

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin



Jahresbericht 1993

Herausgegeben vom
Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin
Heilbronner Str. 10
D-10711 Berlin-Wilmersdorf
Telefon: 030-89604-0
Telefax: 030-89604-125
e-mail : bibliothek@sc.zib-berlin.de

Verantwortlich: Dr. Klaus André

Umschlagsatz und Druck: Rabe KG Buch- und Offsetdruck Berlin

ISSN 0934-5892

Inhaltsverzeichnis

1	Vorbemerkung	1
2	Das ZIB – Aufgaben und Ziele	3
3	Forschung und Entwicklung	7
3.1	Zusammenfassung	7
3.2	Grundlagenprojekte	11
	CCG-Methoden für elliptische partielle Differentialgleichungen	11
	Adaptive Multilevel-Finite-Elemente-Methoden in drei Raumdimensionen	13
	Adaptive Multilevel-Methoden zur Lösung freier Randwertprobleme	15
	Abstrakte Gebietszerlegungsmethoden	17
	Approximative Gauß-Newton-Verfahren	18
	Adaptive h - p -Methoden für Randwertprobleme	19
	Diskrete transparente Randbedingungen für die Schrödingergleichung	23
	Adaptive Galerkinmethoden für die PDF-Transportgleichung turbulenter, reaktiver Strömungen	25
	Quasiresonante Glättung bei Lösung der Schrödingergleichung	26
	Entwicklung adaptiver Multilevelverfahren zur Lösung von Reaktions-Diffusionsgleichungen	28
	Software-Implementierung adaptiver Multilevel FE-Methoden	30
	Extrapolationsverfahren für sehr große Systeme von gewöhnlichen Differentialgleichungen	31
	Adaptive Linienmethoden für parabolische Systeme in einer Raumdimension	32
	Pfadverfolgung für große parameterabhängige nichtlineare Probleme	33
	Mehrparametrische Gleichungssysteme	34
	Dünnbesetzte Gleichungssysteme	36
	Abgebrochene Laurent- und Puiseuxreihen in der Computeralgebra	37
	Effiziente Berechnung orthogonaler Polynome	39
	Unendliche Laurent- und Puiseuxreihen in der Computeralgebra	40
	Algorithmische Methoden für spezielle Funktionen und orthogonale Polynome	41
	Symbolische Lösung algebraischer Gleichungssysteme	43
	Weiterentwicklung von REDUCE	44
	Kalkülsystem für Probleme der Optimalen Steuerung	45
	Entwicklung eines parallelen Branch-and-Cut-Frameworks zur Lösung großer kombinatorischer Optimierungsprobleme	46

	Parallele LU Zerlegung sehr dünn besetzter Matrizen	48
	Visualisierung zweidimensionaler Vektorfelder	49
	Volumen-Visualisierung	51
	Gittermethoden für die ganzzahlige Programmierung	53
	Polytope, Triangulationen und Computer-Algebra	54
	Schnitte und Mehrfach-Schnitte in Hypergraphen	56
	Clusteringprobleme in Graphen	58
	Approximation und Stabilität stochastischer Optimierungsprobleme	60
	Switchbox-Verdrahtung im Manhattan-Modell	62
	Packen von Wegen und Steinerbäumen in Graphen	63
	Optimierung von Aufzugssteuerungen	64
3.3	Anwendungsprojekte	65
	Hyperthermie-Planung	65
	Unterstützung der Hyperthermieplanung durch Verfahren der Com- putergrafik	67
	Effiziente numerische Simulation in der chemischen Reaktionstechnik	69
	Wellenausbreitung in Komponenten der Integrierten Optik	71
	Thermo-inelastische Werkstoffmodellierung für Baustahl im Hochtem- peraturbereich	73
	Adaptive Finite-Elemente-Methoden zur Berechnung von Eigen- werten der Schrödinger-Gleichung in der Quantenchemie	75
	Numerische Simulation von Relaxationsoszillationen in Lasern	76
	Bericht über die Weiterentwicklung von L ^A T _E X	78
	Quantenchromodynamik (QCD) auf massiv-parallelem Rechner	79
	Entwicklung informationstechnischer Werkzeuge für die Museums- dokumentation	80
	Fahrzeugeinsatzplanungsprobleme	81
	Fahrzeugumlaufplanung im Öffentlichen Personennahverkehr	82
	Kapazitätserweiterung in ausfallsicheren Netzwerken	83
	Fahrzeugeinsatzplanung im Behindertentransport	85
	Ausfallsichere Telekommunikationsnetzwerke mit hohen Zusam- menhangsanforderungen	87
	Asymmetrische Travelling Salesman Probleme mit Präzedenzrela- tionen	88
	Optimierung von Flexiblen Fertigungssystemen	89
	Animation vom Simulationsmodellen	91
	Stochastische Optimierung und angewandte Wahrscheinlichkeits- theorie	93
	Optimale Blockauswahl bei der Kraftwerkseinsatzplanung	95
4	Wissenschaftliche Dienstleistungen	97
	Das DMV-Projekt "Fachinformation" – Status und Perspektiven	97
	Das elektronische Diskussionsforum Opt-Net	99

Elektronische Bibliothek eLib für mathematische Software	100
Einsatz der Informationstechnik im Museum	102
Visualisierungsservice	103
Paralleles und verteiltes Rechnen	105
Daten- und Programmsammlung für den Bereich Mathematical Programming / Kombinatorische Optimierung	106
5 Rechenzentrum	107
5.1 Aufgaben und Organisation	107
5.2 Ausbau des Landeshöchstleistungsrechners	107
5.2.1 Ausbaupläne	107
5.2.2 Hardware-Ausbau im Berichtszeitraum	109
5.2.3 Software-Ausbau im Berichtszeitraum	110
5.3 Nutzung des Landeshöchstleistungsrechners	113
5.3.1 Norddeutscher Vektorrechnerverbund (NVV) — wechselseitige Rechnernutzung	113
5.3.2 Projekte mit großem Rechenzeitverbrauch	115
5.4 Konfiguration	118
5.5 Beteiligung des ZIB an der Planung des Berliner Metropolitan Area Network (MAN)	119
5.6 Interne Dienstleistungen des Rechenzentrums	120
6 Publikationen	122
6.1 Preprints	122
6.2 Technical Reports	132
6.3 Beiträge in Zeitschriften	137
6.4 Monographien	142
Numerische Mathematik II. Integration gewöhnlicher Differential- gleichungen.	142
Mathematik mit DERIVE	145
Höhere Analysis mit DERIVE	147
Schnitte und Partitionierungen	148
Lectures on Polytopes	149
6.5 Diplomarbeiten	150
6.6 Auszeichnungen	151
6.7 Herausgabe von Zeitschriften	151
7 Produkte	152
7.1 REDUCE/PSL	152
7.2 GOS	152
7.3 Symbolische Verfahren	152
7.3.1 POWERSERIES	152
7.3.2 FPS	152

7.4	code++	152
7.5	CODELIB	153
7.5.1	Große nichtsymmetrische lineare Gleichungssysteme	154
7.5.2	Nichtlineare Gleichungssysteme und Ausgleichsrechnung	154
7.5.3	Lösung von Anfangswertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen	154
7.5.4	Lösung von Randwertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen	155
7.5.5	Stationäre partielle Differentialgleichungen	155
7.5.6	Instationäre partielle Differentialgleichungen	155
7.5.7	Freie Randwertprobleme für partielle Differentialgleichungen	155
7.5.8	Gemischt symbolisch-numerische Verfahren	155
8	Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern	156
8.1	Vorträge und Gastaufenthalte	156
8.2	Vorlesungen und Seminare	167
8.3	Mitveranstalter von auswärtigen Tagungen	168
9	Gäste am ZIB	170
9.1	Gastvorträge	170
9.2	Gastaufenthalte	173
9.3	Tagungen und Veranstaltungen des ZIB	175
10	Organisatorisches	177
10.1	Organe	177
10.2	Satzung	177
10.3	Wissenschaftlicher Beirat	177
10.4	Mitgliedschaften	178
10.5	ZIB-Fellows	178
10.6	Selbstverwaltung	179
10.7	Wirtschaftliche Situation	179
10.8	Personelle Entwicklung	180
11	Ansprechpartner	181

1 Vorbemerkung

Das Berichtsjahr 1993 brachte für das Konrad-Zuse-Zentrum in vielfacher Hinsicht einen institutionellen Ausbau. So wurde eine Erweiterung des Verwaltungsrates um Mitglieder der Humboldt-Universität zu Berlin und des Max-Delbrück-Centrums für Molekulare Medizin beschlossen, womit auch das ZIB seine gesamtdeutsche Vereinigung vollzieht. Der Wissenschaftliche Beirat wurde neu etabliert, um dem derzeitigen wissenschaftlichen Profil gerecht zu werden. Der im vergangenen Jahr beschlossene Zulassungsausschuß für die Vergabe von Rechenzeit hat seine Arbeit aufgenommen, womit nun auch der vom ZIB betriebene Berliner Landeshöchstleistungsrechner unter anerkannter fachlicher Zugangskontrolle steht.

Im Bereich **Forschung und Entwicklung** wurde die bisherige erfolgreiche Arbeit mit neuen Ideen erfolgreich fortgesetzt. Als Schlaglichter für 1993 seien hier nur exemplarisch genannt: die Verleihung des Carl-Ramsauer-Preises der AEG für eine am ZIB angefertigte Dissertation (M. Weismantel, Abteilung *Kombinatorische Optimierung*); die Mitwirkung der Abteilungen *Numerik*, *Numerische Software-Entwicklung* und *Visualisierung* bei der Gründung eines Sonderforschungsbereiches ("Hyperthermie: Methodik und Klinik"), der im Februar 94 positiv begutachtet worden ist; die Mitwirkung der Abteilungen *Numerik* und *Symbolik* bei der Gründung eines DFG-Schwerpunktes ("Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme"). Die Kooperationen des ZIB mit der Industrie haben erfreulich expandiert. Darüber hinaus leistete die Abteilung *Software-Information* wichtige Beiträge bei der informationstechnischen Vernetzung der deutschen Mathematischen Institute und Bibliotheken und nahm aktiv teil an der rasanten Entwicklung des elektronischen Publizierens.

Der Bereich **Rechenzentrum** beteiligte sich gemeinsam mit dem Landesamt für Informationstechnik - LIT - (Senatsverwaltung für Inneres) an der geplanten Realisierung eines landeseigenen Glasfasernetzes für ein künftiges MAN der Wissenschaft in Berlin. Noch in 1994 soll der Betrieb zwischen ZIB, TUB und HUB aufgenommen werden. Im DFN-Projekt "Regionales Testbed Berlin" hat das ZIB die Projektleitung. Im Rahmen des Projektes werden auf diesem Glasfasernetz zukunftsweisende Anwendungen zwischen ZIB und den Universitäten erprobt, die mit den derzeitigen Netzverbindungen (2Mb/s) nicht realisiert werden können. Dieses Projekt ist zugleich ein erfreuliches Beispiel für die erfolgreiche Zusammenarbeit aller Bereiche des ZIB.

Natürlich beruht der Erfolg des Ganzen auf der Aktivität und den guten Ideen der einzelnen Mitglieder des Hauses sowie auf der Konsensfähigkeit seiner Entscheidungsgremien. Mögen diese Grundsäulen dem ZIB auch in Zukunft erhalten bleiben. Nur dann können wir hoffen, die dem ZIB und dem Land Berlin bevorstehenden mageren Jahre ohne Substanzverlust zu überstehen. Mit diesem Wunsch überreichen wir diesen Jahresbericht an unsere Freunde, Gönner und Interessenten.

Berlin, im Juni 1994

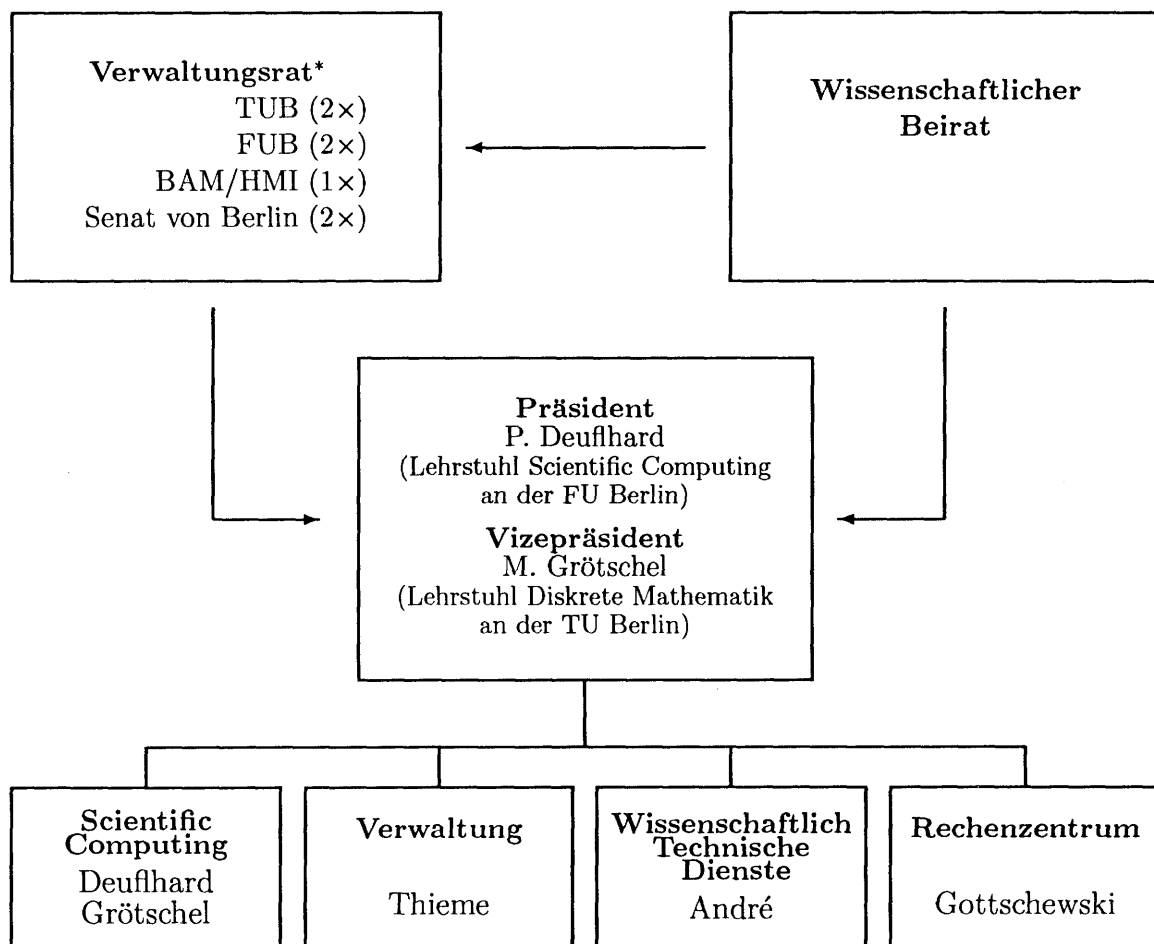
A handwritten signature in black ink, reading "P. Deuffhard". The letters are cursive and somewhat stylized, with a large 'P' and a long, sweeping 'd'.

Prof. Dr. P. Deuffhard
Präsident

2 Das ZIB – Aufgaben und Ziele

Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin ist eine außeruniversitäre Forschungseinrichtung des Landes Berlin. Es betreibt in enger fächerübergreifender Kooperation mit den Hochschulen und wissenschaftlichen Einrichtungen in Berlin Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Informationstechnik, vorzugsweise in anwendungsorientierter algorithmischer Mathematik. Zugleich bietet es Höchstleistungsrechnerkapazität als dazugehörige Dienstleistung an. Das ZIB wurde 1984 durch Gesetz als Anstalt des öffentlichen Rechts gegründet.

Struktur des ZIB



*Der Verwaltungsrat hat empfohlen, die Beteiligung der HUB und des Max-Delbrück-Centrums für Molekulare Medizin am ZIB durch die dafür erforderliche Gesetzesänderung einzuleiten.

Forschung und Entwicklung: Scientific Computing

Schwerpunkt der Forschungs- und Entwicklungsarbeiten des ZIB ist das Gebiet *Scientific Computing*. Dieses Gebiet umfaßt

- die theoretische Analyse mathematischer Modelle, welche komplexe naturwissenschaftliche, technische, gesellschaftliche oder ökonomische Prozesse oder Phänomene beschreiben
- die Entwicklung effizienter Algorithmen zur numerischen Simulation oder Optimierung derartiger Modelle
- die Umsetzung der Algorithmen in leistungsfähige Computercodes.

Theorie- und Algorithmenentwicklung, die rechentechnische Erprobung der Algorithmen an leistungsfähigen Computern und der Test der mathematischen Modelle auf ihre praktische Brauchbarkeit sollen dabei eine Synthese eingehen.

Anwendungsbezogene Forschung, Kooperationen

Das ZIB leistet Beiträge zur Lösung drängender Fragen in Wissenschaft, Technik, Umwelt oder Gesellschaft, die mit herkömmlichen Methoden nicht gelöst werden können, aber mathematischer Analyse zugänglich sind. Der Anteil des ZIB besteht dabei in der Entwicklung innovativer Algorithmen und dem Einsatz von Höchstleistungsrechnern in enger Zusammenarbeit mit Partnern aus Wissenschaft, Wirtschaft und Gesellschaft. Neben Kooperationen mit wissenschaftlichen Einrichtungen betreibt das ZIB zur Zeit gemeinsame Projekte mit Partnern aus den Bereichen: Telekommunikation, Gesundheitswesen, öffentlicher Nahverkehr, Chemie-, Elektro- und Computerindustrie, Maschinen- und Fahrzeugbau. Das ZIB ist für die Durchführung weiterer wissenschaftlicher Projekte offen.

Supercomputing als Dienstleistung

Das ZIB betreibt Höchstleistungsrechner (sogenannte Supercomputer, derzeit des Herstellers CRAY) als Dienstleistung für Hochschulen und wissenschaftliche Einrichtungen im Land Berlin. Diese Kapazität steht in begrenztem Umfang auch Benutzern aus allen anderen, insbesondere den neuen Bundesländern zur Verfügung. Das ZIB übernimmt dabei die fachspezifische Beratung und Betreuung von Benutzern ausgewählter wissenschaftlicher Disziplinen sowie die Entwicklung, Bereitstellung und Pflege der erforderlichen Softwareprodukte. Im Rahmen von Kooperationen können Anwender aus Industrie und anderen Bereichen auf die Höchstleistungsrechner des ZIB zugreifen.

Gliederung des Bereiches Scientific Computing

Die Forschungs- und Entwicklungsarbeit des ZIB wird in den Bereichen *Numerisch-symbolische Methoden* und *Diskrete Methoden* geleistet.

Numerisch-symbolische Methoden

Abteilung Numerik. Aufgabe ist die Forschung und Entwicklung im Bereich der algorithmisch orientierten Numerischen Mathematik. Die Arbeit konzentriert sich auf *adaptive Multilevel-Algorithmen* für gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen mit Schwerpunkt große und nichtlineare Systeme.

Abteilung Numerische Software-Entwicklung. Aufgabe ist die Entwicklung von Anwenderprogrammen aus Forschungscode, welche am ZIB entstanden sind. Schwerpunkte sind *effektive* Implementierungen und *anwenderfreundliche* Systeme. Die Abteilung betreut die Programmbibliothek CodeLib.

Abteilung Symbolik. Aufgabe ist die Entwicklung von effektiven und anwendungsorientierten Verfahren für die Bearbeitung symbolischer Datenstrukturen. Schwerpunkte sind Algorithmen der Computeralgebra, gemischt symbolisch-numerische Verfahren und technische Expertensysteme. Die Abteilung ist an der Entwicklung des Computeralgebrasystems REDUCE beteiligt.

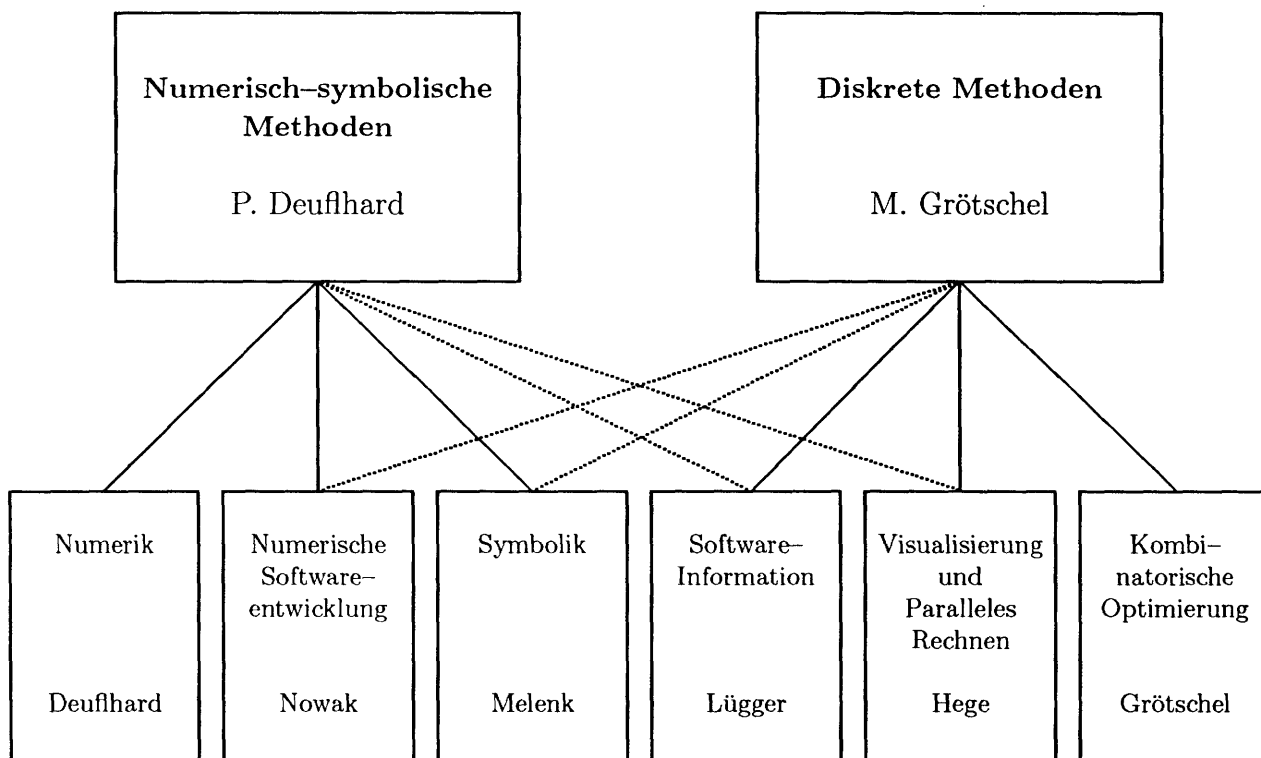
Diskrete Methoden

Abteilung Kombinatorische Optimierung. Der Schwerpunkt der Forschung liegt im Bereich *Algorithmische Diskrete Mathematik*, bei der Untersuchung praxisrelevanter, schwieriger ("NP-schwerer") kombinatorischer Optimierungsprobleme. Ziel ist die mathematische Analyse der hier auftretenden Modelle und – darauf aufbauend – die Entwicklung und Implementierung effizienter Verfahren. Der Algorithmenentwurf konzentriert sich derzeit auf Schnittebenen- und Branch&Cut-Verfahren. Diese werden durch Heuristiken – möglichst mit Gütegarantien – zur approximativen Lösung sehr großer Anwendungsfälle ergänzt.

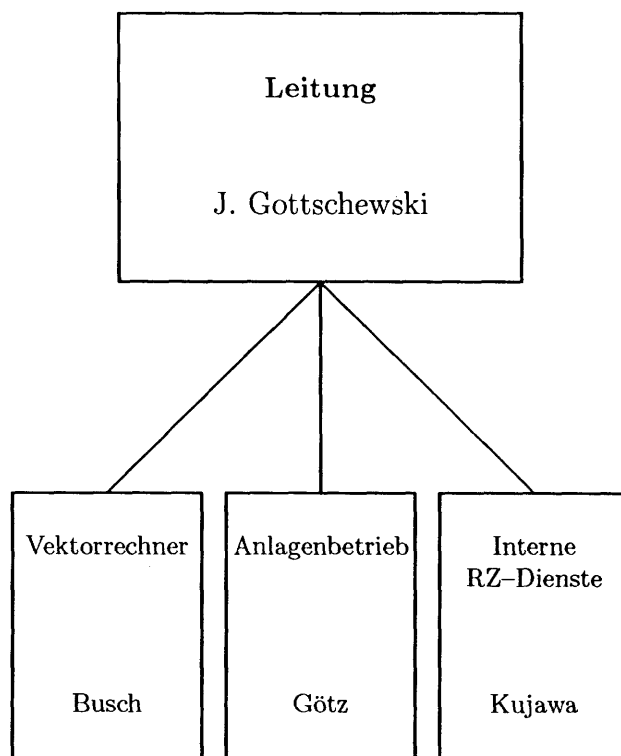
Abteilung Visualisierung und Paralleles Rechnen. Aufgabe der Gruppe Visualisierung ist die Entwicklung und Implementierung von Darstellungsmethoden der wissenschaftlichen Visualisierung, die Bereitstellung geeigneter Visualisierungs-Hardware und -Software sowie die Unterstützung hausinterner Anwender. Aufgabe der Gruppe Paralleles Rechnen ist die Entwicklung und Implementierung von parallelen Algorithmen aus den Gebieten diskrete und numerische Mathematik sowie wissenschaftliche Visualisierung. Schwerpunkte sind nichtuniforme Probleme, adaptive Methoden und Algorithmen der kombinatorischen Optimierung.

Abteilung Software-Information. Aufgaben sind die Entwicklung und der Einsatz der eLib und der Knoten von netlib und REDUCE Network Library. Als Dienstleistung für mathematische Fachbereiche und Institutionen in Deutschland wird hier auch das Projekt "Fachinformation" der Deutschen Mathematiker-Vereinigung fachlich begleitet und durchgeführt.

Bereich Scientific Computing



Bereich Rechenzentrum



3 Forschung und Entwicklung

3.1 Zusammenfassung

Zur Orientierung innerhalb der Fülle der anschließend dargestellten Einzelprojekte sollen vorab die wichtigsten Fortschritte im Bereich Forschung und Entwicklung zusammengefaßt und eingeordnet werden.

Im Bereich **Numerisch-symbolische Methoden** — mit den Abteilungen *Numerik*, *Numerische Software-Entwicklung* und *Symbolik* — wurden im Berichtszeitraum drei übergeordnete Großprojekte verfolgt: (I) Adaptive Multilevel Finite-Elemente-Methoden für partielle Differentialgleichungen, (II) Numerik dynamischer Systeme, (III) Computeranalysis.

