematik, Statistik, maschinelles Lernen einander treffen und beeinflussen. Hauptziel des Seminars war, nicht nur die jüngste theoretische Fortschritte mitzuteilen, sondern auch konkrete Beiträge zu stabilen Implementierungen solcher Methoden (in z.B. Python und Julia) gemeinsam zu schaffen.

Für den wissenschaftlichen Nachwuchs im Bereich Uncertainty Quantification gab es eine Session zu „Uncertainty Quantification of differential equations with random parameters: methods and applications“, 6th ECCOMAS Young Investigators Conference. Organisatoren waren Claudia Schillings (U Mannheim), Björn Sprungk (TU Freiberg) und Lorenzo Tamellini (CNR-IMATI). Mit 23 Beiträgen fand hier ein reger Austausch zum Thema Uncertainty Quantification statt. Zudem war der FA UQ bei der CEMRACS 2021 Sommerschule zu „Data Assimilation and Reduced Modeling for High Dimensional Problems“ mit Claudia Schillings als Dozentin beteiligt.

Termine in 2022

- GAMM Jahrestagung 2022 in Aachen.
- FA UQ Treffen bei der Jahrestagung 2022 in Aachen.
- SIAM Conference on Uncertainty Quantification (April 12-15, 2022)

## JAHRESBERICHT 2021 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# EXPERIMENTELLE FESTKÖRPERMECHANIK

Stefan Hartmann

Stefan Diebels

Der GAMM-Fachausschuss Experimentelle Festkörpermechanik traf sich im Jahr 2021 zweimal per Videokonferenz. Der Nachteil der fehlenden Präsenz und der wichtigen Nebeninformationen im persönlichen Gespräch wurde kompensiert durch eine rege Beteiligung vieler Zuhörer. Im Februar fand die erste Online-Konferenz zum Thema Thermographie statt, bei der Vorträge über die Kopplung von Bildkorrelationsverfahren und Thermographiesystemen und deren Einfluss auf die Modellierung und Identifikation beigetragen wurden.
Darüber hinaus bereicherte der Impulsvortrag von Herrn Professor Chris Eberl (Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik, Freiburg) zum Thema „Vision und Ansätze der NFDI-MatWerk zur Digitalen Transformation in der Materialwissenschaft, Werkstofftechnologie und Mechanik“ den Workshop.
Die Organisation des ersten Online-Fachausschuss übernahm die Arbeitsgruppe aus Saarbrücken geleitet durch Professor Stefan Diebels.

Das zweite Treffen im Oktober 2021 organisierte das Team von Professor Thomas Böhlke (KIT). Das Oberthema behandelte spezielle Verfahren zur thermischen und mechanischen Analyse von Polymeren (aber auch Metallen), wie LFA (laser flash analysis), DSC (differential scanning calorimetry), DMA (dynamic mechanical analysis), Hot Disc Methode, … Neben der eigentlichen Anwendung lag in einigen Vorträgen der Fokus auf den Modellen, die in der Auswertung der Messverfahren ihre Verwendung finden.
Zwischenzeitlich ist der Antrag des NFDI-Konsortiums NFDI-MatWerk für die Materialwissenschaft & Werkstofftechnik (Nationale Forschungsdateninfrastruktur, nfdi-matwerk.de), mit dem die GAMM bislang durch die beiden Fachausschüsse Data-driven modeling and numerical simulation for microstructured materials und Experimentelle Festkörpermechanik kooperiert, positiv beurteilt worden und wird damit zukünftig gefördert. Die Kooperation mit der GAMM ist explizit erwünscht und soll vertieft werden.

## JAHRESBERICHT 2021 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# COMPUTATIONAL AND MATHEMATICAL METHODS IN DATA SCIENCE

Gitta Kutyniok

Martin Stoll

Der Fachausschuss Computational and Mathematical Methods in Data Science (COMinDS) wurde im März 2019 ins Leben gerufen und hat zur Zeit nahezu 200 Mitglieder aus mehr als 20 verschiedenen Ländern.
Aufgrund der enormen Bedeutung des Fachgebietes Data Science ist es das Ziel des Fachauschusses die enormen Datenmengen aus allen wissenschaftlichen, sowie industriellen Gebieten mit mathematischen Methoden effizient und nachvollziehbar zu untersuchen.
Ein wichtiges erklärtes Ziel bleibt die Unterstützung von Nachwuchswissenschaftlern/innen und die Verbesserung von interdisziplinärer Forschung. Dazu dient die Webseite der AG als zentrale Kommunikationsplattform, mit einem Job- und Konferenz-Forum.
Im Jahr 2021 fand ein Young Researchers Seminar mit Hauptredner Lars Ruthotto (Emory University) zu *A Machine Learning Framework for Mean Field Games and Optimal Control* statt, das neben der Präsentation von Postern und Vorträgen der Nachwuchswissenschaftler auch dem Erfahrungsaustausch und der Vernetzung dienen soll.
Das von G. Kutyniok aus unserer Fachgruppe erfolgreich eingeworbene DFG Schwerpunktprogramm „Theoretical Foundations of Deep Learning“ (SPP 2298) hat in 2021 seine Arbeit aufgenommen und wir hoffen das eine Rückkehr zu mehr wissenschaftlicher Normalität in 2022 viele Veranstaltungen im Rahmen des Fachauschusses angeboten werden.
Zusätzliche Informationen zu diesen und weiteren Aktivitäten des Fachausschusses sind auf der Seite www.tu-chemnitz.de/mathematik/wire/cominds/ zu finden. Bei Interesse laden wir jeden herzlich dazu ein, Mitglied zu werden.

JAHRESBERICHT 2021 DES GAMM-FACHAUSSCHUSSES

# MODERNE LEHRE UND DIDAKTIK

Thorsten Bartel

Der im August 2021 eingerichtete Fachausschuss „Moderne Lehre und Didaktik in der Mathematik und Mechanik“ stellt sich der seit Jahren wachsenden Herausforderung einer stetig zunehmenden Heterogenität der Studierenden bezüglich der jeweiligen Vorkenntnisse, der intrinsischen Eigenmotivation, der individuellen Lerngeschwindigkeiten, etc. Elementare Gründe hierfür sind u.a., dass in den Lehrveranstaltungen häufig keine spezifischen Lernziele genannt und die Bedeutung der Lehrinhalte für den späteren Beruf nicht explizit adressiert werden. Mitunter weisen die Lernziele auch eine eher kleine Schnittmenge mit aktuellen und zukunftsweisenden beruflichen Anforderungen auf. Die bisherigen didaktischen Methoden – oder auch teilweise das Fehlen solcher – hemmen die Motivation vieler Student*innen so stark, dass es ihnen gar nicht möglich ist, dringend benötigte Kompetenzen zu erlangen.

Das Ziel unseres Fachausschusses ist daher die gemeinsame Neu-Gestaltung der universitären Ausbildung in den Bereichen Mathematik und Mechanik auf Basis fundierter und moderner didaktischer Konzepte. Dies umfasst viele Facetten und beinhaltet u.a. Aspekte, die von Lerntheorien über Flipped-Classroom-Konzepte bis hin zu kompetenzorientierten Prüfungsformaten reichen. Ein Fokus liegt dabei auch auf der Adaption der Lehre an aktuelle und stark auf Digitalisierung ausgerichtete Bedarfe – sowohl in der (reinen) Anwendung als auch der Forschung und Entwicklung. Ein wesentlicher Aspekt ist zudem die Orientierung an „Open Educational Resources“, kurz: OER, also gemeinsam entwickelten Lern- und Lehrmaterialien, die flächendeckend an verschiedenen Standorten auf die jeweilig gewünschten Ausbildungsstufen angepasst genutzt werden können.

Als „Kick-Off“ unseres neuen Fachausschusses fand ein sehr konstruktives und motivierendes Treffen am 09.11.2021 statt, bei dem wir die bestehenden Herausforderungen zusammengefasst haben, die sich unserer Erfahrung nach seit vielen Jahren quasi aufgetürmt haben. Zudem haben wir gemeinsam die allgemeinen und nächsten konkreten Ziele definiert sowie die inhaltliche Gestaltung der nächsten Treffen festgelegt. Diese werden wir demnach ein Mal pro Quartal durchführen und inhaltlich einen ersten theoretischen Teil durch „Good-Practice“-Beispiele von wechselnden Vortragenden ergänzen.

Dem entsprechend fand bereits am 08.02.2022 das nächste Treffen statt, indem wir verschiedene Lerntheorien besprochen haben und welche Prozesse im Gehirn Lernen überhaupt ermöglichen bzw. auch erleichtern können. Das Good-Practice-Beispiel wurde von Prof. Dennis Kochmann von der ETH Zürich beigesteuert und zeigte, wie man Konzepte wie „Peer Instruction“ und „Flipped Classroom“ sinnvoll und zielführend in Vorlesungen einbetten kann. Das nächste Treffen ist für Mitte Mai geplant.

Sollten Sie Interesse an einem Austausch haben, laden wir Sie gerne zu den Treffen ein. Kontaktieren Sie uns einfach über thorsten.bartel@udo.edu. Weitere Informationen finden Sie auch unter https://www.im.mb.tu-dortmund.de/cms/de/GAMM/GAMM-FA-Didaktik/index.html

# MITGLIED WERDEN!

Foto: Peter Ulrich Hein

# GAMM Members:

## Join 14,000+ of your peers in applied mathematics and computational science when you join SIAM!

### As a SIAM Member, you'll get:

- Subscriptions to *SIAM News*, *SIAM Review*, and *SIAM Unwrapped* e-newsletter
- Discounts on SIAM books, journals, and conferences
- Eligibility to join SIAM Activity Groups
- 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

### 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

*"SIAM is the premier professional society for applied and computational mathematicians. It serves the research community through its excellent publications, conferences, and activity groups, and SIAM Student Chapters provide great opportunities for career development. It is an honor to serve as President during 2021–2022. I hope that you will join me in supporting SIAM as a member."*

Susanne C. Brenner, SIAM President and Boyd Professor, Louisiana State University

## Join SIAM today at *siam.org/joinsiam*

GAMM members who live outside the U.S. get a reciprocal member rate that is 30% less than the regular member rate, **plus** your GAMM dues are discounted to 65€.

siam | **Society for Industrial and Applied Mathematics**
3600 Market Street, 6th Floor, Philadelphia, PA 19104-2688 USA
Phone: +1-215-382-9800 · membership@siam.org · www.siam.org