Das Großprojekt *Adaptive Multilevel-Methoden* war 1993 wiederum wie in den vergangenen Jahren äußerst erfolgreich. Für elliptische Probleme wurden neuartige CCG-Methoden vorgeschlagen, die innerhalb des Kaskadenprinzips *ohne* Vorkonditionierung auskommen, was zu einer beträchtlichen Vereinfachung der Programmstrukturen führt und somit interessante Perspektiven für wesentlich kompliziertere Probleme eröffnet. Für beschränkte elliptische Probleme, etwa Probleme mit internen *freien* Rändern, entstanden *monotone Mehrgitterverfahren*, die asymptotisch die gleichen optimalen Konvergenzeigenschaften haben wie im unbeschränkten Fall — bei garantierter Konvergenz während der Auflösungsphase der freien Ränder. Im 3-D wurden billig implementierbare Schätzmethoden für den Diskretisierungsfehler unter neuen theoretischen Gesichtspunkten analysiert und eine robuste Modifikation vorgeschlagen, die nur geringfügig höheren Aufwand im Vergleich mit den bisher verwendeten kantenorientierten Schätzern verlangt. Im Berichtszeitraum gelang zudem der Einstieg in die adaptiven Multilevel-Methoden für *nichtlineare* Randwertprobleme: zunächst wurden adaptive Newton-Multilevel-Methoden auf der Basis von Kollokation in 1-D zu einer ersten Reife entwickelt. Sie wurden überdies sogar in der anspruchsvollen h-p-Variante realisiert. In 2-D und 3-D erfordern h-p-Finite-Elemente-Methoden neuartige polynomiale Basen, um volle Adaptivität zu gestatten; solche Polynombasen wurden hergeleitet. Nichtlineare zeitabhängige Differentialgleichungen vom parabolischen Typus wurden in 1-D volladaptiven Linienmethoden sowie in 2-D mit adaptiven FEM äußerst effizient gelöst. Beide methodischen Varianten werden inzwischen in der chemischen Industrie sowie in der Automobilindustrie konkret angewandt. Sie wurden innerhalb der Arbeitsgemeinschaft TECFLAM auch 1993 vom BMFT gefördert; dies gilt in gleicher Weise für Arbeiten über eine Verbesserung der PDF-Modellierung der Turbulenz. Fortschritte des Großprojektes gingen ferner unmittelbar ein in die technologische Entwicklung innerhalb der Integrierten Optik und führten dort mit Beginn 94 zu einer vom BMFT geförderten Kooperation mit der Industrie und dem Heinrich-Hertz-Institut in Berlin. Vorarbeiten zur FEM-Simulation eines hochmodernen Brandofens der

Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) sind 1993 angelaufen. Schließlich spielen die adaptiven ML-FEM eine anerkannt wichtige Rolle innerhalb des Sonderforschungsbereiches "Hyperthermie: Methodik und Klinik", der im Februar 94 positiv begutachtet worden ist und hoffentlich in Kürze seine offizielle Arbeit aufnehmen kann. In diesem Rahmen hat sich eine vorzügliche Kooperation mit der Abteilung *Visualisierung und Parallelisierung* entwickelt, da die Visualisierung der Simulationen für Zwecke der medizinischen Interpretation im engen Zusammenwirken mit der Diskretisierung der auftretenden partiellen Differentialgleichungen zu geschehen hat. Leider sind die Vorbereitungen für einen weiteren Sonderforschungsbereich über "Mathematik und Simulation technologischer Modelle" nicht weiter gediehen, da das bisherige Konzept (obwohl positiv bewertet in der Beratungsrunde) derzeit hauptsächlich von zwei außeruniversitären Instituten (ZIB, IAAS) getragen wird, während die Universitäten bei der Besetzung neuer und dem Erhalt bestehender Lehrstühle im interessierenden Bereich eine Tendenz zur Erfolglosigkeit an den Tag legen; solche konzeptionellen Versäumnisse der Universitäten führen zu nachhaltigen Konsequenzen!

Das Großprojekt *Numerik dynamischer Systeme* kam im Berichtszeitraum ebenfalls ein erfreuliches Stück voran. Die Berechnung parameterabhängiger nichtlinearer Oszillationen in realistischen Anwendungen (Hochgeschwindigkeitszüge, elektrische Schaltkreise) kann nun auf drei methodisch unterschiedlichen Wegen (Mehrzielmethode, Kollokation, in Entwicklung: Fourier-Methode) effektiv durchgeführt werden, wobei die Wahl der Methode von der Anwendung abhängt. Eine der theoretischen Grundlagen für diese verschiedenen Diskretisierungsmethoden sind die 1993 neu vorgestellten "inexakten" Gauß-Newton-Methoden, die auch im Rahmen der h-p-Kollokation fruchtbar geworden sind. Der stationäre Fall wurde durch die Entwicklung von Software speziell für große Systeme ebenfalls in realistischer Dimension lösbar — im Kontext industrieller Probleme der Schaltkreissimulation. Eine neue Problemklasse, nämlich hochoszillatorische Differentialgleichungen aus der Quantenchemie, wurde im Berichtszeitraum wesentlich effektiver berechenbar mit Hilfe einer (nichtlinearen) quasi-resonanten Glättungsmethode, die im ZIB entstanden ist; hier entwickelte sich eine fruchtbare Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe J. Manz (Fachbereich Chemie der FUB). Darüber hinaus hat sich die Kooperation von Numerik und Symbolik gerade innerhalb dieses Großprojektes gut weiterentwickelt. Ein Ausfluß dieser Entwicklung sind Untersuchungen über die mathematische Modellierung von Modenwechselwirkungen sowie die Lösung von mehrparametrischen, zum Teil dünnbesiedelten polynomialen Gleichungssystemen. Diese und andere Vorarbeiten haben sicherlich dazu beigetragen, daß 1993 die Initiative zu einem DFG-Schwerpunkt "Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme" unter Federführung von B. Fiedler (Fachbereich Mathematik der FUB) und aktiver Beteiligung des ZIB gegen harte Konkurrenz und trotz knapper öffentlicher Kassen erfolgreich war. Das Programm soll 1994 anlaufen. Im gleichen Zusammenhang ist auch die intensive Arbeit an Band II eines Lehrbuches zur Numerik gewöhn-

licher Differentialgleichungen zu sehen, in dem eine begriffliche Vereinheitlichung der Konzepte der Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen und der Analysis dynamischer Systeme angestrebt wird.

Im Großprojekt *Computeranalysis* wurden 1993 in enger Kooperation, zum Teil in Personalunion, mit der bewährten Computeralgebra-Gruppe innerhalb des ZIB neue Wege beschritten. Reihenentwicklungen bis hin zu unendlichen Reihen sowie eine dringend notwendige mathematisch-symbolische Aufarbeitung orthogonaler Polynome standen im Vordergrund. Erste Erfolge sind bereits sichtbar — mit Konsequenzen auch für gewichtete Galerkin-Methoden, die früher schon bei der Simulation von Polyreaktionen der Chemietechnik extrem erfolgreich waren. Diese und vergleichbare Aktivitäten haben Auswirkungen nicht nur in der Forschung, sondern gerade auch in der universitären Lehre — was sich in zwei Lehrbüchern aus diesem Umfeld niedergeschlagen hat.

Der Bereich **Diskrete Methoden** — bestehend aus den Abteilungen *Kombinatorische Optimierung, Software-Information, Visualisierung und Paralleles Rechnen* — konnte im Berichtszeitraum das Spektrum seiner Forschungsaktivitäten weiter vergrößern. Insbesondere ermöglichten Drittmittel der Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung des Landes Berlin, der DFG, des BMFT sowie von industriellen Partnern (z.B. Cray, Norwegian Telekom) die Aufnahme neuer Forschungsprojekte und die Beschäftigung weiterer wissenschaftlicher Mitarbeiter.

Der Bereich ist auf europäischer Ebene mit sechs Partner-Institutionen aktiv in einem Twinning-Projekt im SCIENCE-Programm der EG verbunden. Auf nationaler Ebene beteiligt er sich im Rahmen des DFG-Schwerpunktes "Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung" und leitet das durch das BMFT geförderte Projekt "Fachinformationen in der Mathematik". Darüber hinaus wirkten die Abteilungen des Bereichs Diskrete Methoden bei der Gestaltung des Graduiertenkollegs "Algorithmische Diskrete Mathematik" und der Tagungen "Berliner Algorithmen-Tag", Veranstaltungen, die in Zusammenarbeit mit HU, FU und TU stattfinden, mit.

Ein wesentlicher Teil der Forschungsaktivitäten des Bereichs erstreckt sich auf die Modellierung praxisrelevanter Probleme, die theoretische Analyse der Modelle und anschließende algorithmische Umsetzung dieser Erkenntnisse zur Lösung realer Beispiele.

War bisher das ZIB nur eng mit der TU und FU Berlin verbunden, so ist im Berichtsjahr erstmals eine engere Verzahnung mit der Humboldt Universität erreicht worden. Unter Einsatz von Fördermitteln des Senators für Wissenschaft und Forschung und Projektmitteln des ZIB ist in Zusammenarbeit mit zwei Kollegen der HU eine Arbeitsgruppe mit dem Thema "Stochastische Optimierung und angewandte Wahrscheinlichkeitstheorie" gebildet worden, die aus vier ehemaligen Mitarbeitern der HU besteht und 1993 ihre Tätigkeit am ZIB aufgenommen hat. Auf diese Weise ist es gelungen, das Forschungsspektrum des Bereichs auf das

Gebiet der stochastischen nichtlinearen Optimierung auszudehnen.

In dem Berichtszeitraum wurden insbesondere folgende praxisrelevante Probleme untersucht: Fahrzeugeinsatzplanungsprobleme im Rahmen des Behindertentransports, Fahrzeugumlaufplanungsprobleme für den öffentlichen Nahverkehr, die Kapazitätsplanung für kostengünstige und ausfallsichere Telekommunikationsnetzwerke, Verdrahtungsprobleme im Rahmen des Entwurfs elektronischer Schaltungen und die optimale Blockauswahl bei der Kraftwerkseinsatzplanung.

Zum Teil motiviert durch solche Fragestellungen wurden im Berichtszeitraum verschiedene mathematische Grundlagenprojekte weiter vorangetrieben. Dabei richteten sich die Hauptanstrengungen auf die Erschließung verschiedener Methodiken der stochastischen Optimierung, der algebraischen Zahlentheorie und der Polyedertheorie für obige Fragestellungen. Untersucht wurden insbesondere folgende Themen: Gittermethoden der ganzzahligen Optimierung, Packung von Wegen in Graphen, Schnittprobleme in Graphen und Hypergraphen mit zusätzlichen Nebenbedingungen, sowie Untersuchungen zur Approximation und Stabilität stochastischer Optimierungsprobleme.

An der Entwicklung allgemeiner Methodiken zur Lösung schwerer kombinatorischer oder stochastischer Optimierungsprobleme sind viele Mitarbeiter des Bereichs *Diskrete Methoden* beteiligt. Im Vordergrund steht die Ausarbeitung eines Frameworks für Schnittebenen- und Branch&Cut-Verfahren, welches auf Parallelrechnern bereitgestellt werden soll. Daneben werden zahlreiche Einzelimplementierungen von Schnittebenenverfahren für spezielle kombinatorische Optimierungsprobleme, LP-basierte Heuristiken und Separationsalgorithmen entworfen, welche zur Lösung praxisrelevanter Fragestellungen eingesetzt werden.

Im Berichtszeitraum ist von der Abteilung *Software-Information* in Zusammenarbeit mit der Fachgruppe Optimierung der DMV das moderierte Diskussionsforum OPT-NET eingerichtet worden. Dieses elektronische Netzwerk hat inzwischen weltweite Akzeptanz gefunden und zählte zum Jahresende bereits über 500 Teilnehmer. Ähnlich erfolgreich ist auf nationaler Ebene das vom BMFT geförderte und von der DMV unterstützte Projekt "Fachinformation" abgelaufen. Alle 51 an diesem Projekt beteiligten Institutionen konnten den Aufbau ihrer technischen Infrastruktur abschließen. Die große Resonanz, welche dieses Projekt gefunden hat, motivierte die Projektleitung, das Fortsetzungsprojekt "Verteiltes Informationssystem für die Mathematik" zu konzipieren. Dieses wird inzwischen deutschlandweit und auch fachübergreifend diskutiert.

Als bereichsübergreifende Aktivität ist schließlich noch die Arbeit an einem **Film** über die Aufgaben und Ziele des ZIB hervorzuheben, durch welchen sich das Konrad-Zuse-Zentrum in breiterem Maße der Öffentlichkeit vorstellen wird.

3.2 Grundlagenprojekte

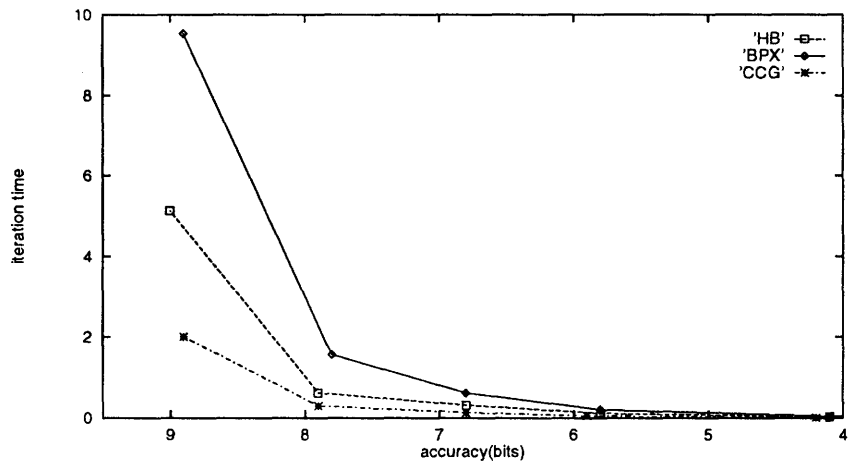
CCG–Methoden für elliptische partielle Differentialgleichungen

Bearbeiter: P. Deuffhard, R. Roitzsch, B. Erdmann, R. Beck

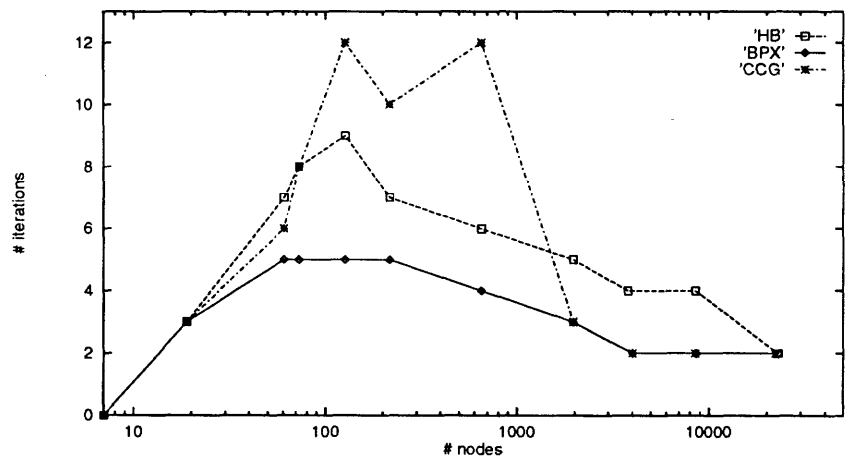
Beschreibung der Forschungsarbeit: Das von Deuffhard, Leinen, Yserentant 1989 entwickelte Kaskadenprinzip zur adaptiven Multilevel–Lösung von elliptischen Randwertproblemen besteht aus einer geschachtelten Folge von vorkonditionierten CG–Verfahren, die ausgehend von einer i.a. direkten Lösung auf dem Grundgitter sukzessive feinere Gitter erfaßt und die zugehörigen Gleichungssysteme löst. Die Besonderheit ist dabei, daß jeweils die Lösung des gröbereren Gitters auf das nächstfeinere Gitter durch Interpolation übergeben wird, wodurch besonders gute Startwerte für die CG–Iteration vorliegen. Bisher wurden als Vorkonditionierung verwendet: hierarchische Basen für 2–D Probleme, BPX–Vorkonditionierer für 3–D Probleme. Im Berichtszeitraum wurde entdeckt, daß das gesamte Kaskadenverfahren beschleunigt werden kann, indem man *keine* bzw. allenfalls eine *diagonale* Vorkonditionierung wählt. Dies muß allerdings einhergehen mit einer Modifikation der Genauigkeitssteuerung, die auf gröberen Gittern bereits auf die Genauigkeit für das feinste Gitter zielt. Das so entstehende Verfahren wurde CCG–Verfahren (Cascadic Conjugate Gradient method) genannt. Im Berichtszeitraum wurden zunächst der Algorithmus sowie erste numerische Resultate publiziert. In den Abbildungen 1 bis 3 sind die Ergebnisse für ein typisches Beispiel dargestellt (Laplace–Gleichung auf einem Hexagongebiet in 2–D mit punktförmiger Quelle, also eine Approximation der Greensfunktion). Es ergibt sich ein typisches Bild: Im mittleren Bereich ist die Anzahl an Iterationen mit BPX–Vorkonditionierung am geringsten, mit hierarchischen Basen (HB) in der Mitte, ohne Vorkonditionierung (reines CCG) am drittbesten. Asymptotisch jedoch ist CCG so gut wie BPX und sogar besser als HB. Dieses Verhalten wurde in einer Reihe weiterer Experimente auch in 3–D bestätigt, nahezu unabhängig von der Regularität der Lösung und sogar am ausgeprägtesten bei uniformer Verfeinerung. Eine theoretische Erklärung dieser Phänomene gelang erst in 1994.

Literatur

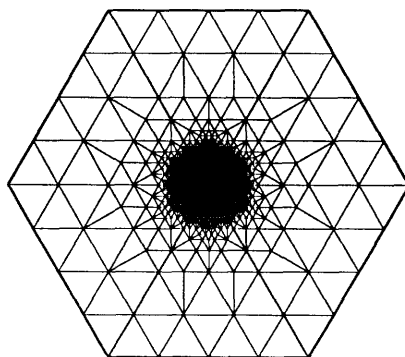
1. P. Deuffhard: *Cascadic Conjugate Gradient Methods for Elliptic Differential Equations I. Algorithm and Numerical Results*. Konrad–Zuse–Zentrum Berlin (ZIB), Preprint SC 93–23 (1993)



Vergleich der Rechenzeiten für die reine Iteration



Vergleich der Anzahl an nötigen Iterationen



Adaptives Gitter auf Level $j = 7$, $n = 1975$ Knoten

Adaptive Multilevel-Finite-Elemente-Methoden in drei Raumdimensionen

Bearbeiter: P. Deuffhard, F. Bornemann, B. Erdmann, R. Kornhuber, R. Roitzsch, M. Seebaß

Kooperation: G. Wittum, P. Bastian (Universität Stuttgart), H. Yserentant, J. Bey, P. Leinen (Universität Tübingen)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Projekt ist die Fortsetzung des gleichnamigen Vorhabens aus dem Berichtsjahr 1992.

Die auf DEUFLHARD/LEINEN/YSERENTANT zurückgehende, kantenorientierte Fehlerschätzung zur adaptiven Gittersteuerung hat sich in einer Reihe von Anwendungsbeispielen bewährt (vgl. Jahresbericht 1992). In vielen Rechnungen fiel jedoch auf, daß bei vergleichbaren Problemstellungen die adaptive Erzeugung von Gittern vergleichbarer Qualität in drei Raumdimensionen eine *höhere Anzahl von adaptiven Zyklen* erforderte als in zwei Raumdimensionen.

Zur Erklärung dieses Phänomens wurde zunächst die Situation in zwei Raumdimensionen betrachtet. Es zeigte sich, daß hier die Beiträge des kantenorientierten Fehlerschätzers im wesentlichen äquivalent zu den Sprüngen der Normalenableitungen über die Kanten sind. In drei Raumdimensionen erhält man eine entsprechende Darstellung der Sprünge über die Dreiecksflächen mittels kubischer Polynome, die auf den Kanten der Zerlegung verschwinden. Der kantenorientierte Schätzer basiert aber auf quadratischen Polynomen, mit dem Wert 0 in den Knoten der Zerlegung. Kubische Polynome und damit die Sprünge der Normalenableitung kommen nicht vor. Auf der anderen Seite liefert unsere Auswahl kubischer Polynome allein noch keine Erweiterung von höherer Ordnung, anders als das (bei den quadratischen Polynomen) in zwei Dimensionen der Fall war.

Zusammenfassend haben also in zwei Raumdimensionen die quadratischen Polynome zwei Eigenschaften gleichzeitig (Sprünge, höhere Ordnung), die in drei Raumdimensionen auseinanderfallen (kubisch, quadratisch). Das Ergebnis sind schlechtere Ergebnisse (quadratisch) oder höhere Kosten (quadratisch und kubisch). Ein typisches Beispiel zeigt Tabelle 1.

Sowohl der rein quadratische als auch der rein kubische Fehlerschätzer benötigen erheblich mehr adaptive Zyklen als der kombinierte Schätzer um eine Lösung vergleichbarer Genauigkeit (und vergleichbare Gitter) zu erzeugen. Die höheren Kosten für die Fehlerschätzung macht sich auf diese Weise in der Gesamtrechnungszeit bezahlt.

level	quadratic			cubic			quadratic/cubic		
	j	nodes	error	j	nodes	error	j	nodes	error
0	0	27	3.45e+1	0	27	3.45e+1	0	27	3.45e+1
1	1	125	7.49e+0	1	125	7.49e+0	1	125	7.49e+0
2	2	486	1.69e+0	2	181	3.15e+0	2	568	1.69e+0
3	3	689	1.29e+0	3	452	1.45e+0	3	1410	1.05e+0
4	4	1870	8.89e-1	4	708	1.19e+0	4	2922	7.40e-1
5	4	3435	6.90e-1	4	1715	8.85e-1	5	14179	4.20e-1
6	5	7367	5.36e-1	4	2310	7.96e-1	6	26115	3.29e-1
7	6	19119	3.70e-1	5	3630	6.63e-1	6	93084	2.15e-1
8	6	22224	3.47e-1	5	7625	5.21e-1			
9	6	51337	2.69e-1	5	14982	4.08e-1			
10	6	126278	1.93e-1	6	28149	3.21e-1			
11				6	48512	2.72e-1			
12				6	87713	2.20e-1			

Table 1: Approximation History

Literatur

1. F. Bornemann, B. Erdmann, R. Kornhuber: *A Posteriori Error Estimates for Elliptic Problems in Two and Three Space Dimensions*. Preprint SC 93-29, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (1993)

Adaptive Multilevel-Methoden zur Lösung freier Randwertprobleme

Bearbeiter: R. Kornhuber, B. Erdmann, R. Roitzsch

Kooperation: R.H.W. Hoppe (TU München), H. Yserentant (Universität Tübingen)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Projekt ist die Fortsetzung des gleichnamigen Vorhabens aus dem Berichtsjahr 1992.

In den zurückliegenden Jahren wurden adaptive Multilevel-Methoden für Hindernis-Probleme entwickelt. Nach einer Diskretisierung mit stückweise linearen finiten Elementen erfolgte die Lösung der entsprechenden diskreten Probleme mittels einer aktiven Mengenstrategie und iterativer Lösung der resultierenden Subprobleme durch vorkonditionierte cg-Verfahren.

Der entsprechende Algorithmus arbeitet in zwei und drei Raumdimensionen [1] und wurde erfolgreich auf eine Vielzahl praktisch relevanter Probleme angewandt [2].

Dennoch hat der Zugang über aktive Mengenstrategien auch Nachteile. Im allgemeinen ist nicht klar, wie genau die linearen Subprobleme gelöst werden müssen. Die Erweiterung dieses Zugangs auf andere konvexe Optimierungsprobleme, etwa vom Stefan-Typ, ist nicht ohne weiteres möglich.

Vor diesem Hintergrund erfolgte im Berichtsjahr die Entwicklung monotoner Mehrgitter-Methoden für elliptische Variationsungleichungen.

Ähnlich wie beim Gauss-Seidel Verfahren wird das hochdimensionale diskrete Problem in eine Folge eindimensionaler Optimierungsprobleme zerlegt. Von jedem dieser *lokalen* Probleme erwartet man eine Verbesserung der Lösung in eine entsprechende Suchrichtung.

Wählt man als Suchrichtungen die Elemente der Knotenbasis, so erhält man die klassischen Relaxationsverfahren, mit leider bekannt schlechten Konvergenzeigenschaften. Von linearen Problemen weiß man, daß eine Erweiterung dieser hochfrequenten Suchrichtungen um zusätzliche Funktionen mit globalem Träger zu dramatischen Konvergenzverbesserungen führt. Man gewinnt so nämlich die mittlerweile auch schon klassischen Mehrgitter-Methoden.

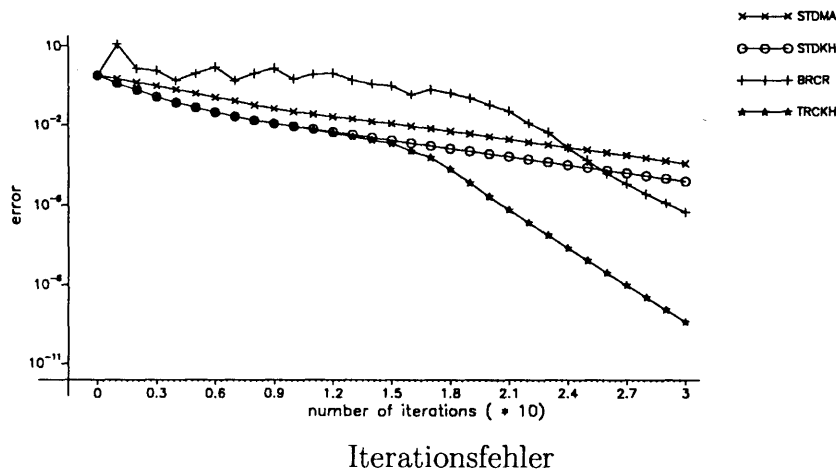
Die direkte Anwendung dieser Grundidee auf nichtlineare Probleme bringt zwei Schwierigkeiten mit sich. Erstens ist die Lösung der zusätzlichen lokalen Probleme numerisch zu aufwendig. Dieser Schwierigkeit begegnet man mit einer geeigneten Approximation, welche sich als implizite Unterrelaxation der optimalen Korrektur erweist. Damit bleibt die Monotonie des Verfahrens erhalten, welche für eine große Problemklasse, inklusive der Hindernisprobleme, auch die globale Konvergenz nach sich zieht.

Zweitens können Suchrichtungen, in deren Träger sich aktive Punkte der exakten Lösung befinden, asymptotisch nichts zur Verbesserung beitragen. Durch eine iterative Anpassung (Abschneiden) der Suchrichtungen am freien Rand erhält man

“abgeschnittene” Mehrgitter-Methoden mit i.a. drastisch verbesserten, asymptotischen Konvergenzraten. Theoretische Untersuchungen der asymptotischen, linearen Probleme erfolgten im Rahmen des Grundlagenprojekts “Abstrakte Gebietszerlegungsmethoden”.

Im letzten Berichtsjahr wurden diese Techniken auf Hindernisprobleme angewandt [3]. Im Vergleich mit anderen global konvergenten Verfahren, zum Beispiel von MANDEL (STDMA) oder den heuristischen Methoden von BRANDT/CRYER (BRCR) erwies sich die abgeschnittene Variante des monotonen Mehrgitterverfahrens (TRCKH) als deutlich überlegen. Figur 1 zeigt einen typischen Vergleich der Iterationsfehler in Abhängigkeit von den Iterationsschritten.

Wie oben angedeutet ist die Anwendbarkeit dieses neuen Zugangs nicht auf Hindernisprobleme beschränkt. Entsprechende Publikationen werden im Jahre 1994 erscheinen.



Literatur

1. B.Erdmann, R.H.W. Hoppe, R. Kornhuber: *Adaptive Multilevel-Methods for Obstacle Problems in Three Space Dimensions*. Preprint SC 93-8, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (1993)
2. B. Erdmann, M. Frei, R.H.W. Hoppe, R. Kornhuber, U. Wiest: *Adaptive Finite Element Methods for Variational Inequalities*. East-West J. Numer. Math. 1, p. 165-197 (1993)
3. R. Kornhuber: *Monotone Multigrid Methods for Elliptic Variational Inequalities I*. Preprint SC 93-18, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (1993)

Abstrakte Gebietszerlegungsmethoden

Bearbeiter: R. Kornhuber

Kooperation: H. Yserentant (Universität Tübingen)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die Lösung eines Hindernisproblems genügt einer Variationsgleichung auf einem a priori unbekanntem Teilgebiet $\Omega' \subset \Omega$ des gegebenen Rechengebietes Ω . Man kann nicht erwarten, daß eine Ausgangstriangulierung von Ω das Teilgebiet Ω' reproduziert. Eine entsprechende Situation tritt in vereinfachter Form bei Multiskalengebieten auf, deren Rand nicht in ökonomischer Weise durch eine "grobe" Ausgangstriangulierung auflösbar ist.

Die Auswirkungen dieser näherungsweise Auflösung des Rechengebietes durch das Grobgitter auf die Konvergenzraten der entsprechenden additiven und multiplikativen Teilraumkorrekturmethode waren Gegenstand der Untersuchungen [1]. Basiert die Teilraumzerlegung des Lösungsraums \mathcal{S}_j auf einem modifizierten Interpolationsoperator, so ändert sich das asymptotische Verhalten gegenüber dem ungestörten Fall nicht. Man erhält nach wie vor Stabilitätsabschätzungen der Ordnung $\mathcal{O}(j^2)$. Setzt man minimale Regularität des Randes von Ω' voraus, (welche noch Ränder einschließt, die oft als "fraktal" bezeichnet werden), so führt die Zerlegung des Lösungsraums mit Hilfe von L^2 -Projektionen auf eine verbesserte Abschätzung der Ordnung $\mathcal{O}(j)$.

Erweitert man schließlich diese Standard-Zerlegungen durch "abgeschnittene" Basisfunktionen, so werden die numerischen Ergebnisse drastisch verbessert. Für diese erweiterten Zerlegungen bleiben die Stabilitätsabschätzungen trivialerweise erhalten, verschlechterte Abschätzungen des oberen Eigenwertes bewirken jedoch auf eine zusätzliche Potenz von j .

Literatur

1. R. Kornhuber, H. Yserentant: *Multilevel Methods for Elliptic Problems on Domains not Resolved by the Coarse Grid*. Preprint SC 93-21, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (1993)

Approximative Gauß-Newton-Verfahren

Bearbeiter: A. Hohmann, P. Deuffhard

Beschreibung der Forschungsarbeit: Bei der Lösung großer nichtlinearer Gleichungen mit Hilfe eines Newton-ähnlichen Verfahrens lassen sich die dabei entstehenden linearen Probleme in der Regel nicht mehr exakt lösen. Bei ihrer approximativen Lösung gilt es die Genauigkeit der linearen Lösungsverfahren so zu kontrollieren, daß die Konvergenzeigenschaften des Newton-Verfahrens nicht beeinträchtigt werden.

Es zeigt sich, daß die Schätzbarkeit von charakteristischen Größen, die die Nichtlinearität des Problems beschreiben, eng mit invarianten Formulierungen der zugehörigen Konvergenzresultate zusammenhängt. Diese Einsicht liegt bereits den *affin invarianten* Konvergenzsätzen von Deuffhard und Heindl zugrunde, welche invariant unter affinen Transformationen des *Urbildraumes* sind. Sie führen bei approximativen Newton-Verfahren auf implementierbare Steuermechanismen für die *Fehler* der Lösungen der linearen Probleme.

Leider ist es häufig nahezu unmöglich, den Fehler der Näherungslösungen zu kontrollieren. Im Gegensatz dazu steht das Residuum in der Regel ohne zusätzlichen Aufwand zur Verfügung. Aufgrund dieser Beobachtung wurde eine sogenannte *affin-kontravariante* Konvergenztheorie hergeleitet, die invariant unter affinen Transformationen des *Bildraumes* ist und für approximative Verfahren auf eine Kontrolle des *Residuums* führt. Dieser Ansatz beinhaltet automatisch die Lösung von unterbestimmten nichtlinearen Problemen mit Hilfe approximativer Gauß-Newton-Verfahren. Ein zusätzlicher Vorteil liegt in den geringeren Differenzierbarkeitsvoraussetzungen an das gegebene nichtlineare Problem.

Aus diesem Ansatz heraus wurde ein allgemeiner Rahmen für Multilevel-Newton und Fortsetzungsverfahren für parameterabhängige nichtlineare Probleme entwickelt. Anschließend wurde dieses abstrakte Konzept exemplarisch zur Lösung von Randwertproblemen gewöhnlicher Differentialgleichungen herangezogen. Neben einer präzisen Steuerung der Genauigkeiten der Integratoren im Kontext von Mehrzielverfahren entstand dabei ein neuartiger Algorithmus zur Lösung von 1D Randwertproblemen, der die Anwendung des Newton-Verfahrens auf die äquivalente Integralgleichung mit einem sogenannten *h-p*-Kollokationsverfahren zur Lösung der linearen Teilprobleme kombiniert (siehe Grundlagenprojekt *h-p*-Methoden).

Literatur

1. A. Hohmann: *Inexact Gauss Newton Methods for Parameter Dependent Nonlinear Problems*. Dissertation, Freie Universität Berlin, November 1993, und Technical Report TR 93-13, ZIB-Berlin.

Adaptive h - p -Methoden für Randwertprobleme

Bearbeiter: G.W. Zumbusch, A. Hohmann, P. Deuffhard

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die meisten adaptiven Algorithmen zur Lösung von Randwertproblemen beschränken sich auf die Anpassung des Gitters an die Lösungsstruktur bei Beibehaltung der lokalen Ordnungen. Insbesondere für glatte Lösungen und hohe Genauigkeitsanforderungen lassen sich mit Hilfe variabler Ordnungen erhebliche Effektivitätssteigerungen erreichen. Die Möglichkeiten, die in der Verwendung von Verfeinerungsstrategien bei gleichzeitiger Anpassung der lokalen Ordnungen liegen, wurden für zwei Fragestellungen ausgelotet.

I. h - p -Finite-Elemente-Methoden

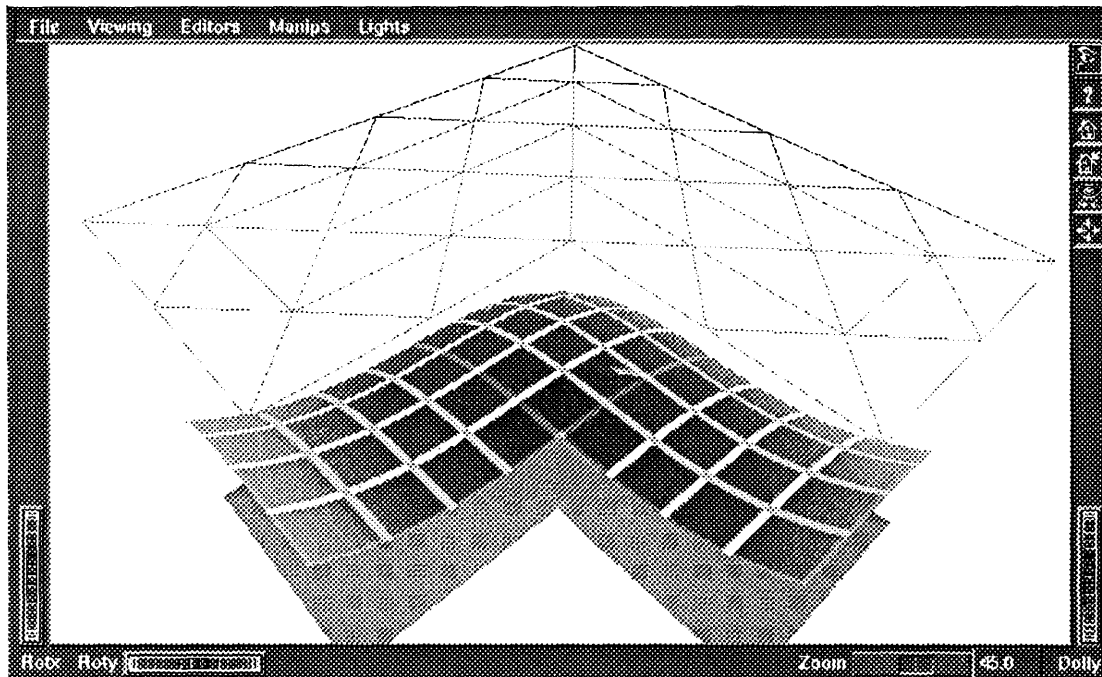
Herkömmliche Finite-Elemente-Verfahren rechnen mit einer Zahl von Unbekannten, die polynomial mit der erzielten Genauigkeit wächst. Um die Norm des Fehlers um einen Faktor zu reduzieren, ist ein Gitter mit einer um einen Faktor feineren Maschenweite erforderlich (h -Version). Adaptive Finite-Elemente-Verfahren übertragen dieses Verhalten auf nicht reguläre Probleme, können aber asymptotisch nicht die Faktoren verbessern. Abhilfe schafft hier die Erhöhung des Ansatzgrades in den Elementen (p -Version), die zusammen mit geeigneten Gittern oder auch adaptiv verfeinerten Gittern (h - p -Version), ein exponentielles Verhalten des Fehlers in der Zahl der Unbekannten liefert. Bei hoher Genauigkeit (asymptotisch) ist diese h - p -Version damit allen anderen Finite-Element-Versionen trotz höheren Aufwandes für Gitterverwaltung und Lösung überlegen. Der bestehende Finite-Elemente-Code KASKADE für vektorwertige Lösungen wurde zur p - und h - p -Version erweitert mit lokal und von Komponente zu Komponente variierenden Polynomgraden.

Um eine effiziente Implementierung im adaptiven Fall und für Multilevel-Löser überhaupt erst zu ermöglichen, wurden nach systematischen Untersuchungen zu Familien p -hierarchischer Ansatzfunktionen neue Polynome als Ansatzfunktionen konstruiert, speziell für die verwendeten Elemente Dreieck und Tetraeder und unter besonderer Berücksichtigung von deren Symmetrie [2].

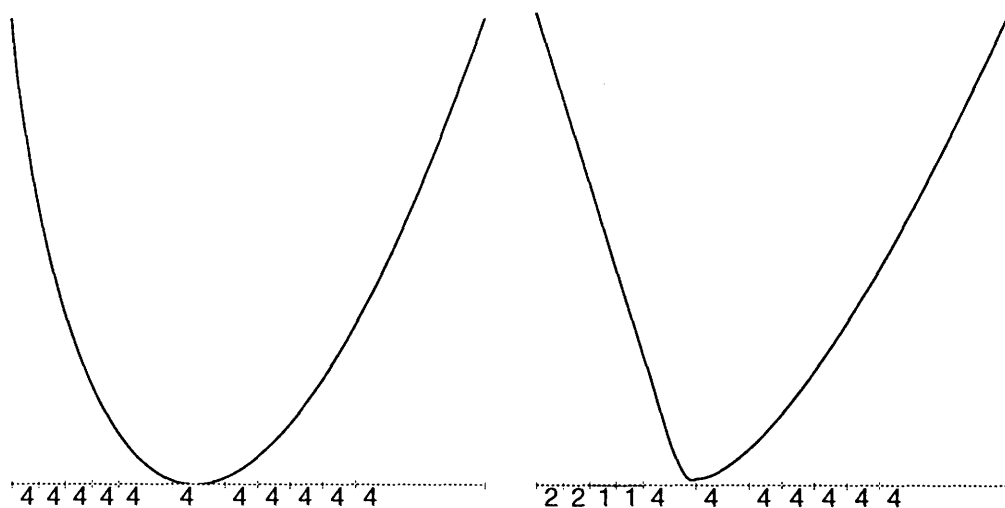
Im Programm-Code wurden die unterschiedlichen Versionen für 1-D, 2-D und 3-D zusammengefaßt, die sich aus unterschiedlichen Basisversionen entwickelt hatten. Damit konnten die gemeinsamen Programmanteile wieder vereinheitlicht und bei den unterschiedlichen Teilen grundlegende Gemeinsamkeiten sichtbar gemacht werden. Damit konnte die Dimension des Raumes, in dem das Problem definiert ist, variabel gemacht werden und ohne Laufzeitverluste während des Programmlaufes gewählt werden.

Um erstmals nicht nur stückweise lineare Lösungen sichtbar zu machen, wurden im Hinblick auf höhere polynomiale Ansatzfunktionen zahlreiche Grafik-

Experimente durchgeführt. Die Abbildung zeigt zu Dreiecken getrimmte bivariate NURBS mit einem in die x_1 - x_2 -Ebene projizierten Karomuster als Textur im Visualisierungspaket EXPLORER.



Lösung $x_1^3 + x_2^3$ auf dem L-Gebiet aus $[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]^2$ mit kubischen Elementen



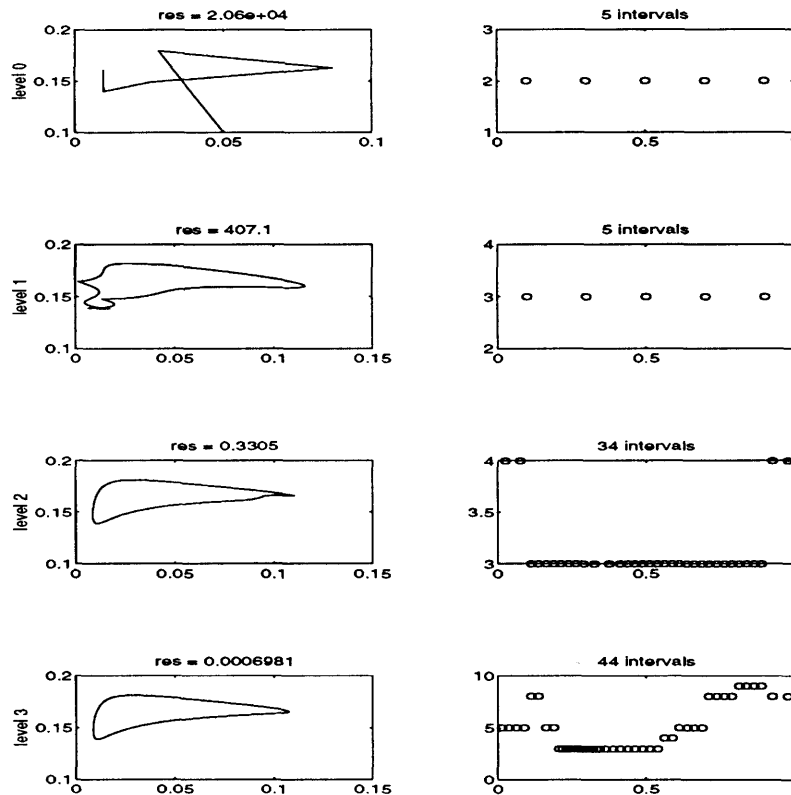
h - p -adaptive Lösung $x^{1.1} - x$ und $(x - 0.3)_+^{1.1} - x0.7^{1.1}$ auf einem gemeinsamen Gitter, $x \in [0, 1]$

II. h - p -Kollokation für Randwertprobleme gewöhnlicher Differentialgleichungen

Für Randwertprobleme gewöhnlicher Differentialgleichungen gelten allgemein zwei Ansätze als vielversprechend: *Mehrzielverfahren* (auch Schießverfahren genannt), bei denen numerische Integratoren zur Approximation des Flusses der Differentialgleichung und seiner Ableitung herangezogen werden, und *Kollokationsverfahren*, welche die Lösung global durch stückweise Polynome approximieren, die die Differentialgleichung punktweise erfüllen.

Handelt es sich bei den Integratoren um Verfahren, welche sowohl die Ordnung als auch die Schrittweite lokal variieren, so kann man in diesem Zusammenhang bereits von h - p -Methoden zur Lösung von Randwertproblemen sprechen. Tatsächlich bieten sie für hohe Genauigkeitsforderungen häufig Vorteile gegenüber den bisher ausschließlich mit fester Ordnung arbeitenden Kollokationsverfahren. Allerdings sind die Konvergenzraten dieser globalen Verfahren wesentlich größer. Es lag daher nahe, die beiden Vorzüge zu verbinden und ein Kollokationsverfahren mit automatischer Anpassung des Gitters und der lokalen Ordnungen zu entwickeln. Als Basis dient ein approximatives Gauß-Newton-Verfahren, angewandt auf eine Integralformulierung des Randwertproblems. Die entstehenden linearen Randwertprobleme werden mit Hilfe lokaler Verfeinerung und lokaler Ordnungsanpassung bis auf die vom Newton-Verfahren verlangte Genauigkeit gelöst.

Der neue Algorithmus wurde erfolgreich zur Lösung singular gestörter und periodischer Randwertprobleme eingesetzt. Die Abbildung zeigt die Berechnung einer periodischen Lösung des Modells eines chemischen Oszillators. Links sind die Iterierten des Newton-Verfahrens zu sehen, rechts die adaptiv gewählten Gitter, dargestellt als Ordnung über dem Mittelpunkt des zugehörigen Intervalls.



Periodisches Randwertproblem, links Iterierte der Lösung, rechts adaptive h - p -Gitter

Literatur

1. A. Hohmann: *Inexact Gauss Newton Methods for Parameter Dependent Nonlinear Problems*. Dissertation, Freie Universität Berlin, November 1993, und Technical Report TR 93-13, ZIB-Berlin.
2. G.W. Zumbusch: *Symmetric Hierarchical Polynomials for the h - p -Version of Finite Elements*. ZIB-Berlin, Preprint SC 93-32 (1993)

Diskrete transparente Randbedingungen für die Schrödingergleichung

Bearbeiter: F. Schmidt, P. Deuffhard

Förderung: Das Projekt wurde bis September 1993 durch die Deutsche Bundespost TELEKOM gefördert.

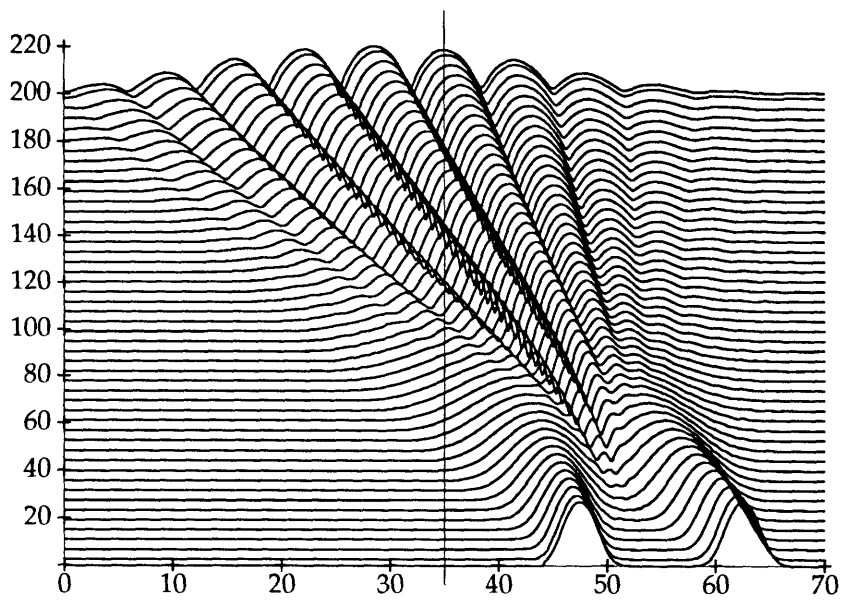
Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Projekt ist eine Fortsetzung der im Vorjahr begonnenen Arbeiten zu transparenten Randbedingungen. Transparente Randbedingungen werden für partielle Differentialgleichungen benötigt, die Wellenphänomene beschreiben. Der numerischen Berechnung von Wellenausbreitungen wird in der Regel ein begrenztes Simulationsgebiet zugrunde gelegt, von dem a-priori nicht bekannt ist, ob es innerhalb des betrachteten Orts/Zeit-Intervalls von Wellen verlassen wird.

Das von uns formulierte Prinzip der Transparenz führt, angewendet auf die Schrödingergleichung, zu nichtlokalen Cauchy-Randbedingungen. Es zeigt sich, daß jede Diskretisierung der Ausgangsgleichung ihre eigene diskrete Form von transparenten Randbedingungen erzeugt. Die in der Anwendung wichtigste Familie von Diskretisierungsmethoden in Zeitrichtung sind die linearen, impliziten Einschrittverfahren. Für diese Familie konnte ein allgemeiner und effizienter Rekursionsalgorithmus zur Berechnung der transparenten Randbedingungen gefunden werden. Dadurch wurde im Vergleich zu den Resultaten des Vorjahres eine Verallgemeinerung erreicht, die es gestattet, dasselbe Verfahren auch auf andere Gleichungen zu übertragen. Die Ergebnisse sind in [1] beschrieben worden.

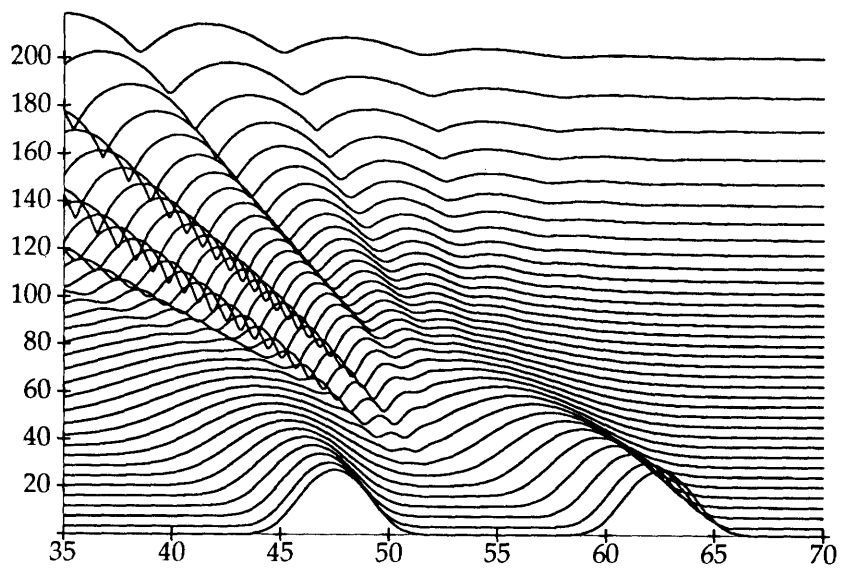
Die Bilder zeigen beide dieselbe Interferenz zweier Gaußstrahlen. Einmal wurde, wie bei der klassischen Behandlung dieser Aufgabe, ein sehr ausgedehntes Gebiet zugrunde gelegt. Zum zweiten erfolgte die Simulation in einem reduzierten Rechengebiet unter Anwendung der diskreten transparenten Randbedingungen (die vertikale Linie im oberen Bild markiert den im unteren Bild eingeführten Rand). Es zeigt sich, daß der künstliche Rand die Interferenz in keiner Weise stört.

Literatur

1. F. Schmidt, P. Deuffhard: *Discrete Transparent Boundary Conditions for the Numerical Solution of Fresnel's Equation*. Preprint SC 93-24, ZIB-Berlin 1993



Gaußstrahl-Interferenz im ausgedehnten Gesamtgebiet



Das gleiche Experiment aber im reduzierten Gebiet unter Anwendung der transparenten Randbedingungen

Adaptive Galerkinmethoden für die PDF-Transportgleichung turbulenter, reaktiver Strömungen

Bearbeiter: J. Fröhlich, P. Deuffhard

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die überwiegende Zahl technischer Verbrennungsprozesse ist durch komplexe, insbesondere turbulente Strömungsvorgänge und hohe Sensitivität bezüglich der Reaktionsmodellierung gekennzeichnet. Da die direkte numerische Simulation der Erhaltungsgleichungen die verfügbare Rechenleistung um mehrere Größenordnungen übersteigt, wird i.a. durch einen statistischen Ansatz von der Betrachtung mikroskopischer Skalen auf makroskopische Skalen übergegangen. Es kann dann, unter Zuhilfenahme zusätzlicher Modellansätze, eine Transportgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte (PDF) aufgestellt werden. Von besonderem Interesse ist die Verbundwahrscheinlichkeit von Temperatur und Konzentration der Reaktanden. Dies ist zum einen dadurch begründet, daß die Turbulenz des Geschwindigkeitsfeldes oft mit klassischen Verfahren hinreichend gut behandelt werden kann. Zum anderen spielt sie eine zentrale Rolle in dem extrem nichtlinearen Reaktionsterm, der bestimmend für die chemische Umsetzung ist (Energieausbeute, Schadstoffproduktion).

Im Berichtszeitraum wurden Untersuchungen begonnen, die bei Problemen der Polymerchemie erfolgreiche, diskrete, eindimensionale, adaptive Galerkinmethode aus [1] auf den vorliegenden Fall eines kontinuierlichen, mehrdimensionalen Wahrscheinlichkeitsraums zu übertragen. Ziel ist die effiziente Approximation der Verteilungsfunktion durch nur wenige verallgemeinerte Momente. Der Ansatz ermöglicht die adaptive Wahl der Gewichtsfunktion (moving weight), Selektion relevanter Freiheitsgrade und Fehlerkontrolle. Vor allem im mehrdimensionalen Fall kann dadurch der auftretenden Korrelationen Rechnung getragen werden, ein Aspekt, der bei klassischen Momentenmethoden Schwierigkeiten bereitet. Erste Ergebnisse werden 1994 veröffentlicht.

Literatur

1. P. Deuffhard, M. Wulkow: *Computational Treatment of Polyreaction Kinetics by Orthogonal Polynomials of a discrete Variable*. IMPACT 1, 269-301 (1989)

Quasiresonante Glättung bei Lösung der Schrödingergleichung

Bearbeiter: Ch. Schütte, P. Deuffhard

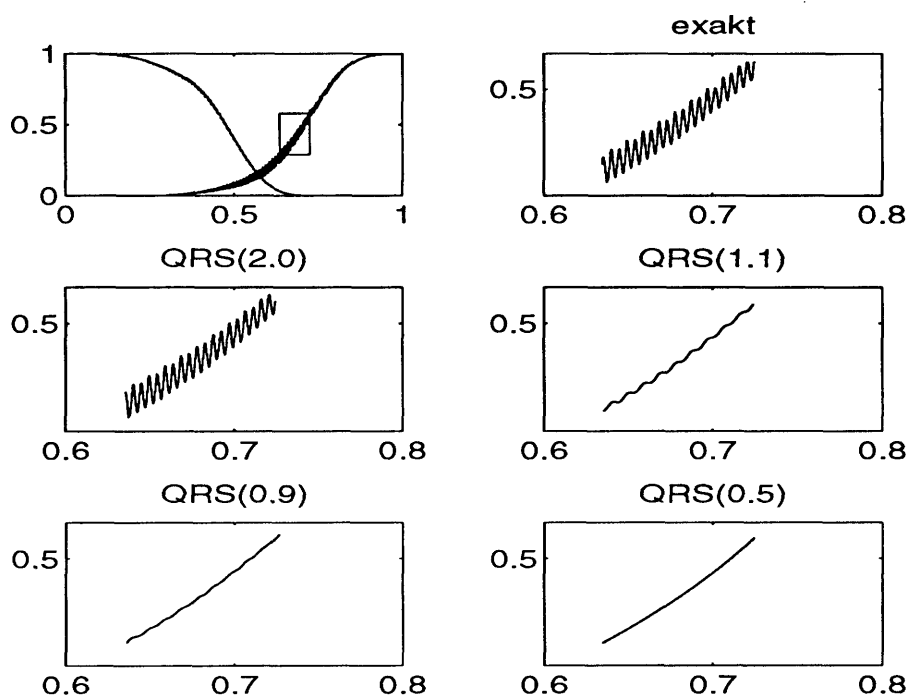
Kooperation: J. Manz (FU Berlin, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Dieses Projekt ist eine Fortsetzung des Projektes "Glättende Integrationsalgorithmen für Evolutionsprobleme der Quantenchemie" aus dem Berichtsjahr 1992.