10/21

# DIE MATHEMATISCHE FORSCHUNGSDATENINITIATIVE IN DER NFDI: MARDI (MATHEMATICAL RESEARCH DATA INITIATIVE)

VON P. BENNER[1], M. BURGER[2], D. GÖDDEKE[3], C. GÖRGEN[4], C. HIMPE[5], M. HINTERMÜLLER[6] J. HEILAND[1], T. KOPRUCKI[6], M. OHLBERGER[5], S. RAVE[5], M. REIDELBACH[7], J. SAAK[1], A. SCHÖBEL[2], K. TABELOW[6], M. WEBER[7]

## Einleitung

Im Oktober 2021 fiel der Startschuss für MaRDI, die Forschungsdateninitiative der Mathematik *(Mathematical Research Data Initiative)*. Nach fast dreijähriger Vorbereitungszeit unter Koordination von Michael Hintermüller und seinem Team am Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS) in Berlin erhielt MaRDI [1,2] im vergangenen Sommer den positiven Förderbescheid als Konsortium in der zweiten Ausschreibungsrunde zum Aufbau der Nationalen Forschungsdateninfrastruktur (NFDI) [3]. MaRDI bildet aktuell ein Netzwerk aus 25 Partnern. Dazu zählen Universitäten, Institute der Fraunhofer-Gesellschaft, der Max-Planck-Gesellschaft, der Leibniz-Gemeinschaft sowie die Fachgesellschaften DMV, GAMM, GOR und die *European Mathematical Society* (EMS), als auch Partner an mathematisch orientierten Exzellenzclustern. Als Erstes stand Anfang November 2021 ein Kick-off Workshop auf dem Programm. Drei Tage lang trafen sich alle Beteiligten im hybriden Format am Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften in Leipzig für ein gemeinsames persönliches Kennenlernen der neuen Mitarbeiter*innen, für Berichte zum Stand der Vorarbeiten, zur Festlegung von Prioritäten und zu einer Diskussion der nächsten Ziele der sieben Arbeitsbereiche *(Task Areas* - kurz TAs) des Konsortiums. Besondere Höhepunkte waren die Diskussionsrunden mit Vertretern der Verlage SpringerNature und EMS Press, ein Austausch mit dem Mentorkonsortium NFDI4Ing [8] sowie ein Nachmittag, an dem junge Wissenschaftler*innen aus ihrem Forschungsalltag und ihren Erfahrungen im Umgang mit mathematischen Forschungsdaten berichteten.

Die Ziele des MaRDI-Konsortiums sind ambitioniert und müssen der großen Vielfalt der mathematischen Forschungsdaten gerecht werden. Das Spektrum reicht hier von Formeln oder Listen von mathematischen Objekten, über Modelle, Algorithmen, bis hin zu Software, Datenbanken, Visualisierungen und mathematischen Dokumenten. Beim Erstellen von Standards und beim Aufbau von Services für die Datennutzung muss dieser Diversität Rechnung getragen werden. Zugleich verlangen auch die fachlichen Überschneidungen mit Partnerdisziplinen wie der Physik, den Bio-, Chemie- oder Ingenieurwissenschaften, aber auch den Lebens- und Humanwissenschaften eine angepasste und gemeinsame Entwicklung. Die übergreifende Zielstellung in MaRDI wie auch den anderen Konsortien in der NFDI ist es dabei, Forschungsdaten FAIR [4] zu machen: Sie sollen auffindbar *(findable),* zugänglich *(accessible),* interoperabel *(interoperable)* und wiederverwendbar *(reusable)* sein. Was dies in der Praxis bedeutet, kann jedoch je nach Fachdisziplin oder den spezifischen Forschungsdaten sehr unterschiedlich sein. Nicht zuletzt deshalb verfolgt MaRDI einen bottom-up Ansatz und hat sich eine Struktur gegeben, die sich an der Art der mathematischen Daten und dem Umgang damit orientiert: Das Konsortium basiert auf den vier exemplarischen, fachlichen Säulen Computeralgebra, Wissenschaftliches Rechnen, Statistik und maschinelles Lernen sowie auf interdisziplinärer Mathematik. Diese Teildisziplinen decken wichtige Bereiche der mathematischen Forschung und ihrer Nutzung ab. Auch spiegelt diese Struktur die unterschiedlichen Datenkategorien wider, die sich grob in exakte Daten, Fließkommadaten, Daten mit Unsicherheiten und Daten, wie sie in der interdisziplinären Forschung auftreten, einteilen lassen. Mit dem MaRDI-Portal wird eine Infrastruktur aufgebaut, die die systematische Sicherung, Erschließung und Nutzbarmachung von FAIRen mathematischen Forschungsdaten über dezentrale und vernetzte Wissens- und Datenspeicher ermöglicht und den gesamten Forschungsprozess unterstützt.

Der Aufbau der NFDI als Ganzes und einer Infrastruktur für die Mathematik im Speziellen erfordert ebenso die Entwicklung und Verankerung einer Datenkultur mit dem Ziel der Anerkennung mathematischer Forschungsdaten und -software als eigener, zitierfähiger Resultate. MaRDI fördert diesen Prozess mit dem eigenen Arbeitsbereich *Data Culture and Community Integration,* der nationaler Kontaktpunkt für Ausbildung und Umgang mit mathematischen Forschungsdaten werden soll. Dem Mathematischen Forschungsinstitut Oberwolfach (MFO), der Imaginary gGmbH wie auch den Fachgesellschaften kommt dabei eine besondere Rolle zu.