Die betrachteten Probleme stammen aus der sogenannten Femto-Chemie. Dort wird die Möglichkeit untersucht, mittels ultrakurzer Laserpulse ausgewählte Zustandsänderungen von Molekülen zu bewirken und dadurch die Reaktionskinetik dieser Moleküle zu kontrollieren. Bei der Realisierung eines solchen Kontrollmechanismus bedarf es genauer Kenntnis der Auswirkungen eines Laserpulses auf den Molekülzustand. Ausreichende Kenntnis kann man kostengünstig allerdings nur durch numerische Simulation der Reaktion des Moleküls auf den Laserpuls erhalten. Im Berichtszeitraum wurde ein effizienter, adaptiver Algorithmus für solche Simulationsrechnungen konstruiert.

Die zeitliche Entwicklung des Molekülzustandes wird durch die Schrödingergleichung beschrieben. Diese kann durch Entwicklung in molekulare Eigenfunktionen in eine große, nicht-autonome, gewöhnliche Differentialgleichung überführt werden. Die Lösungen dieser Gleichung erweisen sich als hochoszillatorisch. Ihre Berechnung unter Verwendung von Standard-Integratoren erzeugt unvermeidbar hohen Rechenaufwand, da die auftretenden schnellen Oszillationen zu sehr kleinen Schrittweiten führen. Größere Schrittweiten können nur durch ein Ausmitteln (averaging) der schnellen Oszillationen erreicht werden, d.h. durch den Übergang zu glatteren Trajektorien. Eine genaue Untersuchung der betrachteten Differentialgleichung ergibt, daß die bekannten linearen Glättungsverfahren für dieses spezielle Problem ungeeignet sind, unter anderem weil sie gerade die chemisch relevante Information — die zeitliche Entwicklung der Betragsquadrate der Lösungskomponenten — zerstören.

Daher wurde ein neues Verfahren (QRS = quasiresonant smoothing) entwickelt, das zu einer Glättung der Trajektorien unter Erhaltung der relevanten Information führt. Sein zentraler Mechanismus ist ein physikalisch motiviertes Ausdünnen der rechten Seite der Differentialgleichung, kontrolliert durch einen Parameter δ . Ausgehend von der QRS-Idee wurde ein adaptiver Algorithmus (AQRS) konstruiert, in dem δ mit Hilfe eines speziellen Fehlerschätzers permanent an eine gegebene Genauigkeitsanforderung angepaßt wird. In Anwendungen auf "real-life" Probleme wurden für AQRS im Vergleich mit Standardmethoden typischerweise Beschleunigungsfaktoren in der Größenordnung von 10^2 beobachtet.



Das Bild links oben zeigt einen typischen Verlauf der Betragsquadrate zweier Lösungskomponenten über den Zeitraum von einer Pikosekunde. Die restlichen 5 Bilder enthalten jeweils dieselbe Ausschnittsvergrößerung und zeigen das Ergebnis bei Integration mit dem QRS-Algorithmus bei jeweils verschiedenem Parameter δ . Erkennbar wird die Dämpfung schneller Oszillationen durch Variation von δ .

Literatur

1. Ch. Schütte: *A Quasiresonant Smoothing Algorithm for the Fast Analysis of Selective Vibrational Excitation*. *IMPACT of Computing in Science and Engineering*, 5, 176–200 (1993).
2. J. Manz, G. Paramonov, M. Polasek und Ch. Schütte: *Overtone state-selective isomerization by series of infrared picosecond laser pulses: Model simulations for $Be_2H_3D^-$* . *Israel Journal of Chemistry*. Erscheint im Mai 1994.

Entwicklung adaptiver Multilevelverfahren zur Lösung von Reaktions-Diffusionsgleichungen

Bearbeiter: P. Deuffhard, J. Lang

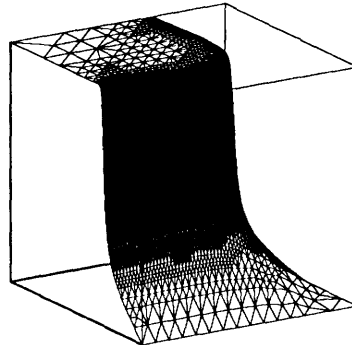
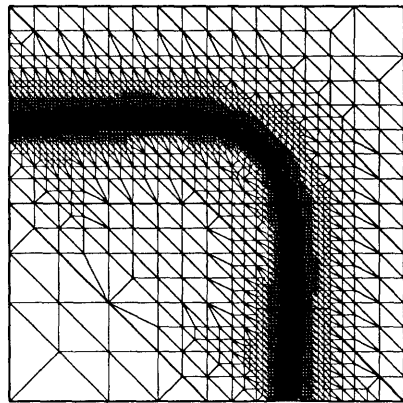
Kooperation: U. Maas, J. Warnatz (Institut für Technische Verbrennung, Universität Stuttgart)

Förderung: Das Projekt wurde durch das BMFT innerhalb der Arbeitsgemeinschaft TECFLAM gefördert.

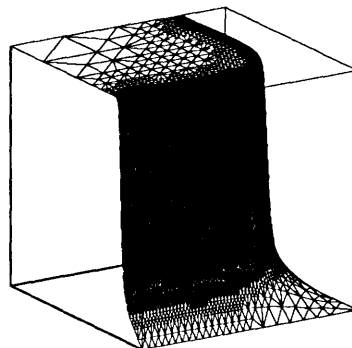
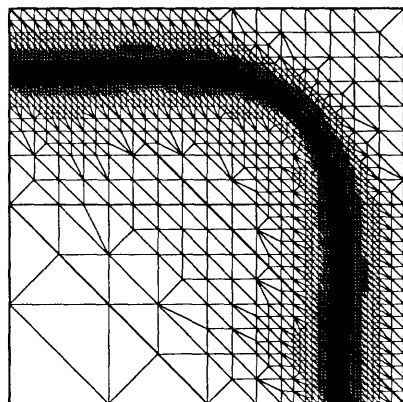
Beschreibung der Forschungsarbeit: Schwerpunkt der Arbeit war die Erstellung eines robusten FEM-Software-Paketes, mit dem allgemeine Klassen von nichtlinearen, räumlich eindimensionalen Systemen von Reaktions-Diffusionsgleichungen voll adaptiv in Raum und Zeit gelöst werden können. Dabei konnte einerseits auf zahlreiche numerische Erfahrungen für Modellprobleme [1] und andererseits auf neuartige software-technische Möglichkeiten [2] zurückgegriffen werden. Die im vorigen Jahr entwickelten raum- und zeitadaptiven Finite-Elemente-Methoden [1] wurden auf differentiell-algebraische Gleichungen erweitert. Mit der Fertigstellung des Programmpaketes KARDOS konnte diese Etappe abgeschlossen werden. Eine entsprechende Dokumentation liegt vor [3]. Das Programm hat sich bereits für reale chemische Probleme bewährt (vergleiche Anwendungsprojekt "Effiziente numerische Simulation in der chemischen Reaktionstechnik"). An der Übertragung des zugrunde liegenden adaptiven Verfahrens für höhere Raumdimensionen wird im Moment gearbeitet. Dazu sind vor allem Modifizierungen der räumlichen Fehlerschätzer und der vorkonditionierten Iterationsverfahren notwendig. Die Abbildungen zeigen erste Berechnungen für eine typische Flammenfront nach einem Modell von Kapila.

Literatur

1. J. Lang, A. Walter: *An adaptive Rothe method for nonlinear reaction-diffusion systems*. Applied Numerical Mathematics **13**, 135-146 (1993)
2. B. Erdmann, J. Lang, R. Roitzsch: *KASKADE Manual, Version 2.0*. Technical Report TR 93-5, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin
3. J. Lang: *KARDOS — KAskade Reaction Diffusion One-dimensional System*. Technical Report TR 93-9, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin



Adaptives Gitter und Lösung, $t=0.25$, 6960 Knoten (KARDOS)



Adaptives Gitter und Lösung, $t=0.26$, 7610 Knoten (KARDOS)

Software-Implementierung adaptiver Multilevel FE-Methoden

Bearbeiter: R. Roitzsch, B. Erdmann, J. Lang, R. Beck

Kooperation: P. Leinen, H. Yserentant (Mathematische Fakultät, Universität Tübingen)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Mittelpunkt standen die Pflege- und Weiterentwicklungsarbeiten an der KASKADE-Familie adaptiver Finite-Elemente-Programme. Der modulare Entwurf und die flexible Knotenverwaltung gestatten die Nutzung der Software als Baukasten für vielfältige Problemklassen. Die Möglichkeit, Datenstrukturen und Methoden dynamisch zur Laufzeit zu erweitern, eine interaktive Parameterverwaltung sowie ein internes Event-Handling-Konzept erhöhen die Flexibilität erheblich. Tcl/tk (Tool Command Language/Tool Kit) von J. Ousterhout erwies sich als geeignete Basis zur Konstruktion von Benutzeroberflächen für Anwendungsprogramme der KASKADE-Familie.

Die numerischen Methoden (Löser für das lineare Gleichungssystem, Fehlerschätzer) wurden ergänzt.

Durch die verbreiterte Basis an KASKADE-Benutzern konnten Fehler und interne Schwachstellen beseitigt werden. Im Hause wurde der Baukasten unter anderem in folgenden Projekten verwendet:

- h - p -Methoden (1D, 2D, 3D),
- freie Randwertprobleme (2D, 3D),
- Reaktion-Diffusions Gleichungen (1D),
- Eigenwerte der Schrödinger Gleichung (2D, 3D),
- Hyperthermie (2D, 3D),
- biharmonische Gleichung (Argyris-Element, 2D),
- elliptisches System (Scheibe, 2D).

Der KASKADE-Programmierbaukasten wurde über ftp weltweit zur Verfügung gestellt ([elib.zib-berlin.de:pub/kaskade](ftp://elib.zib-berlin.de/pub/kaskade)). Durch eine Mailing-Liste werden die Benutzer über neue Versionen, Fehler und Fragen informiert (e-mail mit dem Inhalt `subscribe kaskade-1` an `listserv@zrz.tu-berlin.de` schicken). Das neue Handbuch ist verfügbar (TR 93-5).

Parallel wurden Vorarbeiten für ein Neudesign des Baukastens in C++ unternommen.

Extrapolationsverfahren für sehr große Systeme von gewöhnlichen Differentialgleichungen

Bearbeiter: U. Nowak, U. Pöhle, L. Weimann, P. Deuffhard

Beschreibung der Forschungsarbeit: Bei der numerischen Integration sehr großer Systeme von steifen Differentialgleichungen stellt die Berechnung und Speicherung der Jacobimatrix des Systems sowie die Lösung der linearen Gleichungssysteme häufig den dominanten Anteil am Gesamtaufwand dar. Handelt es sich um Probleme mit dünnbesetzter Jacobimatrix, so kann durch den Einsatz von Sparse-Matrix-Techniken dieser Aufwandsanteil deutlich reduziert werden. Der verbleibende Aufwand ist dann meist proportional zur Anzahl der Nichtnull-elemente der Jacobimatrix. Eliminiert man zusätzlich noch weitere Elemente der Matrix, so erhält man eine weitere Effizienzsteigerung des Gesamtverfahrens, vorausgesetzt daß durch dieses Ausdünnen die Stabilitätseigenschaften des Verfahrens nicht, bzw. nur geringfügig, schlechter werden. Die Arbeiten an einem Extrapolationsverfahren das dieses Ausdünnen ("sparsing") automatisch und adaptiv durchführt wurden im Berichtszeitraum zum Abschluß gebracht. Abhängig von Problemtyp- und Größe können durch die Technik dieses dynamischen Ausdünnens drastische Beschleunigungen der Integrationszeiten erzielt werden, ohne daß dabei die Robustheit des Verfahrens leidet.

Eine spezielle Klasse von sehr großen Systemen von gewöhnlichen Differentialgleichungen stellen ortsdiskretisierte parabolische Differentialgleichungen dar (Linienmethode). Bereits bei 2D-Problemen ist die direkte Lösung der auftretenden linearen Gleichungssystemen meist der dominante Aufwandsfaktor. Als Ausweg bietet sich hier die iterative Lösung der linearen Systeme an. Es wurde damit begonnen, die im Rahmen des Vorjahresprojekts "Affin-invariante Newton Codes für nichtlineare PDG" verwendeten iterativen Lösungstechniken in ein semi-implizites Extrapolationsverfahren (Code EULSIM) zu integrieren. Wiederum zeigt sich die Genauigkeitssteuerung des iterativen Löser als äußerst sensibles Problem. Erste Tests zeigen jedoch vielversprechende Ergebnisse.

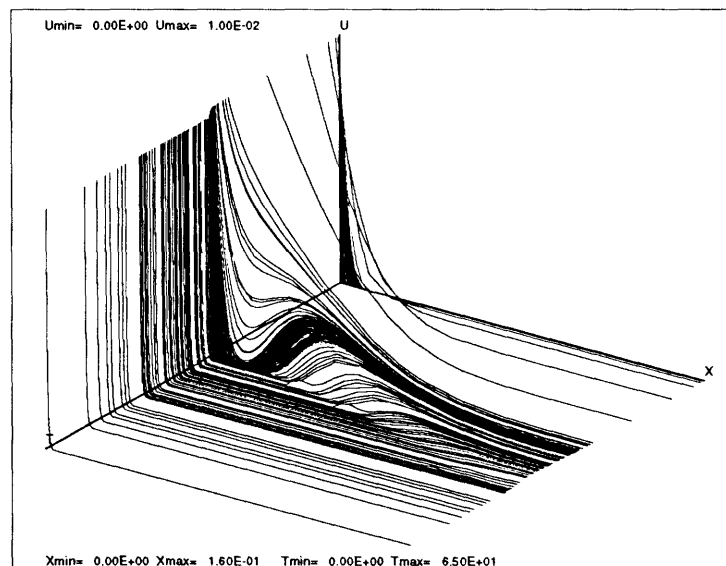
Literatur

1. U. Nowak: *Dynamic Sparsing in Stiff Extrapolation Methods*. IMPACT of Computing in Science and Engineering **5**, 53-74 (1993)

Adaptive Linienmethoden für parabolische Systeme in einer Raumdimension

Bearbeiter: U. Nowak, P. Deuffhard

Beschreibung der Forschungsarbeit: Es wurden die algorithmischen Entwicklungsarbeiten an dem Progammpaket PDEX1M zur Simulation von nicht-linearen parabolischen Systemen in einer Raumdimension zu einem vorläufigen Abschluß gebracht. Das Verfahrens basiert auf einer klassischen Linienmethode zur Zeitdiskretisierung, bei der jedoch nach jedem Integrationsschritt das Ortsdiskretisierungsgitter lokal angepaßt wird. Zur Zeitintegration des semi-diskreten Systems von differentiell-algebraischen Gleichungen wird ein Extrapolationsverfahren mit variabler Ordnung und Schrittweite verwendet. Die Adaptierung des für einen Zeitschritt dann festen Gitters geschieht auf der Basis von, ebenfalls durch Extrapolation gewonnenen, Schätzungen des Ortsdiskretisierungsfehlers. Zusätzlich bietet das Verfahren die Möglichkeit, durch eine sogenannte "Moving Grid"-Technik wandernden Fronten auch innerhalb eines Zeitschrittes mit den Gitterlinien zu folgen. Durch das hohe Maß an Adaptivität zeigt das Verfahren sowohl bei einer ganzen Reihe von kritischen Modellproblemen als auch bei komplexen Problemen aus der Praxis ein robustes und effizientes Integrationsverhalten, ohne daß eine spezielle Anpassung von Verfahrensparametern notwendig ist.



Autokat: Anteil von C3H6 im Gasgemisch

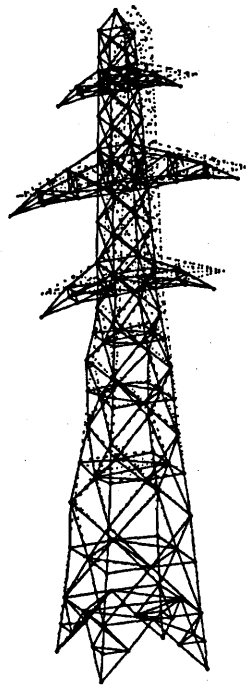
Literatur

1. U. Nowak: *Adaptive Linienmethode für nichtlineare parabolische Systeme in einer Raumdimension*. Technical Report, TR 93-14, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (1993)

Pfadverfolgung für große parameterabhängige nichtlineare Probleme

Bearbeiter: C. Klein-Robbenhaar, P. Deuffhard, A. Hohmann

Beschreibung der Forschungsarbeit: Der Einsatz von Pfadverfolgungsalgorithmen für die Analyse hochdimensionaler parameterabhängiger nichtlinearer Gleichungssysteme erfordert die Ausnutzung von problemabhängigen Spezialstrukturen der auftretenden linearen Systeme. Im Berichtszeitraum 1993 wurde die Entwicklung des C-Paketes `ALCON_S` als Erweiterung des wohlbekannten Pfadverfolgungsprogrammes `ALCON` abgeschlossen. In `ALCON_S` wird die Dünnbesetztheit der Jacobimatrix nicht nur bei der Fortsetzung regulärer Lösungen ausgenutzt, sondern auch bei der Berechnung einfacher Verzweigungen mit Hilfe entsprechender erweiterter Systeme. Dazu wurde einer der am weitesten verbreiteten sparse Matrix Löser (MA28 von I. Duff, Harwell) auf den Fall rangdefekter Matrizen erweitert. Das Paket eignet sich nun gut für Probleme in der Größenordnung von 100–1000 nichtlinearen Gleichungen. Die Abbildung zeigt eine unsymmetrische Gleichgewichtslage des Modells eines Strommastes (Dimension $n = 500$) bei hoher Last.



Unsymmetrische Gleichgewichtslage eines Strommastes

Literatur

1. C. Klein-Robbenhaar: *Numerische Pfadverfolgung für Systeme hoher Dimension unter Ausnutzung von sparse Matrix Techniken*, Diplomarbeit, FU Berlin, in Vorbereitung.

Mehrparametrische Gleichungssysteme

Bearbeiter: Karin Gatermann

Kooperation: Bodo Werner (Institut für Angewandte Mathematik, Universität Hamburg), Reiner Lauterbach (IAAS Berlin)

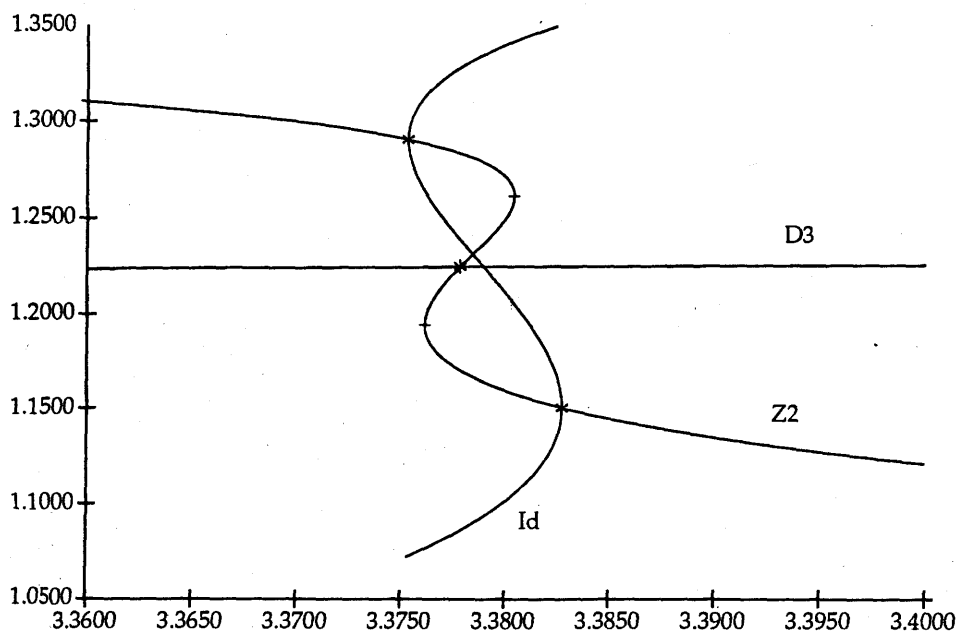
Beschreibung der Forschungsarbeit: Ein mathematisches Grundproblem, das in Naturwissenschaft und Technik immer wieder auftritt, ist die Lösung von nichtlinearen Gleichungssystemen. Dabei treten häufig mehrere Parameter auf. In diesem Projekt geht es also um die Fragestellung, wie sich die reelle Lösungsmenge eines nichtlinearen Gleichungssystems unter der Variation mehrerer Parameter verändert. Dabei stellt man sich auf den Standpunkt, daß die Lösungsmenge zunächst nur von einem Parameter abhängt und diskutiert dann die Abhängigkeit von weiteren Parametern (siehe Bild).

Der erste Ansatz besteht darin, das Zusammentreffen von zwei Verzweigungspunkten zu studieren. Durch diese Mode Interaktion entstehen unter bestimmten gruppentheoretischen Bedingungen und Generizitätsbedingungen auf den abgehenden Zweigen sekundäre Verzweigungspunkte, bzw. sogar sekundäre Hopf-Verzweigungspunkte. Die Ergebnisse werden in der anwendungsorientierten Zeitschrift *Bifurcation and Chaos* erscheinen. Dabei kommt der Aspekt des scientific computing insbesondere dadurch zur Geltung, daß in der Veröffentlichung farbige Bilder enthalten sind.

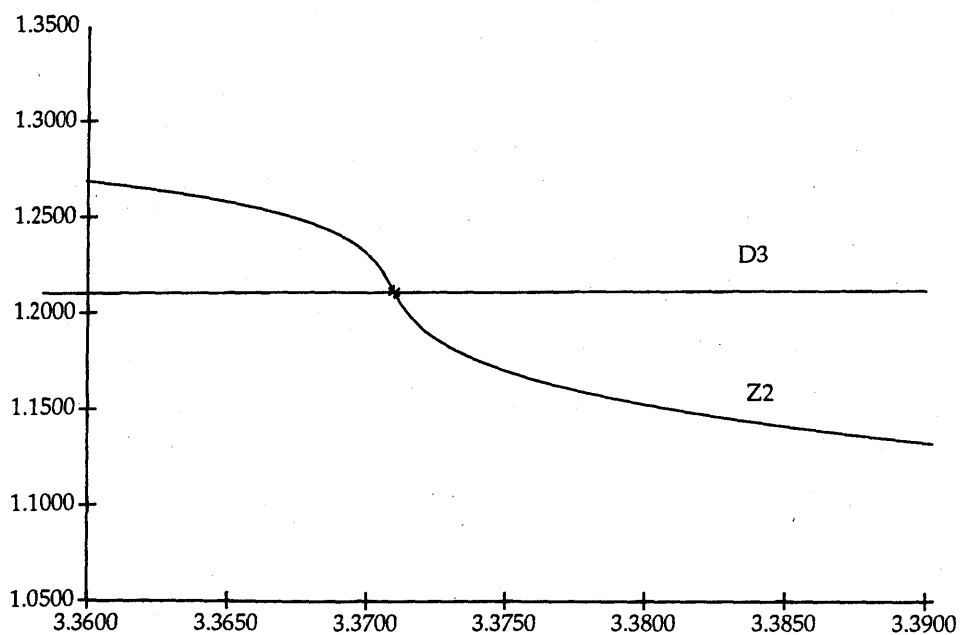
Kompliziertere Phänomene können mit Hilfe der Singularitätentheorie (Golubitsky, Stewart, Schaeffer) untersucht werden. In der Literatur wurden allerdings damit erst wenige Beispiele und Gruppen analysiert. Im Gegensatz zum ersten Ansatz der Mode Interaktion werden mehr als 2 Parameter und algebraische Methoden verwendet. Es wird in neuen Koordinaten, den sogenannten fundamentalen Invarianten und fundamentalen Equivarianten gerechnet. Erste Erfolge konnten erzielt werden, indem die Idee der Berechnung der fundamentalen Invarianten nach Sturm auf die Berechnung der fundamentalen Equivarianten übertragen werden konnte. Das ist eine geeignete Anwendung der Computer Algebra, wobei die Verwendung von Gröbner-Basen die Theorie von einer anderen Seite beleuchtet. Erste Testrechnungen sind vielversprechend, weshalb diese neue Herangehensweise großen Anklang bei Vorträgen fand.

Literatur

1. K. Gatermann, B. Werner: *Group Theoretical Mode Interactions with Different Symmetries*. Konrad-Zuse-Zentrum, Preprint SC 93-3 (1993) Erscheint in *International Journal on Bifurcation and Chaos*, 1994.
2. K. Gatermann, B. Werner: *Secondary Hopf Bifurcation Caused by Steady-state Steady-state Mode interaction*. Konrad-Zuse-Zentrum, Preprint SC 93-16 (1993) Erscheint in: J. Chaddam, M. Golubitsky, W. Langford, B. Wetton: *Pattern Formations: Symmetry Methods and Applications*.



Verzweigungsdiagramm mit D_3 -Symmetrie (Lösungskomponente über 1. Parameter) für Wert des 2. Parameters $\alpha = 1.86$.



Verzweigungsdiagramm für Wert des 2. Parameters $\alpha = 1.845$.

Dünnbesetzte Gleichungssysteme

Bearbeiter: Karin Gatermann, Günter M. Ziegler

Kooperation: Jan Verschelde (Katholieke Universiteit Leuven, Department of Computer Science/Belgien)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Bei der Lösung von algebraischen Gleichungssystemen interessieren zwei Aspekte, die sich gegenseitig fast ausschließen. Einerseits möchte man die Lösungen numerisch approximieren, andererseits ist es in Anwendungen oft wichtig, alle Lösungen zu kennen. Für dünnbesetzte Polynome (in der Darstellung durch Monome treten nur wenige Monome auf) gibt es ein theoretisches Resultat, das es ermöglicht, beide Anforderungen miteinander zu verbinden. Die Anzahl der Lösungen hängt bei generischer Wahl der Koeffizienten nur von den Exponenten der Monome ab, die die sogenannten Newton Polytope aufspannen.

Huber und Sturmfels haben eine problemangepaßte Homotopie vorgeschlagen, die von der Analyse der Newton Polytope bestimmt wird. Dieser Ansatz beinhaltet sowohl algebraische als auch numerische Rechnungen. Durch Ausnutzung der Symmetrie wird die Effizienz dieses Verfahrens erheblich gesteigert.

Abgebrochene Laurent- und Puiseuxreihen in der Computeralgebra

Bearbeiter: R. Schöpf, W. Koepf

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die symbolische Bestimmung der Taylor- oder Laurentreihe einer gegebenen analytischen oder meromorphen Funktion ist ein wichtiges Hilfsmittel in einer Reihe von Anwendungen. Für eine Reihe von Funktionen ist es sehr einfach möglich, durch fortgesetzte Differentiation und Einsetzen des Entwicklungspunktes eine abgebrochene Reihe zu berechnen. Diese Methode versagt allerdings, wenn hebbare Singularitäten oder Pole auftreten. Außerdem können komplizierte Zwischenergebnisse auftreten ("intermediate expression swell"), was die Effizienz des Verfahrens, insbesondere bei hoher Ordnung einschränkt.