Das MaRDI NFDI Konsortium ist in sieben Arbeitsbereiche aufgeteilt. Im Folgenden stellen wir hier zwei dieser Arbeitsgebiete vor, die wesentliche Berührungspunkte mit der GAMM aufweisen. Namentlich sind dies *Scientific Computing* (TA2) und *Cooperation with Other Disciplines* (TA4). Die weiteren Task Areas *Computer Algebra* (TA1), *Statistics and Machine Learning* (TA3), *MaRDI Portal* (TA5), *Data Culture and Community Integration* (TA6) sowie *Governance* (TA7) werden z.B. auf der MaRDI Webseite https://mardi4nfdi.de beschrieben, siehe auch [5].

1 Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme, Magdeburg
2 Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM, Kaiserlauern
3 Institut für Angewandte Analysis und Numerische Simulation, Universität Stuttgart
4 Fakultät für Mathematik und Informatik, Universität Leipzig
5 Fachbereich Mathematik und Informatik, WWU Münster
6 Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik WIAS, Berlin
7 Zuse-Institut Berlin

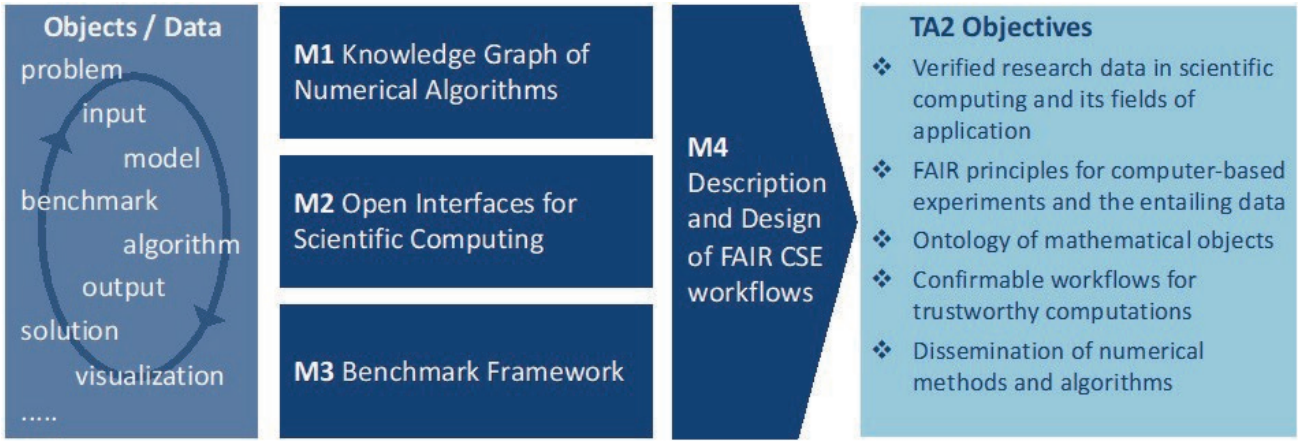



*Abb. 1: Struktur der TA2 - Objekte und Daten des Wissenschaftlichen Rechnens werden innerhalb der Maßnahmen M1-M3 FAIR aufbereitet, verknüpft und durch M4 in FAIRen CSE Workflows exemplarisch getestet.*

## TA2 – Scientific Computing

Die TA 2 Scientific Computing („Wissenschaftliches Rechnen“) fokussiert auf das Forschungsfeld zwischen den GAMM-relevanten Themengebieten Angewandte und Numerische Mathematik, Numerische Mechanik und *Computational Sciences and Engineering (CSE).* Dabei ist die mathematische Forschung ebenso gemeint wie anwendungsnahe Bereiche, in denen numerische Berechnungen eine Rolle spielen. Die hier anfallenden Forschungsdaten in Form von Simulationsergebnissen, Modellen, Algorithmen und Computerprogrammen, aber auch weitergehende Informationen wie Schnittstellendefinitionen, Verfahrensdaten und allgemein Metabeschreibungen gilt es zugänglich zu klassifizieren und nachhaltig zu archivieren.

Übergeordnetes Ziel der TA2 ist es, die FAIR-Prinzipien im Wissenschaftlichen Rechnen zu etablieren. Insbesondere sollen Simulationen, deren Beschreibungen und die entstandenen Daten FAIR dokumentiert und abgelegt werden. Als konkrete Maßnahmen entwickelt die TA2 auf die Zielgruppe zugeschnittene Infrastrukturen, die ein FAIRes Datenmanagement erleichtern. Gleichzeitig werden in der TA2 Projekte vorangetrieben, die einerseits eine mögliche direkte Umsetzung der Prinzipien veranschaulichen und andererseits unmittelbar die Vorteile FAIRer Datenvorhaltung aufzeigen. Ein solcher Vorteil liegt in der weitreichenden Interoperabilität und Vergleichbarkeit von (konkurrierenden) Algorithmen als auch deren Implementierungen. So können Forscher*innen wie Anwender*innen den effizientesten Algorithmus ermitteln oder der allgemeinen Entwicklung des Stands der Technik folgen. Weiterhin sind Interoperabilität und Verfügbarkeit zwei Grundpfeiler nachhaltiger wissenschaftlicher Softwareentwicklung [6].

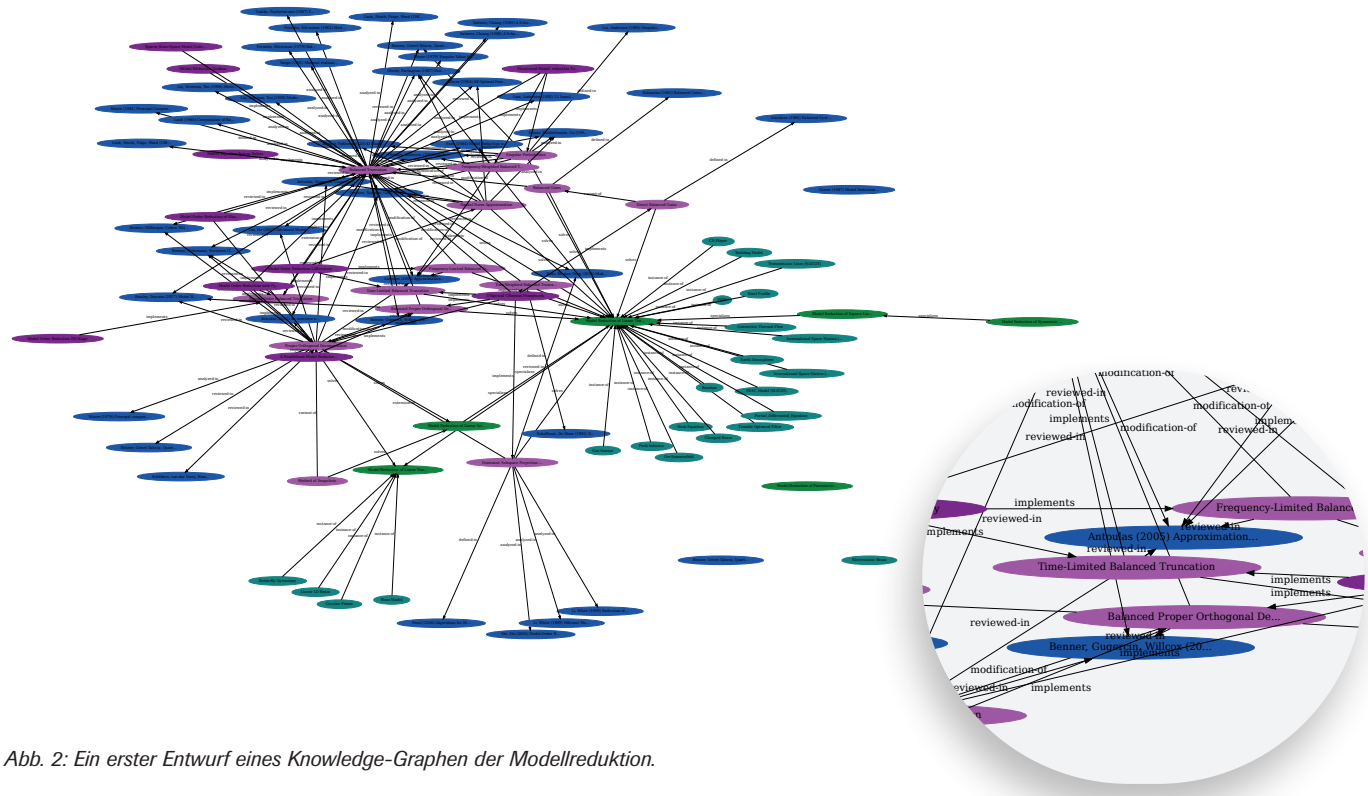



*Abb. 2: Ein erster Entwurf eines Knowledge-Graphen der Modellreduktion.*

In der TA2 wurden vier exemplarische Teilvorhaben als Maßnahmen *(Measures)* projektiert. Das Auffinden und Einordnen numerischer Algorithmen **(M1)**, das modulare Koppeln von Implementierungen **(M2)**, die Bewertung und Vergleichbarkeit von Implementierungen **(M3)**, sowie das systematische Beschreiben mehrstufiger Prozesse in den Simulationswissenschaften **(M4).**

Im Wissenschaftlichen Rechnen ergeben sich für Wissenschaftler*innen oftmals Fragen folgender Art: Für welche Problemklasse ist ein Algorithmus geeignet? In welcher Publikation wurde ein Algorithmus eingeführt? Welche numerische Software implementiert welche Algorithmen? Diese Fragen können meist nicht mit einfacher Textsuche bewältigt werden, aber mit Hilfe von Graphen-basierten Verknüpfungen von Metadaten numerischer Algorithmen. Solche Knowledge-Graphen für numerische Algorithmen werden in der Maßnahme **M1** ***(Algorithm Knowledge Graph)*** erstellt, kuratiert und zugänglich gemacht. Ein erstes Beispiel dazu ist in Abbildung 2 illustriert.