Diese Probleme führten bereits vor einigen Jahren zur Entwicklung eines REDUCE-Paketes zur Berechnung endlicher Taylor- und Laurentpolynome meromorpher Funktionen. Ein wichtiger Aspekt dabei ist die Möglichkeit, aus der Taylorreihe einer Funktion $f(x)$ für gewisse Standardfunktionen g die Reihe für $g(f(x))$ direkt zu bestimmen, was zu einer deutlichen Erhöhung der Rechengeschwindigkeit führt. Eine weitere Besonderheit dieses Pakets ist die Möglichkeit der Bestimmung der Taylorpolynome analytischer Funktionen in mehreren Variablen.

Im Berichtszeitraum wurde der Code zur Bestimmung einer Potenzreihenentwicklung vollständig neu implementiert. Dadurch können jetzt auch Funktionen mit bekanntem singulärem Verhalten am Entwicklungspunkt in eine Potenzreihe entwickelt werden. Ein Beispiel dafür ist der Dilogarithmus, definiert über das Hauptwertintegral

$$\text{Li}(x) = \int_0^x \frac{1}{\ln t} dt.$$

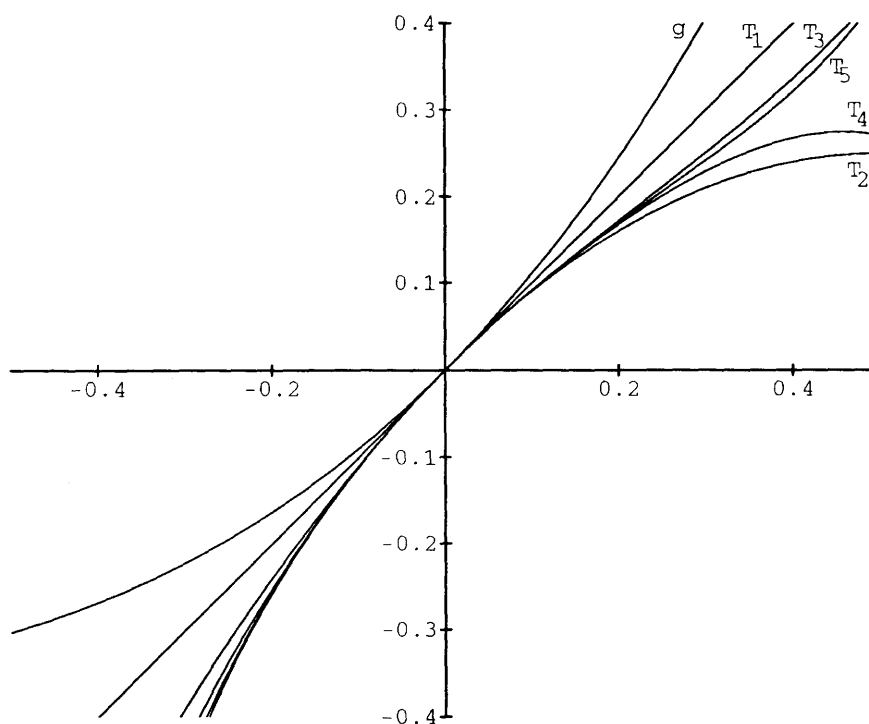
Um diese Funktion zu entwickeln, benötigt das Taylorpaket nur die Information über die Ableitung und das Verhalten im Nullpunkt, um die Reihenentwicklung zu bestimmen.

Ferner wurde das Paket auf Potenzreihen mit rationalen Exponenten erweitert, sogenannten Puiseuxreihen. Dies erlaubt, die Reihenentwicklung von Ausdrücken zu bestimmen, die algebraische Funktionen enthalten, zum Beispiel

$$\exp\left(\frac{\sqrt{x^{2/5} + 1} - x^{1/3} - 1}{x^{1/3}}\right) = \frac{1}{e} + \frac{1}{2e}x^{1/15} + \frac{1}{8e}x^{2/15} + O(x^{1/5}).$$

In [1] wurde ein effizienter Algorithmus zur Berechnung von Taylorpolynomen implizit gegebener Funktionen angegeben, mit dem sich somit auch Taylorpolynome von Umkehrfunktionen (s. Abbildung) bzw. von Lösungen expliziter gewöhnlicher Differentialgleichungen berechnen lassen. Dieser Algorithmus wurde in REDUCE implementiert und soll auf Puiseuxreihen erweitert werden.

Das Taylor-Paket ist seit einiger Zeit im Standardlieferumfang des Computeralgebrasystems REDUCE enthalten und wird dort auch zur Berechnung von Grenzwerten benutzt.



Der Graph von $x e^x$ und der ersten 5 Taylorpolynome der Umkehrfunktion

Literatur

1. W. Koepf: *Taylor polynomials of implicit functions, of inverse functions, and of solutions of ordinary differential equations*. Complex Variables, erscheint 1994.
2. R. Schöpf: *Efficient computation of truncated Laurent and Puiseux series*. In Vorbereitung.

Effiziente Berechnung orthogonaler Polynome

Bearbeiter: W. Koepf, P. Deuffhard

Kooperation: D. Schmersau (FU Berlin)

Beschreibung der Forschungsarbeit: In den letzten Jahren wurde ein spezielles System orthogonaler Polynome, das durch Vorgabe einer Gewichtsfunktion gegeben ist, zur effizienten Berechnung heterogener Polynomreaktionen verwandt. Dieses Polynomsystem entzog sich mangels Zugang zu geeigneten analytischen Eigenschaften (z.B. der Dreitermrekursion) einer direkten effizienten Berechnung, konnte jedoch erfolgreich durch ein klassisches Polynomsystem ersetzt werden, dessen Koeffizienten asymptotisch übereinstimmen.

Es ist von theoretischem wie praktischem Interesse, effiziente Algorithmen zur Berechnung von durch Gewichtsfunktionen gegebenen orthogonalen Polynomsystemen zur Hand zu haben, um in ähnlich gelagerten Fällen nicht auf intuitive Heuristiken angewiesen zu sein. Im vorliegenden Forschungsprojekt sollen effiziente Berechnungsmethoden, beispielsweise durch Bestimmung der Rekursion, entwickelt werden. Diese Fragestellung ist aus verschiedenen Gründen schwierig:

1. **(Theoretische Grundlagen)** Es ist kein Wunder, daß man in Lehrbüchern im wesentlichen nur Rekursionsformeln für die klassischen orthogonalen Polynomsysteme findet: Die Theorie basiert gemeinhin auf der Rodriguesformel, welche aber erwiesenermaßen nur für die klassischen orthogonalen Polynomsysteme gilt. Dies führt zu der Fragestellung der Entwicklung einer Systematik orthogonaler Polynomsysteme, die an algorithmischen Erfordernissen orientiert ist. Dies wird in dem Forschungsprojekt „**Algorithmische Methoden für spezielle Funktionen und orthogonale Polynome**“ betrachtet.
2. **(Normierungsproblem)** Schon bei der Berechnung der ersten orthogonalen Polynome des gegebenen Systems mit dem Gram-Schmidt-Verfahren – welche beispielsweise zur Bestimmung der Rekursionsformel herangezogen werden könnten – stellt sich heraus, daß einfache (möglichst ohne auftretende algebraische Zahlen) und damit effiziente Darstellungen der Polynome sowie ihrer Rekursionsformel erheblich von der gewählten Normierung abhängen. Ein Verfahren zur Angabe einer geeigneten Normierung muß gefunden werden.
3. **(Symbolische Berechnung unendlicher Reihen)** Zur Berechnung der ersten orthogonalen Polynome eines diskreten Polynomsystems ist die symbolische Summierung unendlicher Reihen erforderlich. Manche Computeralgebrasysteme verfügen zwar über solche Fähigkeiten, welche allerdings nicht hinreichend sind und z.B. im Fall des vorliegenden Beispiels versagen. Die Implementierung solcher Algorithmen soll vorgenommen werden.

Literatur

1. W. Koepf, D. Schmersau: *Spaces of functions satisfying simple differential equations*. In Vorbereitung.

Unendliche Laurent- und Puiseuxreihen in der Computeralgebra

Bearbeiter: W. Koepf, W. Neun

Kooperation: D. Gruntz (ETH Zürich, Schweiz), G. Stölting (FU Berlin), A. Rennoch (GMD Berlin), MACSYMA Inc. (Arlington, MA, USA)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Unendliche Laurent-Puiseux-Reihen der Form $\sum_{k=0}^{\infty} a_k x^{k/m}$ ($m \in \mathbb{N}$) spielen eine wesentliche Rolle in Analysis, Kombinatorik und Physik. Nun können zwar Computeralgebrasysteme wie MACSYMA, MAPLE, MATHEMATICA oder REDUCE Laurent- und Puiseuxpolynome für gegebene Funktionen berechnen, welche aber als abgebrochene Reihen nicht mehr die volle Information tragen. Da ein wesentliches Ziel von Computeralgebrasystemen die Arbeit mit symbolischen Objekten ist, sollten sie die Arbeit mit unendlichen Reihen so weit wie möglich unterstützen.

Mit dem in [2]–[3] vorgestellten Algorithmus kann in vielen Fällen die darstellende symbolische Reihe angegeben werden. Ein Großteil der Reihenentwicklungen, die man in mathematischen Sammelwerken findet, kann mit dieser Methode algorithmisch hergeleitet werden. Das Neuartige dieses Algorithmus ist, daß auf Heuristiken verzichtet werden kann und keinerlei Tabellensuche stattfindet. Im Berichtszeitraum wurden Implementierungen der angegebenen Algorithmen in der Form von MAPLE- [1] und MATHEMATICA-Packages [4] fertiggestellt und der Allgemeinheit zugänglich gemacht. An einer REDUCE-Implementierung wurde im Berichtszeitraum weitergearbeitet. Auch in MACSYMA werden Implementierungen der Algorithmen vorgenommen.

Literatur

1. D. Gruntz, W. Koepf: *Formal power series*. Preprint SC 93-31, ZIB (1993)
2. W. Koepf: *Examples for the algorithmic calculation of formal Puiseux, Laurent and power series*. SIGSAM Bulletin **27**, pp. 20-32, (1993)
3. W. Koepf: *Algorithmic development of power series*. In: Artificial intelligence and symbolic mathematical computing, ed. von J. Calmet, J. A. Campbell, International Conference AISMC-1, Karlsruhe, Germany, August 1992, Proceedings, Lecture Notes in Computer Science **737**, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, pp. 195-213, (1993)
4. W. Koepf: *A package on formal power series*. Preprint SC 93-27, ZIB (1993)

Algorithmische Methoden für spezielle Funktionen und orthogonale Polynome

Bearbeiter: W. Koepf, W. Neun, Ch. Cannam

Kooperation: D. Gruntz (ETH Zürich, Schweiz), D. Schmersau (FU Berlin)

Beschreibung der Forschungsarbeit: In diesem Forschungsprojekt sollen algorithmisch orientierte Verfahren zur symbolischen Behandlung spezieller Funktionen, insbesondere orthogonaler Polynomsysteme, entwickelt und implementiert werden. Dazu mußten zunächst die klassischen speziellen Funktionen (z.B. Besselfunktionen) mit ihren elementaren Eigenschaften (auch numerisch) implementiert werden. Dies wurde im Berichtszeitraum abgeschlossen und eine erste Version als Bestandteil von REDUCE 3.5 freigegeben. Darauf aufbauend wurde das folgende Verfahren erfolgreich eingeführt und angewandt: Anstatt, wie in der theoretisch orientierten Lehrbuchliteratur üblich, die Rodriguesformel zum Ausgangspunkt zu nehmen, welche ohnehin nur die klassischen orthogonalen Polynomsysteme erfassen kann, bieten sich als algorithmisch orientierte Basis die Ableitungsregel (Differenzenregel) sowie die Rekursionsgleichung an. Es wurden Verfahren entwickelt

1. zur algorithmischen Bestimmung von Differentialgleichungen (Differenzgleichungen),
2. zur algorithmischen Bestimmung von Rekursionsgleichungen,
3. sowie zur algorithmischen Verifikation von Identitäten

für Funktionen, die sich durch Summen, Produkte sowie der Komposition mit algebraischen Funktionen mit Hilfe solcher Funktionen darstellen lassen, welche sich dem angegebenen Kalkül unterordnen lassen. Große Teile symbolischer Formelsammlungen lassen sich auf diese Weise algorithmisch verifizieren.

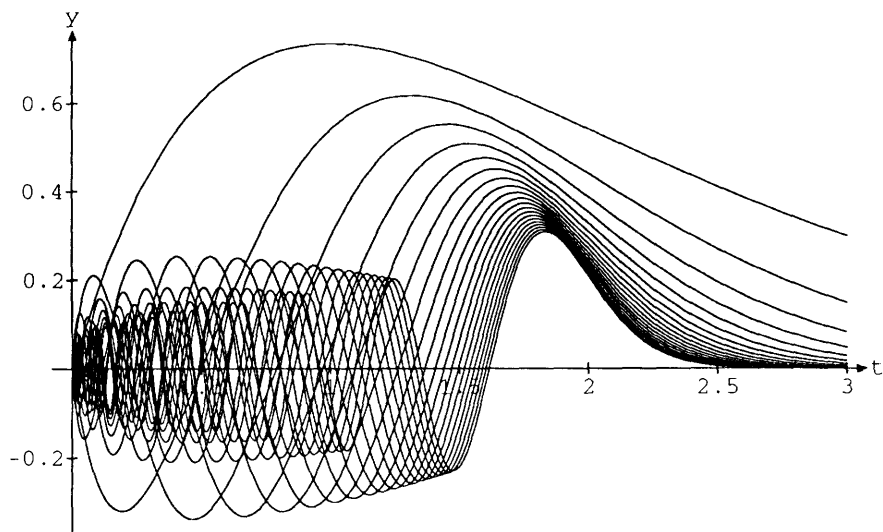
Diese Verfahren sollen weiterentwickelt und implementiert werden. Teile dieser Implementierungen wurden in [1], [2] bereits vorgenommen, vgl. das Forschungsprojekt „**Unendliche Laurent- und Puiseuxreihen in der Computeralgebra**“.

In [3] wurde ein System spezieller Funktionen untersucht, welche Bateman bereits in den zwanziger Jahren eingeführt hatte und die sich hervorragend als Testfunktionen für die eingeführten Algorithmen eignen. Die Abbildungen zeigen die Graphen der ersten Funktionen des untersuchten Funktionensystems.

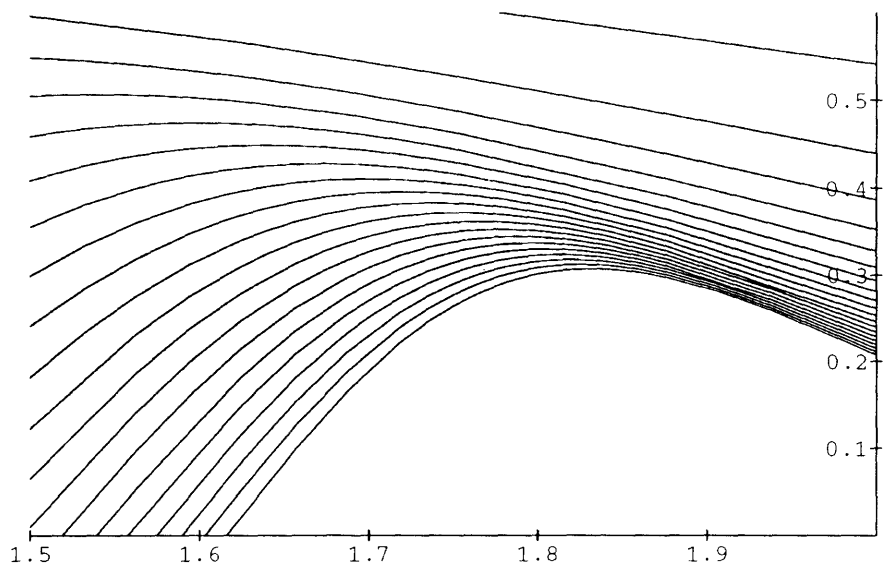
Literatur

1. D. Gruntz, W. Koepf: *Formal power series*. Preprint SC 93-31, ZIB (1993)

2. W. Koepf: *A package on formal power series*. Preprint SC 93-27, ZIB (1993)
3. W. Koepf, D. Schmersau: *Bounded nonvanishing functions and Bateman functions*. Preprint A/31-93, Fachbereich Mathematik der Freien Universität Berlin (1993)



Die Batemanfunktionen ($n = 1, \dots, 20$)



Die Batemanfunktionen ($n = 1, \dots, 20$) im Intervall $[1.5, 2]$

Symbolische Lösung algebraischer Gleichungssysteme

Bearbeiter: H. Melenk

Kooperation: H.M. Möller (Fernuniversität Hagen)

Beschreibung der Forschungsarbeit: In mathematischen Programmsystemen (Computeralgebra) spielt das Lösen nicht linearer algebraischer Gleichungssysteme eine zentrale Rolle, einerseits als direkt ansprechbare Leistung, andererseits als "black Box" in komplexen Algorithmen wie z.B. zum symbolischen Lösen von Differentialgleichungen. Im ZIB werden Softwarepakete für diesen Themenbereich entwickelt und gepflegt, die auf dem Buchberger-Algorithmus (Berechnen von Gröbner Basen für Polynomideale) und verwandten Verfahren basieren. Im Berichtsjahr wurde das auf dem Löser für reine Polynomsysteme aufbauende REDUCE-Paket SOLVEALG vervollständigt, das die automatische Bearbeitung von Gleichungssystemen, die sich zu polynomialen Systemen konvertieren lassen (z.B. trigonometrische Funktionen, Wurzelausdrücke), vervollständigt. Das Paket ist Bestandteil des Systems REDUCE 3.5.

Literatur

1. H. Melenk: *Algebraic Solution of Nonlinear Equation Systems in REDUCE*. Technical Report TR 93-2, ZIB-Berlin 1993
2. H. Melenk: *Automatic Symbolic Solution of Nonlinear Equation Systems in REDUCE*. In: "Proc. Internation IMACS Symposium on Symbolic Computation", LIFL, Lille, pp. 175-180 (1993)

Weiterentwicklung von REDUCE

Bearbeiter: H. Melenk, W. Neun, R. Schöpf

Kooperation: Anthony C. Hearn (Leitung des Projekts, RAND, Santa Monica, Californien, USA), Jed B. Marti, Stan L. Kameny (RAND), James Davenport, John Fitch (Bath, England), Arthur Norman (Cambridge, England), Eberhard Schrüfer (GMD, Bonn)

Weitere Beiträge von zahlreichen Wissenschaftlern aus den USA, Japan, Australien und vielen europäischen Ländern.

Beschreibung der Forschungsarbeit: REDUCE ist ein Programmsystem für die symbolische Bearbeitung mathematischer Formeln. Nach drei Entwicklungsjahren bietet REDUCE neben der klassischen Computeralgebra heute Hilfsmittel für zahlreiche mathematische Teilbereiche und für eine ständig wachsende Zahl von Anwendungsgebieten.

Eine der an der Entwicklung von REDUCE beteiligten Gruppen ist die Abt. Symbolik des ZIB. Neben regelmäßigen persönlichen Kontakten der Entwickler bei Besuchen und Tagungen wird die Kommunikation in diesem Projekt primär über electronic Mail abgewickelt (gemeinsame Quelldatenbank mit wöchentlichem weltweiten Update).

Unter den mathematischen Erweiterungen der am 15. Oktober 1993 freigegebenen Version REDUCE 3.5 finden sich auch Beiträge des ZIB, wie die Vervollständigung des automatischen Lösers für algebraische Gleichungssysteme, ein umfangreiches Paket für spezielle Funktionen und orthogonale Polynomsysteme, ein verbessertes Paket für abgebrochene Taylor- und Puiseuxreihen und ein neu gestalteter Dienst für die Ausgabe von Funktionsgraphen.

Das Benutzerinterface und das äußere Erscheinungsbild wurden unter Verwendung von Window-Diensten (Unix-Rechner: X11, Personal Computer: Windows 3.1, Windows NT) grundlegend renoviert. Mathematische Formeln werden nun direkt auf dem Bildschirm in typographisch korrekter Form (soweit das die Bildschirmgenauigkeit zuläßt) mit den üblichen mathematischen Symbolen ausgegeben. Eine direkte Übertragung dieser Formeln in Texte, entweder direkt als Bitmap oder unter Verwendung von \LaTeX als Zwischensprache, ist möglich. Zusätzlich wurde ein on-line Help-System eingerichtet (Stichworte im Text durch Anklicken direkt aktivierbar).

Im Berichtsjahr wurden 133.000,- DM aus der Weitergabe von 220 Lizenzen für REDUCE eingenommen. Seit Oktober 1993 ist auf Betreiben des ZIB eine Einstiegsversion von REDUCE schon für 99 \$ erhältlich.

Literatur

1. A.C. Hearn: *REDUCE User's Manual*, Version 3.5, October 1993, RAND Publication CP78 (Rev. 10/93), authorized reprint by ZIB Berlin

Kalkülsystem für Probleme der Optimalen Steuerung

Bearbeiter: R. Schöpf, P. Deuffhard

Beschreibung der Forschungsarbeit: Optimale Steuerungen und ihre Berechnung treten in vielen praktischen und industriellen Anwendungen auf. Als Beispiel seien hier die optimale Bahnkurve eines Raumfahrzeugs oder der optimale Bewegungsablauf eines Roboters genannt. Vom mathematischen Standpunkt handelt es sich um die Minimierung eines Funktionals unter Nebenbedingungen, wobei diese Nebenbedingungen die Form eines Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen annehmen. Eine vollständige analytische Lösung ist nur in sehr einfachen Fällen überhaupt möglich. Um solche Probleme in numerisch behandelbare Systeme zu überführen, ist ein erheblicher analytischer Rechenaufwand nötig, der für durchaus realistische Beispiele zum Teil so umfangreich werden kann, daß er ohne den Einsatz des Computers gar nicht mehr durchführbar ist. Aber selbst für weniger aufwendige Probleme ist dieser Schritt der Problemlösung sehr lästig und fehleranfällig.

Der Zweck des hier entwickelten Kalkülsystems OCCAL ist es nicht, nur bekannte Lösungsschritte der Reihe nach zu vollziehen, sondern eine Analyse der Problemstellung durchzuführen, ohne daß von vornherein der Gang der Rechnung bekannt wäre. Dadurch können auch Informationen gewonnen werden, die für die anschließende numerische Behandlung bedeutsam sind, so zum Beispiel über den Typ der optimalen Steuerung.

Im Berichtszeitraum wurde vor allem daran gearbeitet, den Prototyp des Kalkülsystems OCCAL auf die neuen, im Konrad-Zuse-Zentrum entwickelten und in C++ implementierten numerischen Codes umzustellen. Die Veröffentlichung der REDUCE Version 3.5 erlaubte es, im symbolischen Teil von OCCAL einige der neuen Möglichkeiten dieser Version zu nutzen und so den algebraischen Code zu straffen. Umgekehrt konnten für OCCAL entwickelte Verbesserungen in REDUCE aufgenommen werden und so auch die Entwicklung dieses Systems vorantreiben.

Literatur

1. R. Schöpf, P. Deuffhard: *OCCAL - a mixed symbolic-numeric Optimal Control CALCulator*. Zur Publikation eingereicht bei: Computer Physics Communications

Entwicklung eines parallelen Branch-and-Cut-Frameworks zur Lösung großer kombinatorischer Optimierungsprobleme

Bearbeiter: M. Grammel, H.Ch. Hege, R. Wunderling

Förderung: Cray Research Inc. (Eagan, Minneapolis, USA)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung eines parallelen Branch-and-Cut-Frameworks, das es ermöglicht, das Leistungspotential moderner massiv-paralleler MIMD-Rechnersysteme zur Lösung großer kombinatorischer Optimierungsprobleme zu nutzen.

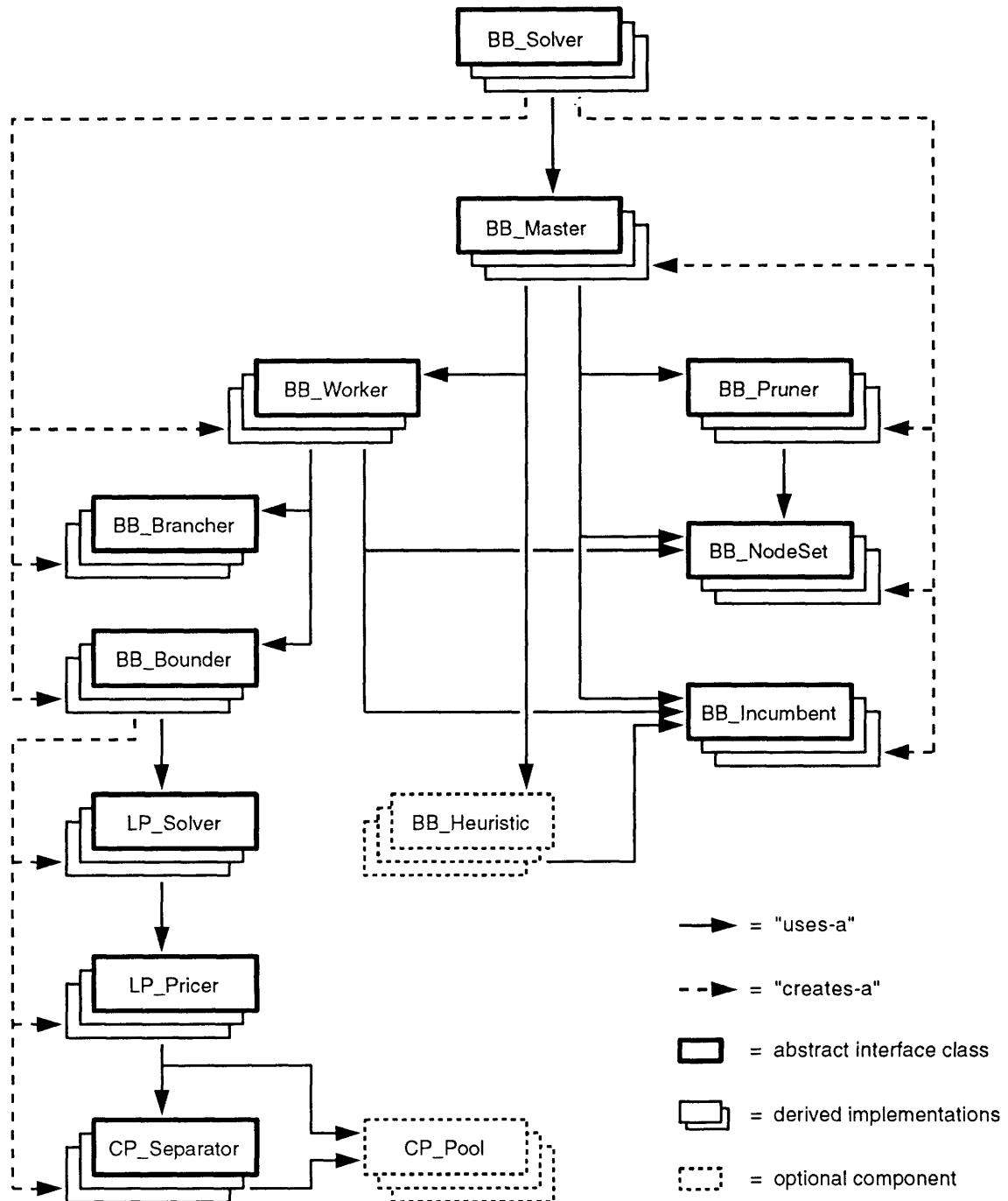
Branch-and-Cut-Verfahren (B&C) stellen einen aussichtsreichen Ansatz zur Berechnung optimaler Lösungen von kombinatorischen Optimierungsproblemen oder Lösungen mit garantierter Güte dar. Sie beruhen auf einer Kombination verschiedener Lösungsansätze: Im Kern wird ein polyedrisches Schnittebenenverfahren eingesetzt, das in ein Branch-and-Bound-Verfahren eingebettet ist; zusätzlich können Heuristiken zur Berechnung zulässiger Lösungen eingesetzt werden. Eine große Vielfalt von B&C-Verfahren ergibt sich dadurch, daß für einzelne Komponenten jeweils verschiedene Algorithmen eingesetzt werden können. Darüber hinaus ermöglicht vorhandene Nebenläufigkeit dieser Algorithmen unterschiedliche Formen der sequentiellen und parallelen Ausführung von B&C-Verfahren.