Die Komposition oder der Vergleich von Implementierungen numerischer Algorithmen erfordert dokumentierte Schnittstellen an Computerprogrammen und Programmbibliotheken. Im Umfeld eines Softwarepakets oder innerhalb einer Community existieren solche Schnittstellendefinitionen teilweise. Für eine fachübergreifende Modularität, insbesondere für numerische Basisprobleme abseits der numerischen linearen Algebra, fehlen solche Standardschnittstellen allerdings. In der Maßnahme **M2** ***(Open Interfaces)*** sollen in Zusammenarbeit mit der Community anhand von Leuchtturmprojekten solche Schnittstellenstandards erarbeitet und mit Hilfe eines neu entwickelten Toolkits programmiersprachenagnostisch implementiert werden.

Es werden laufend neue Algorithmen für immer kompliziertere Probleme entwickelt und auch implementiert. Während es Mathematiker*innen interessiert, wie gut sich neu entwickelte Methoden gegenüber konkurrierenden verhalten, möchten Anwender*innen erfahren wie gut sich Algorithmen für spezifische Probleme eignen. Beides lässt sich mit Benchmarkproblemen testen. Der in der Maßnahme **M3** ***(Benchmark Framework)*** entwickelte generischen Softwarerahmen ermöglicht dafür einen fairen Vergleich von numerischen Algorithmen anhand von wohldefinierten, kuratierten und FAIRen Benchmarkproblemen. Dies wird zunächst exemplarisch für das Forschungsgebiet der Modellreduktion anhand der bereits existierenden Plattform „MORwiki“ [7] entwickelt, soll aber später für andere interessierte Communities ausgerollt werden.

Praktische Simulationsprozesse entstehen aus der Komposition von Lösungen gekoppelter und hierarchischer numerischer Probleme unterschiedlicher Komplexität. Für die formale Beschreibung einer solchen Datenprozessierung, die unter anderem für die Überprüfbarkeit und Reproduzierbarkeit essentiell ist, fehlt im Gegensatz zu den in den Laborbüchern der Natur- und Ingenieurwissenschaften festgehaltenen Dokumentationen von Laborexperimenten eine (maschinenlesbare) Sprache sowie Standardvokabular. Um die Kommunikation innerhalb des Wissenschaftlichen Rechnens zu erleichtern, erarbeitet die Maßnahme **M4** ***(CSE Workflows)*** in Zusammenarbeit mit anderen NFDI Konsortien wie z.B. NFDI4Cat, NFDI4Ing, NFDI-MatWerk und FAIRmat Prozessbeschreibungswerkzeuge angelehnt an digitale Laborbücher.

## TA4 – Cooperation with Other Disciplines

Innerhalb des MaRDI-Konsortiums stellt die TA4 die Brücke dar zwischen Anwendungen der Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens aus anderen Disziplinen hinein in die mathematische Forschung, wie sie durch die ersten drei Task Areas repräsentiert wird. Diese Verbindung ist in beide Richtungen gleich wichtig, da sie einerseits Anwender*innen mathematischer Methoden einen FAIRen Zugriff auf neue Entwicklungen, Algorithmen und auch Implementierungen bietet, und andererseits Mathematiker*innen erlaubt, aktiv nach Anwendungsgebieten, Testfällen oder Benchmarks für ihre Forschung zu suchen. Somit reicht TA4 weit in die gesamte NFDI hinein, was den Grundlagenaspekt der Mathematik für zahlreiche Disziplinen widerspiegelt. Die Arbeiten sollen langfristig in das *MaRDI Portal for Interdisciplinary Exchange* münden, das den FAIRen Zugriff auf disziplinäre und innermathematische Datenbanken sowie Knowledge-Graphen auf niedrigschwellige Weise erlaubt.

1. Engineering, Material Science and High-Performance Computing
2. Theoretical and Bio-Chemistry
3. Digital Humanities
4. Digital Catalysis
5. Physics, Particle Physics and Heavy Ion Research
6. Neurosciences
7. Decision Science
8. Data-driven Mathematics, AI and Machine Learning

*Abb. 3: Die Case Studies der TA4.*

Da dieses Ziel nicht top-down erreicht werden kann, setzt MaRDI auf einen bottom-up Zugang. Auf der Basis des Fortschritts der Datenkultur in den unterschiedlichsten Disziplinen wurden insgesamt die acht in Abbildung 3 gelisteten Case Studies identifiziert. Exemplarisch werden im Folgenden zwei davon skizziert. Die erste, *Engineering, Material Science and High-Performance Computing,* betrifft zahlreiche Wirtschaftsbereiche wie die Automobilindustrie, Chemie- und Biotechnologie, sowie die Umwelttechnik, die letztendlich alle auf der effizienten Lösung von großen, mehrskaligen Multiphysik-Problemen beruhen. Diese sind nach Konstruktion bereits interdisziplinär und von höchster gesellschaftlicher Relevanz - sie spiegeln aktuelle Herausforderungen in der mathematischen Forschung wider, bspw. im Design von Materialien und Mikrostrukturen, von bioaktiven Materialien, oder im Verständnis von Grundwasserprozessen in porösen Medien. In der Zusammenarbeit mit den NFDI Konsortien NFDI4Ing [8], MatWerk [1,9] und dem noch in der Begutachtungsphase befindlichen Konsortium NFDIxCS [10] werden in der ersten Case Study

existierende und teilweise disziplinär bereits gut etablierte Datenkulturen zusammengeführt und substantiell erweitert, beginnend bspw. durch die Verknüpfung von Experimentaldaten [11] und genutzter Software nebst Eingabeparametern sowie Metadaten zur Laufzeit und Skalierbarkeit von Simulationsrechnungen auf HPC-Systemen mit eher mathematischen Aspekten wie Konvergenz, rigorose theoretische Rechtfertigung etc. Somit muss deutlich über rein deskriptive Metadaten hinausgegangen werden. Bereits die Diffusionsgleichung $\partial_t u + \Delta u = f$ verdeutlicht die Herausforderungen, da sie in zahlreichen Kontexten ein Teilproblem darstellt und disziplinär anders benannt wird.

Eine deutlich andere Facette der Mathematisierung berührt die gemeinsame Case Study mit NFDI4Culture in den *Digital Humanities.* Hier müssen oftmals Daten erst umfangreich aufbereitet werden, bevor erkannt werden kann, welche mathematischen und statistischen Methoden überhaupt zum Einsatz kommen können. Ein Beispiel dafür ist die Rekonstruktion früherer Ausgrabungsstätten anhand von Fotos, Tagebüchern und Listen. Erst nach umfangreicher Aufarbeitung der verschiedenen Datensätze erlauben Cluster-Algorithmen Rückschlüsse auf die ursprüngliche Anordnung der Fundstücke [12].

## Ausblick

Das MaRDI Konsortium ist jederzeit offen für neue Partner. Interessenten können sich an

community@mardi4nfdi.de

wenden, um Möglichkeiten der Mitarbeit oder Beratung zu diskutieren. Neben jährlichen Workshops sind regelmäßige Beiträge zu den GAMM und DMV Jahrestagungen geplant, sowie später, nach Etablierung der Einbettung in internationale Initiativen zum Forschungsdatenmanagement, die Präsenz bei relevanten internationalen Tagungen.

### Literatur


[1] P. Benner, S. Diebels. Die Rolle der GAMM beim Aufbau einer Nationalen Forschungsdateninfrastruktur. GAMM-Rundbrief 2/2019, S. 32-34, 2019.

[2] T. Koprucki, K. Tabelow & I. Kleinod, Mathematical research data. PAMM 16, S. 959-960, 2016. DOI: 10.1002/pamm.201610458

[3] N. Hartl, E. Wössner, Y. Sure-Vetter. Nationale Forschungsdateninfrastruktur (NFDI). Informatik Spektrum 44, S. 370–373, 2021. DOI: 10.1007/s00287-021-01392-6

[4] M. D. Wilkinson, M. Dumontier, I. J. Aalbersberg, G. Appleton, et al. The FAIR guiding principles for scientific data management and stewardship. Scientific Data 3 (160018), 2016. DOI: 10.1038/sdata.2016.18

[5] C. Görgen, R. Sinn, Mathematik in der Nationalen Forschungsdateninfrastruktur. Mitteilungen der Deutschen Mathematiker-Vereinigung 29(3), S. 122-123, 2021. DOI: 10.1515/dmvm-2021-0049

[6] J.Fehr, C.Himpe, S.Rave, J.Saak. Sustainable Research Hand-Over. Journal of Open Research Software 9(1), Art. 5, 2021. DOI: 10.5334/jors.307

[7] The MORwiki Community. MORwiki - Model Order Reduction Wiki. http://modelreduction.org

[8] National Research Data Infrastructure for Engineering Sciences. https://nfdi4ing.de/

[9] Nationale Forschungsdateninfrastruktur für Materialwissenschaft & Werkstofftechnik. https://nfdi-matwerk.de/

[10] National Research Data Infrastructure for and with Computer Science (NFDIxCS). https://nfdixcs.org/

[11] B. Schembera, D. Iglezakis. EngMeta – Metadata for Computational Engineering. International Journal of Metadata, Semantics and Ontologies 14, S. 26-38, 2020.

[12] L. Coulon: Nouvelles Perspectives Sur Les Decouvertes de Georges Legrain, Bibliotheque D'etude, Band 161, 2016.

# WISSENSCHAFTLICHE VERANSTALTUNGEN

**GAMM**
**Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik**
**http://www.gamm-ev.de**

**Tagungsjahr 2022**

92. GAMM Jahrestagung in Aachen
15.-19.08.2022
https://jahrestagung.gamm-ev.de/annual-meeting-2022/program/programme/

Angewandte Operatortheorie
https://www.mat.tuhh.de/gamm-ot/index.html

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

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

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

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

Computational Science and Engineering (CSE)
http://www.mb.uni-siegen.de/nm/gamm-cse/