An den Entwurf eines B&C-Frameworks stellen sich aufgrund der algorithmischen Vielfalt in besonderem Maße die software-technischen Anforderungen der Generizität, Änderbarkeit und Erweiterbarkeit bzw. Wiederverwendbarkeit: Möglichst alle B&C-Algorithmen sollen sich im Rahmen des Frameworks geeignet, d.h. effizient und mit möglichst geringem Aufwand, implementieren lassen; vorhandene Komponenten sollen möglichst uneingeschränkt kombiniert und lokal geändert werden können; bei Erweiterungen des Frameworks soll in einfachen, abgestuften Schritten vorgegangen werden können, wobei vorhandene Komponenten weitestgehend übernommen und zusätzliche Komponenten leicht integriert werden können. Hinzu kommt die Anforderung, verschiedene Arten der Parallelisierung zu unterstützen, d.h. die Gesamtstruktur soll bei Einführung von Parallelität, Synchronisation und Kommunikation weitestmöglich erhalten bleiben.

Objektorientierte Entwurfstechniken sind gegenüber herkömmlicher prozeduraler Programmierung besser geeignet, diese Anforderungen, insbesondere die der Erweiterbarkeit und Wiederverwendbarkeit, zu erfüllen. Es wurde daher ein objektorientierter Entwurf erstellt und dessen Implementierung in C++ begonnen. Diese Programmiersprache wurde gewählt, weil sie auf der Zielarchitektur verfügbar und effizient implementierbar ist.

Die Implementierung paralleler Versionen des B&C-Framework, vom Entwurf konzeptuell vorbereitet, erfordert ein geeignetes Programmiermodell. Verschiedene aktuelle Ansätze, Parallelität und Kommunikation in objektorientierten Sprachen, insbesondere C++, einzuführen, wurden auf ihre Eignung hin unter-

sucht. Ein einfacher Ansatz, der sich an den Erfordernissen des B&C-Entwurfes sowie an der Programmierumgebung der Zielarchitektur (SPMD-Modell mit Message Passing) orientiert, wird derzeit entwickelt.



Komponenten eines objektorientierten B&C-Frameworks

Parallele LU Zerlegung sehr dünn besetzter Matrizen

Bearbeiter: R. Wunderling, H.Ch. Hege, M. Grammel

Förderung: Cray Research Inc. (Eagan, Minneapolis, USA)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Der (duale) Simplex-Algorithmus ist von zentraler Bedeutung für Schnittebenenverfahren — er kann bis zu über 90% der Rechenzeit beanspruchen. Daher stellt die Parallelisierung des Simplex-Verfahrens eine Vorbedingung für parallele Schnittebenenverfahren dar. Innerhalb des Simplex-Verfahrens müssen wiederholt lineare Gleichungssysteme mit typischerweise 10^3 bis 10^6 Unbekannten gelöst werden, wobei die Koeffizientenmatrix dünn besetzt ist, aber keine spezielle Struktur aufweist. Diese Gleichungssysteme werden in der Regel mit Hilfe einer LU-Zerlegung der Koeffizientenmatrix gelöst. Eine Parallelisierung der LU-Zerlegung stellt somit eine Grundlage für ein paralleles Simplex-Verfahren dar.

Heutige, skalierbare Parallelrechner-Architekturen bestehen in der Regel aus Prozessoren mit lokalem Speicher, die über ein Netzwerk miteinander kommunizieren können. Zum Aufbau einer Kommunikationsverbindung wird eine sog. Latenzzeit benötigt. Latenzen können die parallele Effizienz derart beeinflussen, daß sie die Nutzung feingranularer Parallelität (d.h. mit geringer mittlerer Berechnungszeit zwischen zwei Kommunikationen) ineffizient wird.

Dies tritt bei der Parallelisierung der LU-Zerlegung für dünn besetzte Matrizen ein. In diesem Projekt wurden Techniken untersucht, mit denen die Auswirkungen von Latenzen reduziert werden können. So kann z.B. asynchron zu den Latenzen mit der Berechnung fortgefahren werden (latency hiding) oder die Granularität vergrößert werden, indem mehrere kurze Nachrichten zu einer langen zusammengefaßt werden (message fusion). In der Tat gelingt es, eine Beschleunigung durch Nutzung von Parallelität zu erzielen. Allerdings muß die Nutzung von Nebenläufigkeit so stark eingeschränkt werden, daß die Skalierbarkeit des Algorithmus stark beeinträchtigt wird.

Literatur

1. R. Wunderling, H.Ch. Hege, M. Grammel: *On the Impact of Communication Latencies on Distributed Sparse LU Factorization*. Preprint SC 93-28, ZIB-Berlin (1993)

Visualisierung zweidimensionaler Vektorfelder

Bearbeiter: D. Stalling, H.Ch. Hege

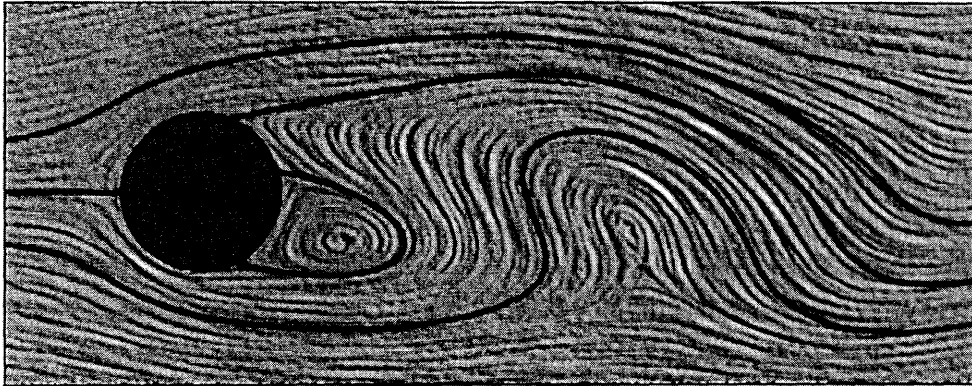
Beschreibung der Forschungsarbeit: Die Schwierigkeiten herkömmlicher Verfahren zur Visualisierung von Vektorfeldern sind dem Anwender hinreichend bekannt. So kommt es bei der Darstellung einzelner Stromlinien bzw. bei sogenannter Teilchenverfolgung (particle tracing) sehr darauf an, die Startpunkte einzelner Bahnen richtig zu setzen. Unter Umständen werden wichtige Details des darzustellenden Feldes, beispielsweise Wirbel oder singuläre Punkte, nicht richtig erfaßt. Das Anbringen kleiner Pfeile oder anderer Symbole hat den Nachteil, daß das Feld aufgrund der Größe der einzelnen Objekte nur in grober räumlicher Auflösung dargestellt werden kann. Als vielsprechende Alternative bieten sich in jüngster Zeit entwickelte textur-basierte Darstellungsverfahren an.

Im Berichtszeitraum wurde ein entsprechendes Verfahren, die *Linienintegral-Faltungsmethode*, weiterentwickelt und innerhalb der Visualisierungsumgebung IRIS Explorer implementiert. Bei dieser Methode wird an jedem Bildpunkt lokal eine Stromlinie berechnet. Entlang dieser Stromlinie wird eine geeignet gewählte Eingangstextur mit einer räumlich lokalisierten Filterfunktion gefaltet. Auf diese Weise entsteht ein Bild, das die Richtung eines zweidimensionalen Vektorfeldes mit hoher räumlicher Auflösung wiedergibt. Die Bildqualität kann durch Standardverfahren der Bildverarbeitung weiter verbessert werden. Insbesondere hat sich die Anwendung eines Relief-Filters bewährt. In einer Animation läßt sich zusätzlich zur Richtung des Feldes auch dessen Betrag darstellen. Dabei wird die Filterfunktion mit einer Geschwindigkeit proportional zum Feldstärkebetrag entlang der Stromlinie bewegt. Durch geeignete Wahl der Filterfunktion wird gewährleistet, daß die Bewegung periodisch ist und immer eine gewisse Korrelation zwischen benachbarten Bildpunkten existiert. Auf diese Weise werden Aliasing-Effekte unterdrückt sowie die Berechnung unnötig langer Bildsequenzen vermieden.

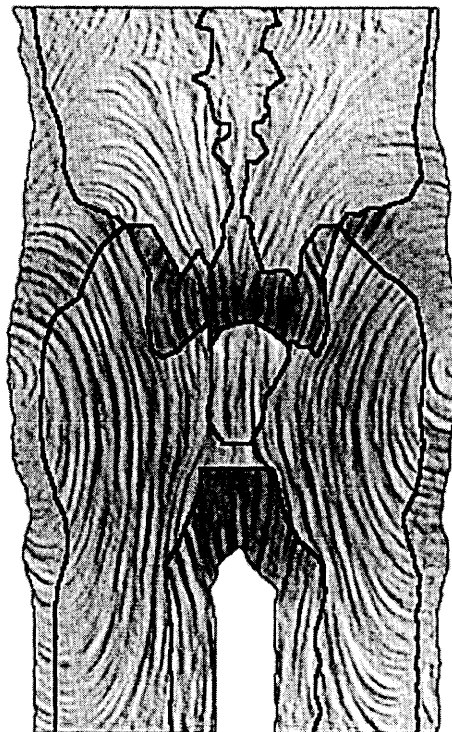
In Zusammenarbeit mit M. Morzyński und F. Thiele vom Hermann-Föttinger-Institut der TU Berlin wurde ein Videofilm zur Visualisierung von Ergebnissen der globalen Stabilitätsanalyse von zweidimensionalen Strömungen erstellt [1]. Im Rahmen dieser Animation wurde der Nutzen der Linienintegral-Faltungsmethode erfolgreich demonstriert.

Literatur

1. M. Morzyński, D. Stalling, F. Thiele: *Results from Global Stability Analysis of 2D-Flows visualized with IRIS Explorer*, submitted to the Video Journal of Engineering Research



Visualisierung einer Zylinderströmung mit der Linienintegral-Faltungsmethode



Elektrisches Feld bei der Hyperthermie-Behandlung innerhalb eines Patienten
in frontaler Schnittebene, dargestellt mit Hilfe der
Linienintegral-Faltungsmethode

Volumen-Visualisierung

Bearbeiter: D. Stalling, H.Ch. Hege, T. Höllerer

Beschreibung der Forschungsarbeit: In der Computergraphik wurden in den letzten Jahren verschiedene Verfahren entwickelt, die es erlauben, dreidimensionale skalare Datensätze direkt als mehr oder weniger transparente Dichtewolken darzustellen. Diese sogenannte direkte Volumenvisualisierung, kurz *Volume-Rendering*, bietet insbesondere für komplexe, inhomogene oder fehlerbehaftete Datensätze deutliche Vorteile gegenüber anderen Methoden wie der Darstellung von Isoflächen bzw. der Einfärbung von Schnittebenen. So ist es möglich, unmittelbar in das Volumen hineinzusehen und interessante Charakteristika in einem Datensatz hervorzuheben. Ein entscheidender Nachteil bei der direkten Volumenvisualisierung ist zur Zeit noch der sehr hohe Rechenaufwand.

Im Hinblick auf die geplante Entwicklung eines Volume-Renderers, der die interaktive Berechnung qualitativ hochwertiger Bilder ermöglichen soll, wurden im Berichtszeitraum zunächst bisher bekannte Algorithmen einheitlich im Rahmen der Strahlungstransporttheorie neu formuliert und verglichen [1]. Die Strahlungstransporttheorie beschreibt die Wechselwirkung von Licht mit Materie auf korpuskularer Ebene. Der Wellencharakter des Lichtes und seine beiden möglichen Polarisationszustände bleiben dabei unberücksichtigt. Die spezifische Intensität des Lichtes $I(\mathbf{x}, \mathbf{n})$, die unmittelbar die Bildsynthese gestattet, kann bei Kenntnis der Randbedingungen aus der Strahlungstransportgleichung bestimmt werden. In differentieller Form lautet diese Gleichung

$$\mathbf{n} \cdot \nabla I = -(\kappa + \sigma)I + q + \frac{1}{4\pi} \int \sigma(\mathbf{x}, \mathbf{n}') p(\mathbf{x}, \mathbf{n}', \mathbf{n}) I(\mathbf{x}, \mathbf{n}') d\Omega',$$

mit dem Absorptionskoeffizienten κ , dem Emissionskoeffizienten q , sowie dem Streukoeffizienten σ und der Phasenfunktion p . Für $\sigma = 0$ vereinfacht sich die Gleichung wesentlich. Sofern eine interaktive Visualisierung angestrebt wird, verzichtet man deshalb oft auf jegliche Modellierung von Streueffekten. Zur Lösung der allgemeinen Gleichung werden unter anderem Monte-Carlo-Ansätze und FEM-Verfahren benutzt.

Literatur

1. H.Ch. Hege, T. Höllerer, D. Stalling: *Volume Rendering - Mathematical Models and Algorithmic Aspects*, ZIB Technical Report TR 93-7 (1993)





Polytope, Triangulationen und Computer-Algebra

Bearbeiter: G.M. Ziegler

Kooperation: J. Richter–Gebert (Darmstadt)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Polyedrische Unterteilungen und insbesondere Triangulationen von konvexen Polytopen sind zentrale Objekte der diskreten Geometrie. Wir studieren sie insbesondere in Hinblick auf ihre Anwendungen: in der Theorie der Gröbner–Basen (Computer–Algebra), in der Numerik von Differentialgleichungen (Splines), usw.

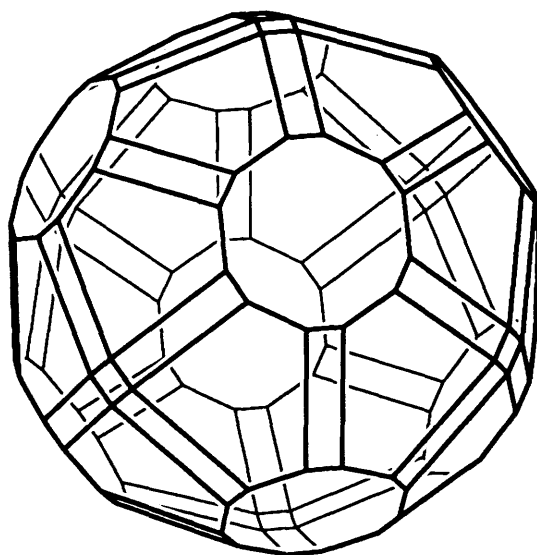
Die Menge *aller* Unterteilungen eines polyedrischen Bereiches ist in dem von Billera & Sturmfels eingeführten “Faser-Polytop” kodiert — eine Konstruktion, die G.M. Ziegler in [6, Kap. 9] ausführlich untersucht und dargestellt hat. (Siehe auch die überraschend erfolgreiche Anwendung in Reiner & Ziegler [2].)

Im Jahr 1993 wurde an zentralen Teilbereichen der Theorie intensiv gearbeitet. Das Projekt wird auch weiterhin vorangetrieben. Genannt seien die folgenden Ergebnisse:

- Schon die einfachst–denkbare Unterteilung, bezüglich quadratischer Gitter, zeigt im 3-dimensionalen interessante und unerwartete Effekte — so wurde gezeigt, daß sie nicht *erweiterbar schälbar* ist; dieselbe Schlußfolgerung gilt damit auch für die Randkomplexe von 4-dimensionalen Polytopen. Dies wird von G.M. Ziegler in [7] und [6, Kapitel 5 and 9] nachgewiesen.
- Triangulierungen und Unterteilungen sind insbesondere von der Theorie der *orientierten Matroide* her untersuchbar. Eine Monographie dazu [1] ist gerade erschienen. Neueste Forschungsergebnisse, auch im Zusammenhang mit der notorisch schweren “verallgemeinerten Baues–Vermutung”, sind in dem Band [3] enthalten.
- Der “Beispielschatz” von nicht-regulären Triangulierungen ist immer noch dürftig. Es stehen aber jetzt neue, interessante Konstruktionen zur Verfügung. Genannt seien hier nur die von de Loera, Sturmfels & Thomas — Gäste am ZIB — konstruierten nichtregulären Triangulierungen des „zweiten Hypersimplexes“, und die vielfältigen nichtregulären Triangulierungen, die man aus zonotopalen Pflasterungen konstruieren kann, siehe Richter–Gebert & Ziegler [4].
- Besonders interessante Fragestellungen (auch in Bezug auf Anwendungen in der ganzzahligen Programmierung) ergeben sich in den Verbindungen von Gitterreduktionsalgorithmen, Gröbnerbasen und polyedrischen Aspekten. Dazu sind erste Ergebnisse in Sturmfels & Ziegler [5] festgehalten. Siehe auch das Projekt “Gittermethoden für die ganzzahlige Programmierung”.

Literatur

1. A. Björner, M. Las Vergnas, B. Sturmfels, N. White, G. M. Ziegler: *Oriented Matroids*. Encyclopedia of Mathematics, Band 46, Cambridge University Press, Cambridge 1993, 516 Seiten.
2. V. Reiner, G. M. Ziegler *Coxeter-Assoziaedra*. ZIB-Preprint SC 93-11, Mai 1993; erscheint in *Mathematika* 1994.
3. J. Richter-Gebert, G. M. Ziegler: *Oriented Matroids*. Sonderausgabe von *Discrete & Computational Geometry* (3) 10 (1993)
4. J. Richter-Gebert, G. M. Ziegler: *Zonotopal Tilings and the Bohne-Dress Theorem*. ZIB-Preprint SC 93-25, Oktober 1993; erscheint in: Proc. "Jerusalem Combinatorics, 1993" (H. Barcelo, G. Kalai, eds.), *Contemporary Mathematics*, Amer. Math. Soc. 1994.
5. B. Sturmfels, G.M. Ziegler: *Gröbner bases, lattices, corner polyhedra, and integer programming*. In Vorbereitung.
6. G.M. Ziegler: *Lectures on Polytopes*. ZIB, Technical Report TR 93-6, Juni 1993, 196 Seiten; erscheint als Buch im Springer-Verlag, New York
7. G.M. Ziegler: *Non-shellable polyhedral 3-balls*. In Vorbereitung.



“Permuto-Assoziaeder” aus [2].





Clusteringprobleme in Graphen

Bearbeiter: C. Ferreira, A. Martin, R. Weismantel

Kooperation: C.C. de Souza and L. Wolsey (CORE, Universität Louvain la Neuve, Belgien)

Förderung: Das Forschungsvorhaben wurde im Rahmen des Projekts "Twinning" durch die Europäische Gemeinschaft gefördert

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Ziel dieses Forschungsprojekts ist die Entwicklung eines Branch&Cut-Algorithmus für Partitionierungsprobleme in Graphen. Das Problem lässt sich folgendermaßen beschreiben: Gegeben sei ein Graph $G = (V, E)$, eine Zahl $m \in \mathbf{N}$, Kostenfunktionen $c \in \mathbb{R}^{V \times \{1, \dots, m\}}$ und $d \in \mathbb{R}^E$. Gesucht ist eine Partition $\mathcal{P} = (V_1, \dots, V_m)$ von V , so daß $\sum_{k=1}^m \sum_{i \in V_k} c_{ik} + \sum_{e \in \delta(\mathcal{P})} d_e$ minimal ist und gewisse Nebenbedingungen erfüllt werden. Hierbei bezeichnet $\delta(\mathcal{P}) := \{e = uv \in E \mid u \in V_k \text{ und } v \in V_l, k \neq l\}$.

Dieses Problem verallgemeinert viele wohlbekannte Probleme der Literatur, unter anderem das Maxcut-Problem und das Equicut-Problem in Graphen. Darüber hinaus tritt dieses Problem bei einer Vielzahl von Anwendungen aus verschiedenen Gebieten auf, wie zum Beispiel im Compilerbau [3], bei der Berechnung von Finite-Elemente-Gittern [4] und beim Entwurf elektronischer Schaltungen [5].

Im Rahmen dieses Projekts haben wir das Polyeder, welches als konvexe Hülle aller Inzidenzvektoren von zulässigen Partitionen des gegebenen Graphen definiert ist, untersucht und durch Ungleichungen partiell beschrieben. Die theoretischen Ergebnisse werden in [1] zusammengefasst.

Ein weiterer Schwerpunkt unserer Untersuchungen bestand darin, die theoretischen Erkenntnisse über obiges Polyeder algorithmisch umzusetzen. Dabei spielt die Lösung des sogenannten *Separierungsproblems* eine besonders wichtige Rolle. Wir haben, unter anderem, mehrere heuristische Separierungsroutinen für verschiedene Klassen von Ungleichungen entwickelt. Diese Routinen bilden den Kern unseres Branch&Cut-Algorithmus. Die Resultate, welche wir mit diesem Verfahren bei der Lösung praktischer Problembeispiele erzielt haben, werden in dem Artikel [2] dargestellt.

Literatur

1. C.E. Ferreira, A. Martin, C.C. de Souza, R. Weismantel, L.A. Wolsey: *The node capacitated graph partitioning problem: a computational study*. In preparation.
2. C.E. Ferreira, A. Martin, C.C. de Souza, R. Weismantel, L.A. Wolsey: *The node capacitated graph partitioning problem: formulations and valid inequalities*. In preparation.

3. E.L. Johnson, A. Mehrotra, G.L. Nemhauser: *Min-cut clustering*. Mathematical Programming B **62** (1993), 133–151.
4. C.C. de Souza, R. Keunings, L.A. Wolsey, O. Zone: *A new approach to minimizing the frontwidth in finite element calculations*. Report 92-55, Université Catholique de Louvain la Neuve 1992.
5. R. Weismantel: *Plazieren von Zellen: Analyse und Lösung eines quadratischen 0/1-Optimierungsproblems*. Dissertation, Technische Universität Berlin 1992.

Approximation und Stabilität stochastischer Optimierungsprobleme

Bearbeiter: N. Gröwe, R. Schultz

Kooperation: W. Römisch, R. Henrion (beide Humboldt–Universität zu Berlin)

Förderung: Das Projekt wurde durch Sondermittel der Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung im Rahmen der Technologieforschung und durch das BMFT gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Stochastische Optimierungsaufgaben sind spezielle nichtlineare Optimierungsmodelle, die aus Aufgaben mit zufälligen Eingangsdaten abgeleitet werden. Sie basieren auf Annahmen über die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der zufälligen Daten und zielen auf eine optimale Absicherung gegen die durch den Zufall bedingte Ungewißheit.

Die Struktur von Zielfunktion und/oder Nebenbedingungen stochastischer Optimierungsaufgaben wird wesentlich durch mehrdimensionale Integrale über implizit gegebenen Mengen bestimmt. Dadurch entziehen sich stochastische Optimierungsaufgaben weitgehend der Behandlung durch konventionelle numerische Techniken.

Im Projekt wird das Stabilitätsverhalten stochastischer Optimierungsaufgaben bei Störung der Eingangsdaten, insbesondere der zugrundegelegten Wahrscheinlichkeitsverteilung, untersucht. Dazu ist es notwendig, die Auswirkungen von Modellierungsansatz und eingehender Wahrscheinlichkeitsverteilung auf die Struktur von Zielfunktion und Nebenbedingungen der stochastischen Optimierungsaufgabe zu studieren.

Speziell zielen die Untersuchungen auf

- quantitative Stabilität für Lösungen konvexer Zwei–Stufen–Probleme und für Aufgaben mit Wahrscheinlichkeitsrestriktionen,
- Struktur und Stabilität von Zwei–Stufen–Problemen mit Ganzzahligkeitsforderungen,
- Approximation und Stabilität mehrstufiger stochastischer Optimierungsaufgaben und stochastischer Steuerprobleme in stetiger Zeit,
- Stabilität und Numerik stochastischer Modelle der optimalen Lastverteilung bei der Elektroenergieerzeugung.

Das Projekt wird von der Deutschen Forschungsgemeinschaft im Schwerpunktprogramm “Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung” gefördert.

Literatur

1. N. Gröwe, W. Römisch, R. Schultz: *Planning electricity production under uncertainty*. DFG Schwerpunktprogramm "Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung", Report No. 428 (1993).
2. W. Römisch, R. Schultz: *Lipschitz stability for stochastic programs with complete recourse*. DFG Schwerpunktprogramm "Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung", Report No. 408 (1992).
3. W. Römisch, R. Schultz: *Strong convexity and directional derivatives of marginal values in two-stage stochastic programming*. DFG Schwerpunktprogramm "Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung", Report No. 484 (1993).
4. R. Schultz: *On structure and stability in stochastic programs with random technology matrix and complete integer recourse*. DFG Schwerpunktprogramm "Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung", Report No. 429 (1993).
5. R. Schultz: *Rates of convergence in stochastic programs with complete integer recourse*. DFG Schwerpunktprogramm "Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung", Report No. 483 (1993).

Switchbox-Verdrahtung im Manhattan-Modell

Bearbeiter: M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Switchbox-Verdrahtungsproblem tritt als Teilproblem beim Entwurf elektronischer Schaltungen auf und läßt sich kurz wie folgt beschreiben: Gegeben ist ein vollständiger, rechtwinkliger Gittergraph $G = (V, E)$ mit Kantenkapazitäten $c_e = 1, e \in E$, und Kantengewichten $w_e = 1, e \in E$. Ferner ist gegeben eine Liste $\mathcal{N} = \{T_1, \dots, T_N\}$ von sogenannten Terminalmengen $T_k \subseteq V$ ($k = 1, \dots, N$), wobei alle Terminals am Rand des Gittergraphen liegen. Gesucht sind paarweise disjunkte Kantenmengen (sogenannte Steinerbäume) S_1, \dots, S_N , so daß jedes S_k die Terminals in T_k verbindet und dabei die Gesamtanzahl der verwendeten Kanten minimal ist.

Dieses Problem ist ein Spezialfall des Steinerbaumpackungsproblems, das von uns in der Vergangenheit intensiv studiert wurde, und für das wir vielversprechende Ergebnisse erzielt haben. Nachteil dieses Verdrahtungsmodells ist, daß das beim Entwurf elektronischer Schaltungen nachfolgende Problem, die Steinerbäume auf Lagen zu verteilen, \mathcal{NP} -vollständig ist. Schwierigkeiten bereiten sogenannte *knock-knees*, das heißt Knoten, an denen zwei verschiedene Steinerbäume gegeneinander abbiegen. Werden diese *knock-knees* ausgeschlossen, so ist eine Verdrahtung auf zwei Lagen möglich. Man spricht in diesem Fall vom sogenannten *Manhattan-Modell*, andernfalls vom *Knock-knee Modell*.