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

Uncertainty Quantification
http://www.tu-chemnitz.de/gamm-uq

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

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

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

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

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

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

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

Computational Biomechanics
https://www.isd.uni-stuttgart.de/fabiomech

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

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

**IUTAM**
International Unionof Theoretical and Applied Mechanics
http://www.iutam.net

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

**EUROMECH**
European Mechanics Society
http://www.euromech.org

**EMS**
European Mathematical Society
http://www.euro-math-soc.eu/

**MFO**
Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach
http://www.mfo.de

**CISM**
International Centre for Mechanical Sciences
http://www.cism.it

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

# AUSSCHREIBUNG DES RICHARD-VON-MISES-PREISES DER GAMM 2023

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

Seit dem Jahr 1989 verleiht die GAMM jährlich den Richard-von-Mises-Preis für hervorragende wissenschaftliche Leistungen auf dem Gebiet der Angewandten Mathematik und Mechanik.
Traditionsgemäß erfolgt die Verleihung dieses Preises im Rahmen der Eröffnungsveranstaltung der Jahrestagung der GAMM.
Der Preisträger oder die Preisträgerin wird dazu seine/ihre Forschungsergebnisse in einem Hauptvortrag präsentieren.
Der Preis dient der Förderung jüngerer Wissenschaftler/ -innen, deren Forschungsarbeiten wesentliche Fortschritte im Bereich der Angewandten Mathematik und Mechanik darstellen. Der Preis beinhaltet eine Urkunde, eine kostenlose 2jährige Mitgliedschaft sowie ein Preisgeld in Höhe von 2000 Euro. Um die Breite des Bereichs der Angewandten Mathematik und Mechanik gerecht zu werden, kann das Preiskomitee eine Aufsplittung des Preises (und damit des Preisgeldes) zu gleichen Teilen auf zwei Personen beschließen.
Der oder die Preisträger/ -in soll zum Zeitpunkt der Nominierung weder eine Lebenszeitprofessur bekleiden noch einen Ruf auf eine solche vorliegen haben und nicht älter als 36 Jahre sein. Abweichungen von dem genannten Zeitrahmen infolge von Ausfallzeiten z.B. aus familiären Gründen oder aufgrund einer Behinderung oder Krankheit werden angerechnet. Die GAMM strebt an, dass unter den Richard-von-Mises-PreisträgerInnen die beiden Fachrichtungen Angewandte Mathematik und Mechanik gleichmäßig vertreten sind. Zudem wird eine angemessene Geschlechterverteilung angestrebt.
Vorschlagsberechtigt sind Hochschullehrer/ -innen und Personen in entsprechenden Stellungen in der Forschung. Auch die Möglichkeit der eigenen Bewerbung ist gegeben.
Vorschläge bzw. Bewerbungen sollten ein Begründungsschreiben und folgende Unterlagen des Kandidaten/ der Kandidatin enthalten:

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

Die Nominierungen sind an die Geschäftsstelle der GAMM in Dresden, vorzugsweise in elektronischer Form, zu schicken.
Der Einreichungstermin ist der **30. September 2022.**

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

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

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

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

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

Nominations can be made by university professors or academic persons in similar positions. Self nomination is accepted.
Nominations should contain a justification letter by the nominating persons and the following material concerning the nominee:

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

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

The deadline for nomination is
**September 30th, 2022.**

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

## Weitere Mitglieder des Vorstandsrates

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

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

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

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

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

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

**Prof. Benjamin Stamm**
RWTH Aachen University
Mathemathics
Schinkelstr. 2, 52062 Aachen

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

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

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

**Prof. Helmut Hetzler**
Universität Kassel,
Lehrstuhl für Technische Dynamik
Mönchebergstr. 7, 34125 Kassel

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

## Beratende Mitglieder des Vorstandsrates

**Prof. em. Dr. Götz Alefeld**
Karlsruher Institut für Technologie, Fakultät f. Mathematik,
Institut f. Angewandte Mathematik, Postfach 6980,
76049 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

## Kassenprüfer

**Prof. Michael Beitelschmidt**
Technische Universität Dresden,
Fakultät Maschinenwesen,
Marschnerstraße 30, 01307 Dresden

**Prof. Stefan Neukamm**
Technische Universität Dresden,
Institut für Wissenschaftliches Rechnen,
Zellescher Weg 12-14, 01069 Dresden

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

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

Prof. Dr.-Ing. Jürgen Zierep (1999)
† 29. Juli 2021

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

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

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

## PERSONALIA

Todesfälle, wir gedenken:
Prof. Constantin Popa, Constanta (Rumänien)
Prof. Dr. Radim Blaheta, Ostrava-Poruba (Tschechien)
Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Seemann, Karlsruhe
Prof. Dr. Wolfgang Bürger, Schorndorf

# SIAM leads the way in **Data Science**

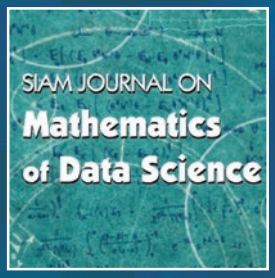
**Data science is a fast-moving and rapidly expanding research area, and SIAM is dedicated to providing ways to get involved.**

**Here's how:**

## Conference on Mathematics of Data Science

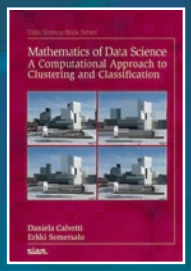
The next **SIAM Conference on Mathematics of Data Science** is planned for September 26–30, 2022. Visit siam.org/conferences for more information. SIAM members with a research interest in data science can also join the **SIAM Activity Group on Data Science (SIAG/DATA)** when they renew their SIAM membership at *my.siam.org*.

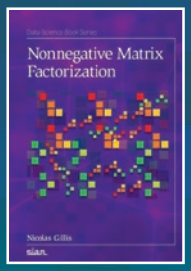
## SIAM Journal on Mathematics of Data Science




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

## Data Science Book Series




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

siam®
Society for Industrial and Applied Mathematics

Learn more about data science and how you can get involved:
***siam.org/Research-Areas/Data-Science***