Wir haben den von uns entwickelten Schnittebenenansatz für das Switchbox-Verdrahtungsproblem im Knock-knee Modell auf das Manhattan-Modell erweitert. Hierzu war eine neue Klasse von Ungleichungen nötig. Wir haben unseren Algorithmus an einer Reihe von in der Literatur diskutierten Switchbox-Verdrahtungsproblemen getestet und konnten für das Manhattan-Modell alle Beispiele optimal lösen oder beweisen, daß keine Lösung existiert. Ein Vergleich der beiden Modelle, Knock-knee und Manhattan, und der Ergebnisse ist in [1] zu finden.

Literatur

1. M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel: *The Steiner tree packing problem in VLSI-design*. Preprint SC 94-2, ZIB Berlin 1993.

Packen von Wegen und Steinerbäumen in Graphen

Bearbeiter: M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das im vergangenen Jahr begonnene Projekt "Steinerbaumpackungs-Polyeder und Schnittebenen" findet hier seine Fortsetzung. Ziel im Rahmen dieser Projektreihe ist es, ein besseres Verständnis über gewisse Polyeder, die aus dem sogenannten Steinerbaumpackungs-Problem resultieren, zu gewinnen.

Das Steinerbaumpackungsproblem ist wie folgt definiert: Gegeben ist ein Graph $G = (V, E)$ mit Kantenkapazitäten c_e , $e \in E$, sowie eine Liste von Knotenmengen $\mathcal{N} = \{T_1, \dots, T_N\}$, $N \geq 1$. Gesucht ist eine Steinerbaumpackung, das heißt, eine Liste von Kantenmengen S_1, \dots, S_N , so daß jedes S_k , $k \in \{1, \dots, N\}$, die Knoten aus T_k verbindet und jede Kante e in höchstens c_e der Kantenmengen aus S_1, \dots, S_N vorkommt. Im Mittelpunkt dieser Arbeit stand die Suche nach speziellen Problembeispielen, für die das zugehörige Steinerbaumpackungs-Polyeder (welches als die konvexe Hülle aller Inzidenzvektoren von Steinerbaumpackungen definiert ist) vollständig beschrieben werden kann. Für den Fall, daß G ein Rad ist, die Knotenmengen alle Kardinalität zwei haben und aufeinanderfolgend am Rand des Rades liegen, konnten wir eine vollständige Beschreibung finden.

Das Resultat ist dahingehend bemerkenswert, daß für den Fall N gerade eine polynomiale Anzahl von Ungleichungen ausreicht, das Polyeder zu beschreiben, wobei alle nichttrivialen Ungleichungen zu der wohlbekannteren Klasse der Steiner-schnitt-Ungleichungen gehören. Im Fall N ungerade reichen diese jedoch nicht mehr aus, und es sind neue Ungleichungen erforderlich, deren Anzahl exponentiell in der Kodierungslänge der Eingabedaten wächst.

Aus den erzielten Ergebnissen kann darüber hinaus gefolgert werden, daß das zugehörige Minimierungsproblem, das heißt, das Problem eine bezüglich einer gegebenen Kantengewichtung minimale Steinerbaumpackung zu finden, für nicht-negative Kantengewichte in polynomialer Zeit gelöst werden kann.

Literatur

1. M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel: *Optimum path packing on wheels: the noncrossing case*. Preprint SC 93-26, ZIB-Berlin 1993.

Optimierung von Aufzugssteuerungen

Bearbeiter: M. Grötschel, N. Kamin

Beschreibung der Forschungsarbeit: In der Literatur werden meist solche Transportprobleme untersucht, bei denen die Fahrtkosten bzw. Fahrzeit der Fahrzeuge zu minimieren ist. In der Praxis treten jedoch auch häufig Transportprobleme auf, die eine möglichst rasche Erfüllung der Transportaufträge erfordern, d.h. Transportprobleme, bei denen die Summe aus Warte- und Transportzeit der zu befördernden Güter minimiert werden soll. Eine solche Problemstellung findet man z.B. bei der Optimierung von Aufzugssteuerungen. Hierbei sind eine Anzahl von Aufzügen mit Kapazitäten gegeben, sowie die Etagen, zwischen denen sich die Aufzüge bewegen können bzw. in denen sich die Aufzüge anfangs befinden, und die Fahrtwünsche. Aus Sicht der Personen, die die Aufzüge benutzen möchten, ist es wünschenswert, die Zeit zwischen dem Eintreffen bei den Aufzügen und der Ankunft in der gewünschten Zieletage möglichst klein werden zu lassen. Gesucht ist also für jeden Aufzug eine Folge von Fahrtbewegungen, so daß alle Fahrtwünsche erfüllt werden und die Summe aller Warte- und Fahrzeiten der Personen minimal wird.

Was die Fahrtwünsche betrifft, so lassen sich verschiedene Varianten des Problems angeben: eine *off-line* und eine *on-line* Variante. *Off-line* soll hier bedeuten, daß zu Anfang der Berechnung schon alle im Berechnungszeitraum auftretenden Fahrtwünsche (mit Ankunftszeit, Start- und Zieletage) bekannt sind. In der *on-line* Variante wird jeder Fahrtwunsch (Start- und Zieletage) erst mit Ankunft der entsprechenden Person bekannt. Dabei ist anzumerken, daß in der Praxis vereinzelt schon sogenannte *Zielrufsteuerungen* eingesetzt werden, die es jedem Fahrgast ermöglichen, bei Ankunft am Aufzug seinen Fahrtwunsch nicht durch Angeben der Fahrtrichtung (aufwärts oder abwärts), sondern durch Eingeben der Zieletage anzumelden. Dadurch erhält die Aufzugssteuerung vollständige Daten über die Fahrziele schon vor dem Einsteigen der Personen.

Zunächst haben wir die *off-line* Variante der Optimierung von Aufzugssteuerungen für *einen* Aufzug betrachtet. Ein erster Lösungsversuch mittels dynamischer Programmierung lieferte für kleine Probleme die Optimallösung. Genauere Komplexitätstheoretische Untersuchungen ergaben jedoch, daß das Problem \mathcal{NP} -vollständig ist, selbst wenn man sich auf solche Probleme beschränkt, bei denen die Kapazität des Aufzugs 1 ist (d.h. es kann immer nur eine Person mit dem Aufzug befördert werden). Betrachtet man hingegen nur Probleme mit gleicher Etagenanzahl, so läßt sich das Optimierungsproblem in polynomieller Zeit mit dynamischer Programmierung lösen.

3.3 Anwendungsprojekte

Hyperthermie-Planung

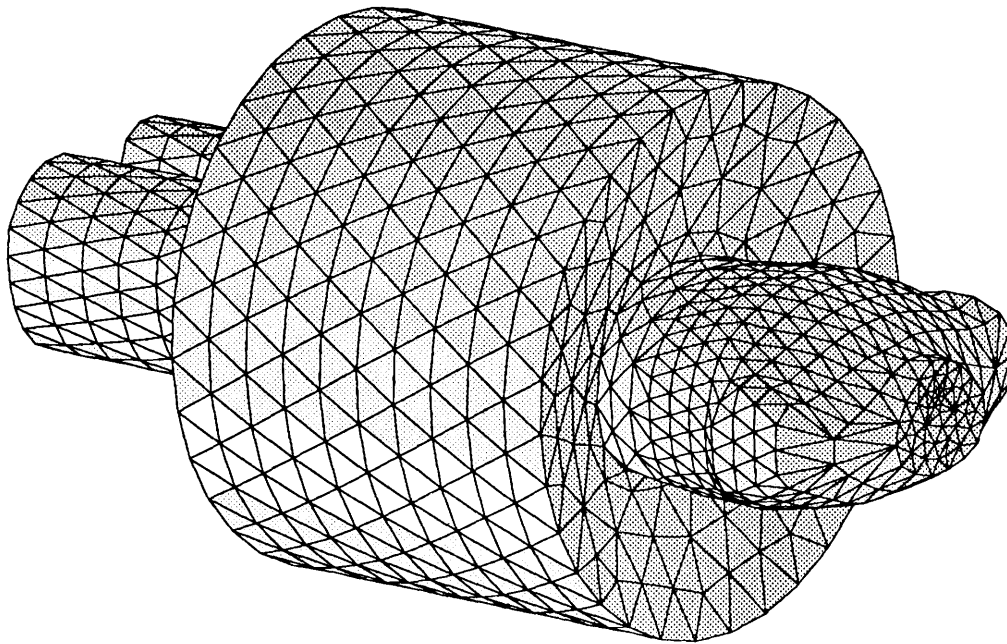
Bearbeiter: F. Bornemann, P. Deuffhard, B. Erdmann, U. Nowak, R. Roitzsch, M. Seebass

Kooperation: R. Felix, J. Nadobny, P. Wust (Universitätsklinikum Rudolf Virchow, FU Berlin)

Förderung: Das Projekt wurde gefördert durch die DFG und die Deutsche Krebshilfe.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Rahmen der klinischen Hyperthermie sollen Tumore mittels gezielter Überwärmung therapiert werden. Die Erwärmung wird durch elektromagnetische Strahlen (Mikrowellen) erzeugt. In Zusammenarbeit von ZIB und Universitätsklinikum Rudolf Virchow wird an der Entwicklung von Software für die Hyperthermie-Planung gearbeitet. Langfristiges Ziel des Projektes ist die patientenspezifische Optimierung der Temperaturverteilung im menschlichen Körper. Die einzelnen Schritte einer Hyperthermie-Planung sind: Generierung eines Finite-Elemente-Gitters auf der Basis von computertomographischen Schnittbildern des Patienten. Berechnung der Verteilung des elektrischen Feldes im Körper des Patienten. Berechnung der Temperaturverteilung. Im Jahre 1993 wurden in erster Linie die 3D-Gittergenerierung und die Feldberechnung weiterentwickelt. Gittergenerierung: Ein Schwerpunkt der Hyperthermie-Anwendungen liegt bei regionalen Behandlungen von Tumoren im Beckenbereich. Für diesen Zweck wird der SIGMA-Applikator des Hyperthermie-Systems BSD2000 verwendet. Der Patient liegt in einem ringförmigen sogenannten Wasserbolus, der erstens zur Kühlung und zweitens zur Ankopplung der Mikrowellen-Felder an den Körper des Patienten dient. Es wurde die Möglichkeit geschaffen, im 3D-Gitter diesen Wasserbolus dem Patientenmodell hinzuzufügen, so daß er in den Simulationsrechnungen berücksichtigt werden kann. Dabei kann für den Bolus als ein geometrisch sehr einfaches Objekt ein wesentlich größeres Gitter verwendet werden als für das Patientenmodell, falls eine Methode zur Verfügung steht, den torusförmigen Bereich zwischen dem feinen und dem groben Gitter mit Tetraedern auszufüllen. Zu diesem Zweck wird der Torus quasi in die Ebene "abgewickelt" und auf dem entstehenden ebenen Objekt eine Tetraedierung nach dem advancing front-Verfahren erzeugt. Die Abbildung zeigt ein 3D-Gitter, bestehend aus Patientenmodell und Wasserbolus. Feldberechnung: Vom 21. Juni bis 11. August 1993 war Dennis Sullivan zu Gast im ZIB. Er hat in Stanford ein Hyperthermie-Planungssystem entwickelt, das auf einer Feldberechnung nach der Finite Difference Time Domain-Methode basiert. Während seines Gastaufenthalts wurde dieses Planungssystem am ZIB installiert und an

die Berliner Infrastruktur (CT-Datenformat, Kontur-Daten) angepaßt. Es wurden zusätzliche Optionen für die graphische Darstellung der Ergebnisse implementiert. Im Hinblick auf die geplante Entwicklung eines neuen, verbesserten Applikators für die regionale Hyperthermie wurde mit Hilfe von Simulationsrechnungen nach der Volume Surface Integral Equation (siehe JB 1992) untersucht, welchen Gewinn die Einführung zusätzlicher Freiheitsgrade bringen kann. Die zusätzlichen Freiheitsgrade sollen einerseits in einer größeren Zahl von Antennen bestehen (24 statt 8), andererseits in der Möglichkeit, die Orientierung der Antennen zu verändern. Außerdem sollen die Antennen nicht mehr wie bisher in einer Ebene angeordnet sein, sondern je 8 Antennen in 3 verschiedenen Ebenen. Die Resultate der Simulationsrechnungen zeigen, daß besonders diese räumliche Anordnung der Antennen eine wesentlich bessere Steuerung der Leistungsverteilung innerhalb des Patienten ermöglicht. Für bestimmte Tumor-Lokalisationen, die mit dem SIGMA-Applikator nur unzureichend erwärmt werden können, erreicht der geplante neue Applikator in den Simulationsrechnungen eine erheblich bessere Temperaturverteilung.



3D-Gitter, bestehend aus Patientenmodell und Wasserbolus

Unterstützung der Hyperthermieplanung durch Verfahren der Computergrafik

Bearbeiter: H.Ch. Hege, D. Stalling

Kooperation: H. Oswald, Deutsches Herzzentrum Berlin (DHZB)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Hyperthermie ist eine noch relativ junge Methode zur Krebsbehandlung, bei der gezielt eine Erwärmung des kanzerogenen Gewebes herbeigeführt wird. Bei der Radio-Frequenz-Hyperthermie wird dies durch Einstrahlung von Mikrowellen erreicht. Um die Methode optimal einsetzen zu können, ist eine detaillierte, patientenspezifische Therapieplanung erforderlich, die komplexe Simulationsrechnungen zur Optimierung der Antennenparameter beinhaltet. Ziel dieses Projektes ist, die Simulationsrechnungen, deren algorithmische Entwicklung ebenfalls am Konrad-Zuse-Zentrum durchgeführt wird, sowie den Planungsvorgang insgesamt durch computergrafische Verfahren wirkungsvoll zu unterstützen.

Nach Durchführung einer umfassenden Anforderungsanalyse wurden drei Arbeitsschwerpunkte definiert. Dies sind die Entwicklung spezieller Algorithmen zur Gewebesegmentierung aus CT-Daten, die Entwicklung eines 3D-Gittereditors zum Erzeugen, Analysieren und interaktiven Verändern komplexer Volumengitter für FEM-Rechnungen, sowie die Weiterentwicklung von Visualisierungsverfahren zur kombinierten Darstellung aller für die Hyperthermieplanung relevanten Daten.

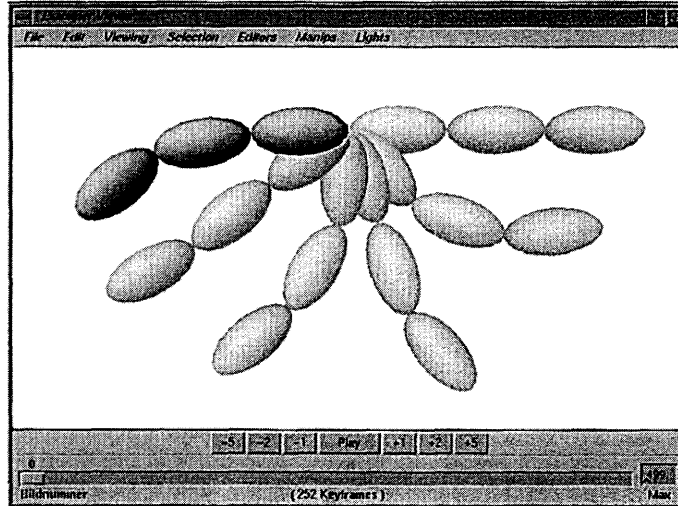
Verschiedene Vorarbeiten zum System-Entwurf der computergrafischen Komponenten des Hyperthermie-Planungssystems wurden geleistet, u.a. eine Analyse verschiedener Software-Systeme hinsichtlich ihrer Eignung als Software-Basis sowie Entwicklung und Test unterschiedlicher grafischer Darstellungen für die relevanten skalaren und vektoriellen Größen (vgl. Projekte "Visualisierung zweidimensionaler Vektorfelder" und "Volumen-Visualisierung").

Die Arbeiten sollen 1994 im Rahmen des Sonderforschungsbereiches "Hyperthermie: Methodik und Klinik" weitergeführt werden, der unter Federführung des Universitätsklinikums Rudolf Virchow der FU Berlin beantragt wurde.

3-D Grafik-Postprocessor für Simulationen in der Mehrkörperdynamik

Bearbeiter: T. Höllerer, D. Stalling, H. C. Hege

Beschreibung der Forschungsarbeit: Schnelle dreidimensionale Grafikausgabe zur Darstellung von Bewegungsabläufen in komplexen numerischen Simulationen gewinnt zunehmend an Bedeutung. Für den am ZIB entwickelten Code MEXX21 [1] zur Lösung differentiell-algebraischer Probleme aus der Mehrkörperdynamik wurde auf der Basis von leistungsstarken 3-D Grafikbibliotheken (Iris Inventor, Iris GL) ein grafisches Backend für die dreidimensionale Darstellung von Simulationsergebnissen erstellt. Der Grafik-Postprocessor erlaubt in allgemeiner Weise die Darstellung von komplexen Bewegungen dreidimensionaler Objekte. Während des „Abspielens“ der berechneten Bewegung kann der Benutzer interaktiv auf Position und Blickwinkel der Kamera Einfluß nehmen. Es werden außerdem Funktionen zur Ablaufsteuerung (Bestimmung der Ablaufgeschwindigkeit, Einzelbildanzeige, u.a.) bereitgestellt. Die dreidimensionale grafische Darstellung erfolgt aus Geschwindigkeitsgründen auf Grafik-Workstations der Firma Silicon Graphics. Im Zusammenspiel mit MEXX wird bisher auf den sogenannten *dense output*, eine zeitlich kontinuierliche Lösung, zurückgegriffen, was den Einsatz als Postprocessor sinnvoll macht. Die verwendeten Datenstrukturen sind jedoch bereits auf eine direkte Kopplung der numerischen Berechnungen und der grafischen Ausgabe ausgelegt.



Darstellung einer Pendelbewegung

Literatur

1. Ch. Lubich, U. Nowak, U. Pöhle, Ch. Engstler: *MEXX – Numerical Software for the Integration of Constrained Mechanical Multibody Systems*. Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (ZIB), Preprint SC 92-12 (1992)

Effiziente numerische Simulation in der chemischen Reaktionstechnik

Bearbeiter: P. Deuffhard, J. Lang, U. Nowak

Kooperation: U. Maas, J. Warnatz (Institut für Technische Verbrennung, Universität Stuttgart), G. Eigenberger, J. Frauhammer (Institut für Chemische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart), D. Schmitt, W. Ruppel (BASF AG, Ludwigshafen)

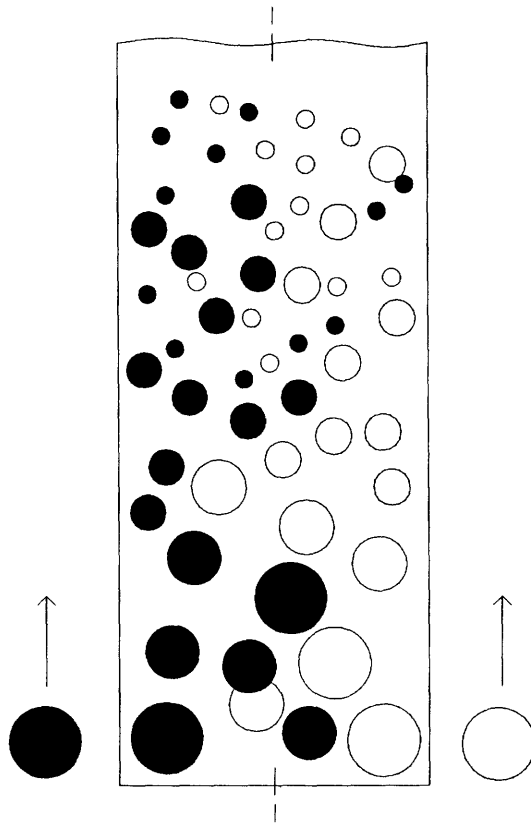
Förderung: Das Projekt wurde durch das BMFT innerhalb der Arbeitsgemeinschaft TECFLAM gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Rahmen der Zusammenarbeit mit der BASF AG in Ludwigshafen sollen Modelle der chemischen Reaktionstechnik simuliert werden. Ein erster Schritt stellt die Behandlung von räumlich eindimensionalen Problemen der heterogenen Katalyse in Festbett-Reaktoren als auch in Gas-Flüssigkeits-Systemen dar. Eine Schlüsselstellung nimmt dabei der Blasensäulenreaktor mit räumlich und zeitlich veränderlichen Phasengrenzen ein. Für die Betrachtung einer Synthese zweier Stoffe wird ein in der BASF verwendetes Zwei-Film Modell verwendet (siehe Abbildungen). Das im ZIB entwickelte Programm-Paket KARDOS [1] (siehe Grundlagenprojekt "Entwicklung adaptiver Multilevelverfahren zur Berechnung von Reaktions-Diffusionsgleichungen") wurde auf die speziellen Anforderungen von inneren Randbedingungen erweitert. Damit lassen sich nun eine Reihe von typischen Anwendungsproblemen robust und effizient simulieren. Eine entsprechende Publikation, in der die Vorteile der voll adaptiven Methode gegenüber klassischen Ingenieurverfahren deutlich werden, ist in Vorbereitung [2].

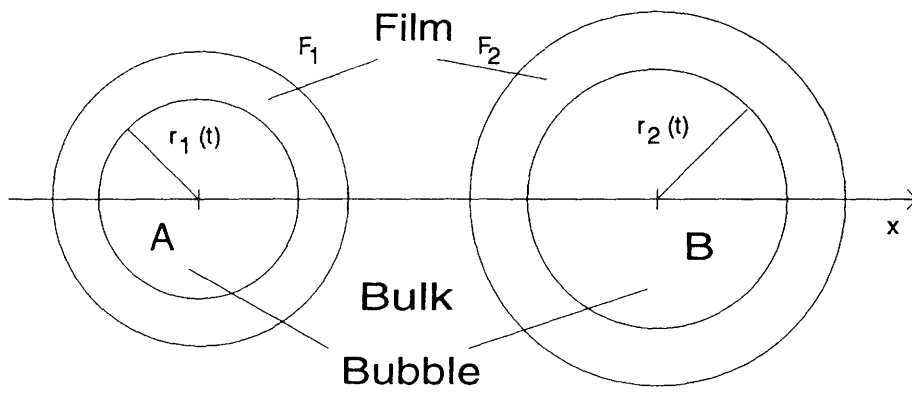
Im Rahmen der Zusammenarbeit mit dem Institut für Chemische Verfahrenstechnik der Universität Stuttgart wurde, basierend auf dem im Grundlagenprojekt "Adaptive Linienmethoden für Parabolische Systeme in einer Raumdimension" beschriebenen Forschungscode PDEX1M, ein speziell auf die Bedürfnisse von Ingenieuren ausgerichtetes Simulationspaket PDEXPACK entwickelt. Mit diesem Paket lassen sich räumlich eindimensionale Modelle von katalytischen Festbettreaktoren, unter Berücksichtigung der verfahrenstechnischen Besonderheiten, robust und effizient simulieren.

Literatur

1. J. Lang: *KARDOS — KAskade Reaction Diffusion One-dimensional System*. Technical Report TR 93-9, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin
2. J. Lang: *High-Resolution Adaptive Computations on Chemical Reaction-Diffusion Problems with Internal Boundaries*. In Vorbereitung



Vertical bubble reactor in section



2-film model

Wellenausbreitung in Komponenten der Integrierten Optik

Bearbeiter: F. Schmidt

Kooperation: H.-P. Nolting (Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin GmbH)

Förderung: Das Projekt wurde bis September 1993 durch die Deutsche Bundespost TELEKOM gefördert.

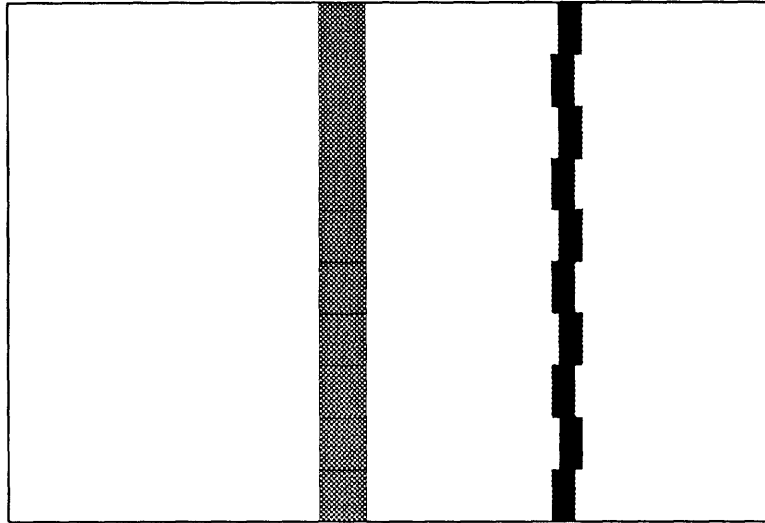
Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Projekt ist eine Fortsetzung des gleichnamigen Projektes aus dem Vorjahr. Das 1992 entwickelte Programm AMIGO1 wurde intensiv zur Lösung praxisrelevanter Probleme, wie sie z.B. in technologischen Projekten des Kooperationspartners auftraten, verwendet. Dabei wurde die Effizienz der adaptiven Multilevel-Methoden gegenüber herkömmlichen uniformen Ansätzen bestätigt, was seinen Ausdruck im Ergebnis eines internationalen Vergleichstests fand [1].

Als Anwendungsbeispiel sei die Simulation von im Heinrich-Hertz-Institut erfundenen Mäanderkopplern genannt. Die Bilder zeigen einen Ausschnitt aus der in Wirklichkeit mehrere hundert Perioden langen Struktur. Der Koppler besteht im wesentlichen aus zwei parallelen Wellenleitern, von denen einer periodisch gestört ist (optisches Gitter). Durch das Gitter ergibt sich eine wellenlängenabhängige Durchlaßcharakteristik des Kopplers. Bei geeigneter Dimensionierung lassen sich empfindliche integriert-optische Wellenlängenfilter herstellen.

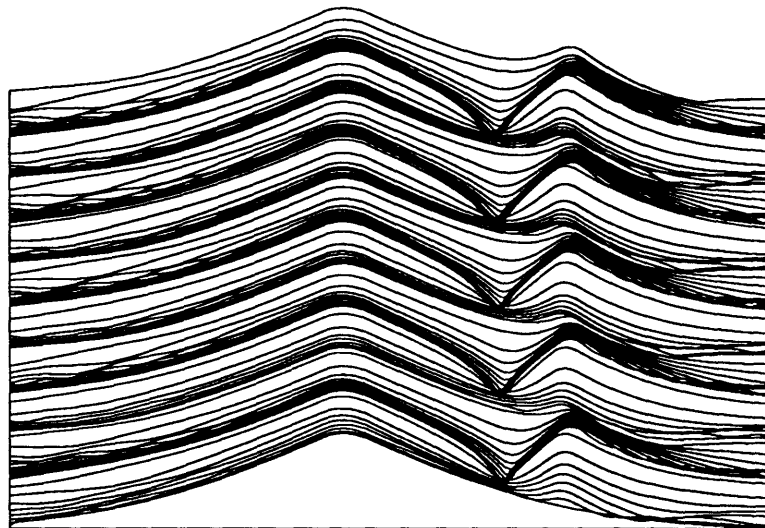
Theorie und Anwendung von AMIGO1 wurden in [2] publiziert.

Literatur

1. H.-P. Nolting, R. März: *Results of Benchmark Tests for Different Numerical BPM Algorithms.* wird in IEEE Journal of Lightwave Technology veröffentlicht
2. F. Schmidt, *An Adaptive Approach to the numerical Solution of Fresnel's Equation.* IEEE Journal of Lightwave Technology **11** (1993), pp. 1425-1434.



Ausschnitt aus dem Layout eines Mäanderkopplers



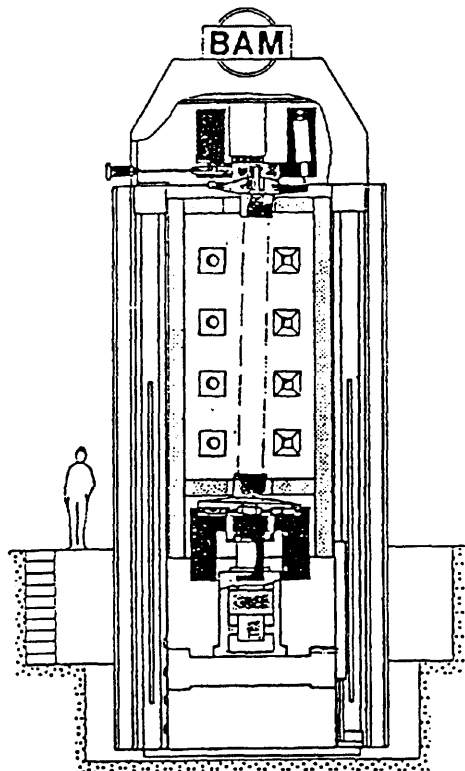
Intensitätsverteilung über dem Substrat

Thermo-inelastische Werkstoffmodellierung für Baustahl im Hochtemperaturbereich

Bearbeiter: G. W. Zumbusch

Kooperation: M. Korzeń, M. Bock (Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Rahmen der Kooperation mit der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) soll eine numerische Simulation für das Tragverhalten brandbeanspruchter Stahlstrukturen entwickelt werden. Entsprechende experimentelle Untersuchungen werden im Laboratorium *Brandingenieurwesen* der BAM durchgeführt. Mit dem dort neu installierten Stützenprüfstand ist es insbesondere möglich, durch eine gezielte zeitliche Veränderung der Lagerungsbedingungen der Stütze das Verhalten einer Bauwerksumgebung zu erfassen, die durch ein FEM-Programm simuliert wird.



Stützenprüfstand in der großen Brandhalle der BAM

Die angestrebte numerische Simulation soll deshalb zwei Funktionen erfüllen: Zum einen soll sie – offline – das Verständnis über den Einfluß der Randbedingungen und des Temperaturfeldes auf den Versagensprozeß am Einzelbauteil

fördern; zum anderen dient sie – online – durch die Simulation einer Bauwerksumgebung zur Entwicklung einer neuen Prüftechnik (Substrukturtechnik), die das Verhalten einer Stütze im Brandfall realistischer beschreibt.

Die Beschreibung des Materialverhaltens von Baustahl ist unter den vorliegenden Bedingungen sehr komplex, da sowohl eine statische Hysterese als auch Kriech- und Relaxationseffekte mit temperaturabhängigen Materialparametern berücksichtigt werden müssen (Physikalische Nichtlinearitäten). Zur Beschreibung von mechanischen Instabilitäten ist zusätzlich von einer nichtlinearen Deformationsgeometrie auszugehen (Geometrische Nichtlinearitäten). Zur Beschreibung des Versagens eines Bauteils oder einer Struktur sind deshalb sowohl physikalische als auch geometrische Nichtlinearitäten zu berücksichtigen.

Vor diesem Hintergrund wurden die Ansätze verschiedener FEM-Pakete in der Implementierung und Behandlung komplizierter Materialgleichungen verglichen (im wesentlichen ABAQUS und FEAP/PC-FEAP). Die Identifizierung einzelner Materialfunktionen und der zugehörigen Laborexperimente sind in Arbeit.

Adaptive Finite-Elemente-Methoden zur Berechnung von Eigenwerten der Schrödinger-Gleichung in der Quantenchemie

Bearbeiter: J. Ackermann, B. Erdmann, R. Roitzsch

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die quantenchemische ab initio Behandlung von molekularen Systemen beruht auf der Berechnung der Eigenwerte der entsprechenden Schrödingergleichung. Dies geschieht üblicherweise durch Ansätze mit analytischen Gauß- oder Slater-Funktionen. Finite Elemente haben demgegenüber wesentlich günstigere lokale Approximationseigenschaften. Nach den positiven Erfahrungen mit Rechnungen in zwei Raumdimensionen [1] wurden entsprechende Rechnungen in 3D durchführt.

Bei numerischen Experimenten an Standard-Modellproblemen aus den Bereichen molekulare Schwingungen und elektronische Strukturen konnten hohe Genauigkeiten (10^{-8} und besser) erreicht und die Konkurrenzfähigkeit der adaptiven FEM-Methode gezeigt werden. Für das drei-atomare H_3^{++} in D_{3h} -Symmetrie zeigen die genauen Ergebnisse die Instabilität des Grundzustandes.

Für diese Rechnungen wurde der Kaskade-Baukasten um die fehlenden Funktionen für die Eigenwertberechnung und höhere Ansatzfunktionen ($p = 1 - 5$) ergänzt sowie ein entsprechender Fehlerschätzer implementiert.

Literatur

1. J. Ackermann, R. Roitzsch: *A two-dimensional multilevel adaptive finite element method for the time-independent Schrödinger equation*. Chem. Phys. Letters 214 (1993) 109-117

Numerische Simulation von Relaxationsoszillationen in Lasern

Bearbeiter: Ch. Schütte, A. Hohmann

Kooperation: M. Dinand (Universität Paderborn, Arbeitsgruppe Angewandte Physik)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Dieses Projekt ist eine Fortsetzung des gleichnamigen Projektes aus dem Berichtsjahr 1992.

Bei der technischen Konzeption von Wellenleiter-Lasern kommt der Simulation des Einflusses von technischen Parametern und äußerer Steuerung eine wichtige Rolle zu. In diesem Projekt steht das Studium der Parameterabhängigkeit von Relaxationsoszillationen in Wellenleiter-Lasern im Vordergrund. Mit Relaxationsoszillationen wird eine Serie zeitlich sehr scharfer Intensitätspeaks bezeichnet, die beim Umschalten des Betriebszustandes des Lasers auftreten und deren technologische Kontrolle wünschenswert ist. Im Berichtsjahr 1992 war ein erstes Programmpaket zur Simulation von Relaxationsoszillationen erstellt worden.

Im Berichtszeitraum wurde dieses Simulationsprogramm in zentralen Punkten ausgebaut: Zum einen konnten durch eine analytische Mittelungsprozedur die Gleichungen der Modellierung (Ratengleichungen gekoppelt an eine partielle Differentialgleichung mit Reflexionsrandbedingungen) durch eine sehr viel effizienter lösbare Folge von Anfangswertproblemen für gewöhnliche Differentialgleichungen ersetzt werden. In Folge dieser Bemühungen gelang es außerdem, Modell und Simulationsprogramm auf den Fall zeitabhängiger Pumpleistung zu verallgemeinern. Zum anderen erfolgte durch objektorientiertes Neuerstellen des Programmpaketes (in C++) der Anschluß an die ZIB-Klassenbibliothek code++ (Ableitung des speziellen Integrators aus der Basisklasse EULSIM). In dieser Neimplementierung wurde zusätzlich eine entscheidende Beschleunigung der Lösung der auftretenden linearen Subprobleme durch Ausnutzen ihrer Spezialstruktur erreicht.

Literatur

1. Ch. Schütte, A. Hohmann, M. Dinand: *Numerical Simulation of Relaxation Oscillations of Waveguide-Lasers*. Preprint SC 93-14, ZIB-Berlin (1993).
2. M. Dinand und Ch. Schütte: *Theoretical Modelling of Relaxation Oscillations in Er-doped Waveguide Lasers*. Eingereicht in Journal of Lightwave Technology.
3. M. Dinand, Ch. Schütte, R. Brinkmann, W. Sohler, H. Suche: *Relaxation Oscillations in Er-diffused Ti:LiNbO₃ Waveguide-Laser*. Proceedings of the 6th European Conference of Integrated Optics 1993 in Neuchâtel (ECIO '93), Vol. 3 (1993).

Numerische Simulation periodischer Prozesse

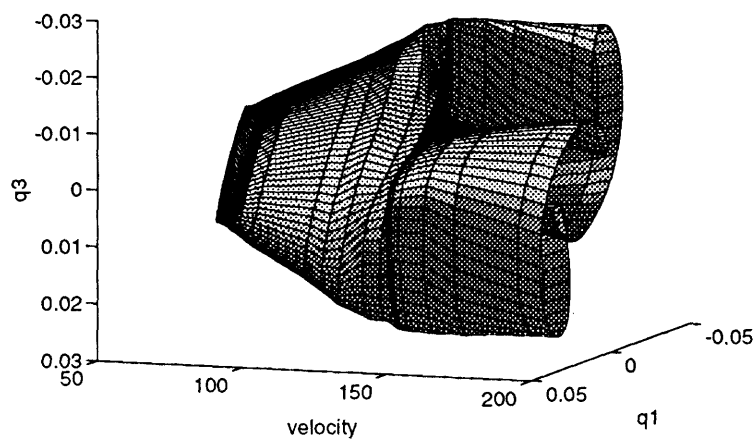
Bearbeiter: A. Hohmann, C. Wulff, P. Deuffhard

Kooperation: Prof. K. Knothe, M. Götz (TU Berlin, Institut für Luft- und Raumfahrt)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die numerische Berechnung von periodischen Lösungen autonomer Differentialgleichungen ist aus technologisch wichtigen Bereichen, wie zum Beispiel der chemischen Verfahrenstechnik und der Elektronik, nicht mehr wegzudenken. Auch für die Simulation des Verhaltens von Eisenbahndrehgestellen gewinnen nichtlineare Modelle und Effekte zunehmend an Bedeutung.

Das im Projekt "Adaptive h - p -Methoden" vorgestellte neue Verfahren zur Lösung von Randwertproblemen von parameterabhängigen Differentialgleichungen stellt eine sehr effektive Alternative zu den häufig eingesetzten Mehrziel- und Galerkin-Urabe-Verfahren dar. Es erweist sich insbesondere für technologisch interessante Genauigkeitsanforderungen gegenüber Mehrzielverfahren häufig als überlegen.

In [1] wurde zunächst ein Drehgestellmodell von H. True (TH Kopenhagen) numerisch analysiert. Die Abbildung zeigt die Grenzyklen dieses Modells ausgehend von einer Hopfverzweigung in Abhängigkeit der Geschwindigkeit. Diese Untersuchungen werden nun auf komplexere Modelle ausgedehnt, wie sie z.B. von D. Moelle am ILR, TU Berlin, entwickelt wurden.



Periodische Lösungen des Drehgestells über der Geschwindigkeit.

Literatur

1. A. Hohmann: *Inexact Gauss Newton Methods for Parameter Dependent Nonlinear Problems*. Dissertation, Freie Universität Berlin, November 1993, und Technical Report TR 93-13, ZIB-Berlin.

Bericht über die Weiterentwicklung von \LaTeX

Bearbeiter: R. Schöpf

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Jahre 1982 stellte Donald E. Knuth \TeX fertig, das ist ein programmierbares Textsatzsystem (\TeX) mit einem Satz von Basismakros (genannt plain). Leider lassen diese Makros für Anwendungen, die komplizierter sind als der Satz von Knuths eigenen Büchern, einiges zu wünschen übrig. Dies führte etwa zur selben Zeit zu Entwicklung zweier anderer Makropakete (die übrigens beide auf plain aufbauen), mit unterschiedlicher Zielrichtung: $\text{AMS-}\TeX$ für und im Auftrag der AMS, die kompliziertere mathematische Konstrukte brauchte, und \LaTeX , das das Problem der einfachen Beschreibung der Dokumentenstruktur angeht, die Trennung von Form und Inhalt. Dies geschieht dadurch, daß es die Beschreibung der Form in sogenannte "document styles" verbannt.

Das Problem der beiden Pakete ist allerdings, daß sie für verschiedene, komplementäre Zwecke geschaffen wurden, und daß sie dem steigenden Bedarf im Bereich der Dokumentenverarbeitung nicht mehr geügen.

Im Jahre 1989 wurde die Idee einer neuen Version \LaTeX_3 geboren und beschlossen, eine Zwischenversion names \LaTeX 2.10 zu schaffen, die in der Zeit bis zur Fertigstellung von \LaTeX_3 einen Teil der gesteigerten Bedürfnisse der Nutzer befriedigen sollte. Im Laufe der Zeit erkannte das Projektteam allerdings, daß dies eine Fehlentscheidung war, und ließ diese Idee fallen.

Die andere wichtige Entwicklung in diesem Jahre war die Entscheidung der AMS, die besonderen mathematischen Möglichkeiten von $\text{AMS-}\TeX$ in \LaTeX zu integrieren. Dies führte zur Entwicklung von $\text{AMS-}\LaTeX$, an der Frank Mittelbach und ich selbst wesentlich beteiligt waren.

Diese Entwicklungen führten zur heutigen Situation, in der verschiedene inkompatible Pakete existieren: Plain \TeX als Basis aller anderen, $\text{AMS-}\TeX$ mit seinem erweiterten mathematischen Formelsatz, \LaTeX mit seiner Trennung von Form und Inhalt, $\text{AMS-}\LaTeX$ als Synthese der beiden. Von all diesen erscheint nur das \LaTeX -Konzept der Trennung von Form und Inhalt zukunftsweisend.

Aber leider gibt es neben dem Standard- \LaTeX noch eine ganze Reihe in subtiler Weise inkompatibler \LaTeX -Versionen. Wegen dieser Kompatibilitätsprobleme beschloß das \LaTeX_3 -Projektteam, nun doch eine Zwischenversion zu erstellen, genannt $\LaTeX_{2\epsilon}$; und zwar stand die Testversion noch vor Weihnachten 1993 zur Verfügung.

Die wesentlichen Punkte dieser Version sind: (1) Standardisierung – es gibt von nun an nur noch eine \LaTeX -Version; (2) Wartung – es wird regelmäßige Updates geben; (3) Kompatibilität mit der alten Version ist gewährleistet; (4) zur Dokumentation werden zwei Bücher erscheinen.

Quantenchromodynamik (QCD) auf massiv-parallelem Rechner

Bearbeiter: H.C. Hege

Kooperation: K. Akemi, M. Fujisaki, M. Okuda, Y. Tago (Fujitsu, Tokyo/Japan), Ph. de Forcrand (ETH Zürich/Schweiz), T. Hashimoto (Fukui University/Japan), S. Hioki, O. Miyamura, T. Takaishi (Hiroshima University/Japan), A. Nakamura (Yamagata University/Japan) und I.O. Stamatescu (Universität Heidelberg).

Beschreibung der Forschungsarbeit: Ziel des Projektes ist die Untersuchung verschiedener nicht-perturbativer Phänomene der Quantenchromodynamik (QCD) im Rahmen der Gittereichtheorie und die ab-initio-Berechnung phänomenologischer Resultate, z.B. des Hadronenspektrums.

Ein von der Arbeitsgruppe entwickeltes Programm zur Simulation der quenched QCD (reine SU(3)-Gittereichtheorie) auf einem massiv parallelen MIMD-Rechner wurde optimiert und hinsichtlich verschiedener Eigenschaften analysiert [1]. Die im Vorjahr begonnene Monte-Carlo-Renormierungsgruppen-Analyse zur β -Funktion (Abhängigkeit der Eichfeldkopplung vom Gitterabstand bei Durchführung des Kontinuumslimits), die Finite-Size-Untersuchungen und die Rechnungen zum hadronischen Spektrum in der quenched-Näherung wurden abgeschlossen. Hinsichtlich des Skalenverhaltens ergab sich, daß *asymptotisches Scaling* auch für $\beta \approx 7$ noch nicht erreicht ist und nicht-störungstheoretische Effekte in dem Bereich $6 < \beta < 7$ sehr stark sind; einfaches Scaling hingegen ist in diesem Bereich vorhanden. Die $\Delta\beta$ -Daten lassen sich gut fiten, und zwischen der String-Spannung aus der Monte-Carlo-Renormierungsgruppen-Analyse und der aus dem statischen Quark-Potential abgeleiteten besteht über mehr als eine Größenordnung exzellente Übereinstimmung. Diese und weitere physikalische Resultate, etwa zum Hadronenspektrum, wurden in [2] zusammengefaßt.

Neue Rechnungen wurden geplant und teilweise begonnen, u.a. zum Glueball-Spektrum, zur topologischen Suszeptibilität, zum hadronischen Spektrum bei kleinen Quarkmassen, zu eichinvarianten Quarkkorrelationen und zu Kernkräften.

Literatur

- [1] K. Akemi, Ph. deForcrand, M. Fujisaki, T. Hashimoto, H.C. Hege, et. al., *Quantum Chromodynamics Simulations on a Nondedicated Highly Parallel Computer*, Yamagata-HEP-93-11 and IPS Research Report No. 93-64.
- [2] K. Akemi, Ph. deForcrand, M. Fujisaki, T. Hashimoto, H.C. Hege, et. al., *QCD on the Massively Parallel Computer AP1000*, Int. J. Mod. Phys. C 4, 1993, p. 1233-1253.

Entwicklung informationstechnischer Werkzeuge für die Museumsdokumentation

Bearbeiter: C. Saro, B. Schröder, K. Mader

Kooperation: Institut für Museumskunde (Staatliche Museen zu Berlin), Institut für Museumswesen

Beschreibung der Forschungsarbeit: Zwischen dem ZIB und dem Institut für Museumskunde der Staatlichen Museen zu Berlin – Stiftung Preußischer Kulturbesitz (kurz: IfM) besteht bereits seit 1981 eine vertragliche Zusammenarbeit, welche zur Zeit durch einen bis 1997 laufenden Vertrag abgesichert ist. Während dieser langfristigen Kooperation wurden mehrere Projekte zum Einsatz des Computers im Museumsbereich (besonders in den Bereichen der Inventarisierung und der Dokumentation) durchgeführt. Als Basissoftware wird dazu das in der ursprünglichen Version von der britischen Museum Documentation Association (MDA) entwickelte Programmsystem GOS benutzt. Das Datenbanksystem GOS wurde von der MDA speziell zur Unterstützung der Inventarisierung und Dokumentation in Museen entwickelt. Es bietet Datenstrukturen und Verarbeitungsmoduln an, die den komplexen Datenstrukturen in diesem Bereich besonders angepaßt sind. Außerdem ist GOS sehr modular aufgebaut und dadurch leicht erweiterbar. Seit 1981 wird GOS vom ZIB kontinuierlich weiterentwickelt, wobei ein identischer Leistungsumfang und eine weitgehend einheitliche Bedieneroberfläche auf den verschiedenen Hardware-Plattformen und unterschiedlichen Betriebssystemen besonders wichtig ist. Im letzten Jahr standen bei der Weiterentwicklung von GOS Aspekte im Vordergrund, die speziell für den Einsatz in großen Museen von Bedeutung sind. So konnte durch den Übergang auf eine neue Datenverwaltung eine mehrplatzfähige Version von GOS (mit Sperre auf Satzebene) zunächst unter UNIX zur Verfügung gestellt werden. Die neue Programmversion unterstützt auch beliebig viele Indexfelder (unter Berücksichtigung der komplexen GOS-Datenstruktur mit Mehrfachfeldern, Wiederholungsfeldern und Gruppenstrukturen), wodurch das Retrieval erheblich beschleunigt wird. Weiterhin wurden Weiterentwicklungen im Hinblick auf Vereinfachungen bei der Dateneingabe und bei der Datenauswertung durchgeführt. Gerade in größeren Museen ist eine wissenschaftliche Bearbeitung vorhandener Quellen oder eine Neuinventarisierung der vorhandenen Objekte in überschaubarer Zeit praktisch ausgeschlossen. Daher sind rationelle Hilfsmittel zur Überarbeitung von durch Fremdfirmen oder Hilfskräften erfaßten Daten von großer Bedeutung. Ein stark überarbeitetes Retrieval-Modul erlaubt die interaktive Formulierung auch komplexerer Suchanfragen durch eine Menüführung, wobei keine allzu gründlichen Systemkenntnisse erforderlich sind. Ebenfalls weiterentwickelt wurden die Möglichkeiten zur Verarbeitung (und zum Wiederfinden) von ungenauen Informationen (im kulturhistorischen Bereich ist eine exakte Datierung oder Herkunftsangabe eher die Ausnahme).

Fahrzeugeinsatzplanungsprobleme

Bearbeiter: N. Ascheuer, R. Borndörfer, M. Grötschel

Kooperation: I. Loiseau (Universidad Nacional de Buenos Aires, Argentinien),
G. Nasini (Universidad Nacional de Rosario, Argentinien)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Rahmen dieses Projekts bearbeiten wir ein aus einer realen Anwendung erwachsenes Problem, welches von argentinischer Seite vorgeschlagen wurde. Die argentinische Stadt Rosario wurde von der Stadtverwaltung in verschiedene Bezirke eingeteilt, in denen täglich die Straßenbeleuchtung kontrolliert wird. Zu diesem Zwecke fährt ein Auto durch die Straßen und hat die Aufgabe jede Kreuzung anzufahren. Das Ziel ist es eine Tour minimaler Gesamtlänge zu finden. Diese Tour soll alle Nebenbedingungen erfüllen, die bei der praktischen Realisierung auftreten (z.B. Einbahnstraßen und Kreuzungen, an denen Linksabbiegen verboten ist).

Das Problem, welches komplexitätstheoretisch in die Klasse der schwierigen Probleme einzuordnen ist und Parallelen zum Graphical Asymmetric Travelling Salesman Problem (siehe auch [1]) aufweist, wurde als ganzzahliges lineares Programm modelliert.

Für die praktische Lösung des Problems werden Verfahren entwickelt, die in kurzer Rechenzeit zulässige, aber nicht notwendigerweise optimale, Lösungen liefern (Heuristiken). Daneben arbeiten wir an einer (exakten) Lösung des Problems über einen polyedrischen Ansatz (Branch&Cut). Hierzu ist es notwendig, alle zulässigen Lösungen möglichst gut durch Gleichungen und Ungleichungen (Facetten) zu beschreiben. Es ist i.a. nicht möglich für derart schwierige Probleme eine vollständige Beschreibung der Lösungen zu finden. Dies ist uns aber für einige Spezialfälle gelungen. Diese facettendefinierenden Ungleichungen sind gleichzeitig gültige Ungleichungen für das allgemeine Problem. Ferner wurden (heuristische) Verfahren zur Identifikation von verletzten Ungleichungen aus diesen Klassen erarbeitet (Separationsproblem).

Literatur

1. S. Chopra, G. Rinaldi: *The Graphical Asymmetric Travelling Salesman Polyhedron : Symmetric Inequalities*. Report R. 325 (1991), IASI-CNR (Rom)

Fahrzeugumlaufplanung im Öffentlichen Personennahverkehr

Bearbeiter: M. Grötschel, A. Löbel, A. Martin

Kooperation: HanseCom GmbH (Hamburg)

Förderung: Das Projekt wurde im Schwerpunktprogramm der Deutschen Forschungsgemeinschaft *Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung* gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: In diesem Projekt beschäftigen wir uns mit dem im Öffentlichen Personennahverkehr (ÖPNV) auftretenden Fahrzeugumlaufplanungsproblem (FUPP). Das einer bedarfsgerechten Linienplanung und Fahrplanerstellung nachgeschaltete und vor der Fahrereinsatzplanung zu lösende FUPP skizziert sich wie folgt:

Aus der Linienplanung und Fahrplanerstellung lassen sich sogenannte Fahrten, jeweils definiert durch ein Streckenstück, einer Anfangs- und einer Endzeit, definieren. Jede Fahrt muß von genau einem Fahrzeug eines erlaubten Typs und eines Betriebshofs vom Anfang bis zum Ende durchfahren werden. Alle Fahrzeuge eines Typs und eines Betriebshofs werden zu sogenannten Depots zusammengefaßt. Anschließend erfolgt für jede Fahrt die Festlegung der möglichen Nachfolgefahrten. Hierbei sind insbesondere arbeits- und tarifrechtliche Nebenbedingungen zu berücksichtigen. Durch diese Übergangsfahrten entstehen nicht unerhebliche Kosten, die es zu minimieren gilt. Die Aufgabe der kostenminimalen Fahrzeugumlaufplanung ist es, auf zulässige Weise die Fahrzeuge den Fahrten so zuzuordnen, daß alle Fahrten bedient werden und die dabei entstehenden Kosten minimiert werden.

Das FUPP ist im Ein-Depot-Fall als Assignmentproblem oder Minimal-Kosten-Flußproblem polynomial lösbar. Jedoch schon ab zwei Depots reiht es sich in die Klasse der \mathcal{NP} -vollständigen Probleme im strengen Sinne ein.

Die praktischen Probleme dieser Art sind von enormer Größenordnung, tausende Fahrten am Tag und mehr sind in Großstädten durchaus zu erledigen. Gerade riesige Verkehrsbetriebe haben bei Spitzendefiziten von fast 1,5 Milliarden DM offensichtlich ihre Planungsschwierigkeiten. Derzeit gibt es keine ernstzunehmenden Verfahren, die solche großen Probleme optimal oder wenigstens mit einer beweisbaren Gütegarantie lösen. Jedoch gehen wir davon aus, daß wenige Spezialisten – wie auch unser Kooperationspartner – sehr wohl in der Lage sind, mit heuristischen Verfahren gute Umlaufpläne zu erzeugen.

Nach einer eingehenden Modellierungsphase des FUPP, bei welcher versucht wurde, die Vielzahl der Anwenderanforderungen zu berücksichtigen, begannen wir mit der theoretischen Untersuchung des dem FUPP zugrundeliegenden Polyeders. Dieser Polyeder ist definiert als die konvexe Hülle aller Inzidenzvektoren von zulässigen Umlaufplänen. Die dabei gewonnenen Erkenntnisse werden gleichzeitig in Algorithmen für das Schnittebenenverfahren umgesetzt, das zur Lösung des Fahrzeugumlaufplanungsproblems eingesetzt wird.

Kapazitätserweiterung in ausfallsicheren Netzwerken

Bearbeiter: M. Stoer

Kooperation: G. Dahl (Forschungsinstitut der Norwegischen Telekom)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Problem der optimalen Kapazitätserweiterung taucht beim Ausbau von Kommunikationsnetzwerken auf. Man möchte die Kapazitäten so auslegen, daß der vorausgesagte Verkehr fließen kann, und zwar auch dann, wenn eines der Kabel oder einer der Knoten ausfällt. Dabei stehen für jedes Kabel eine Reihe von Kapazitäten verschiedener Kosten zur Auswahl. Da die Auswahl an Kapazitäten pro Kabel begrenzt ist, und der Verkehr nicht als eine sich stochastisch verändernde Variable angesehen wird, haben wir es mit einem diskreten Optimierungsproblem zu tun.

Die Hauptidee zur Lösung dieses Problems besteht darin, die (relativ wenigen) Variablen zur Auswahl von Kapazitäten von den (sehr vielen) Variablen zur Modellierung des Verkehrsflusses zu trennen, indem man ein lineares Programm nur in den Kapazitätsvariablen löst und in Abhängigkeit von dessen Lösung die zugehörigen Flussvariablen bestimmt. Gültige lineare Ungleichungen für die Kapazitätsvariablen wurden in [1] beschrieben. Zur Lösung des zugehörigen linearen Programms wurde ein Schnittebenenverfahren sowie verschiedene Heuristiken implementiert.

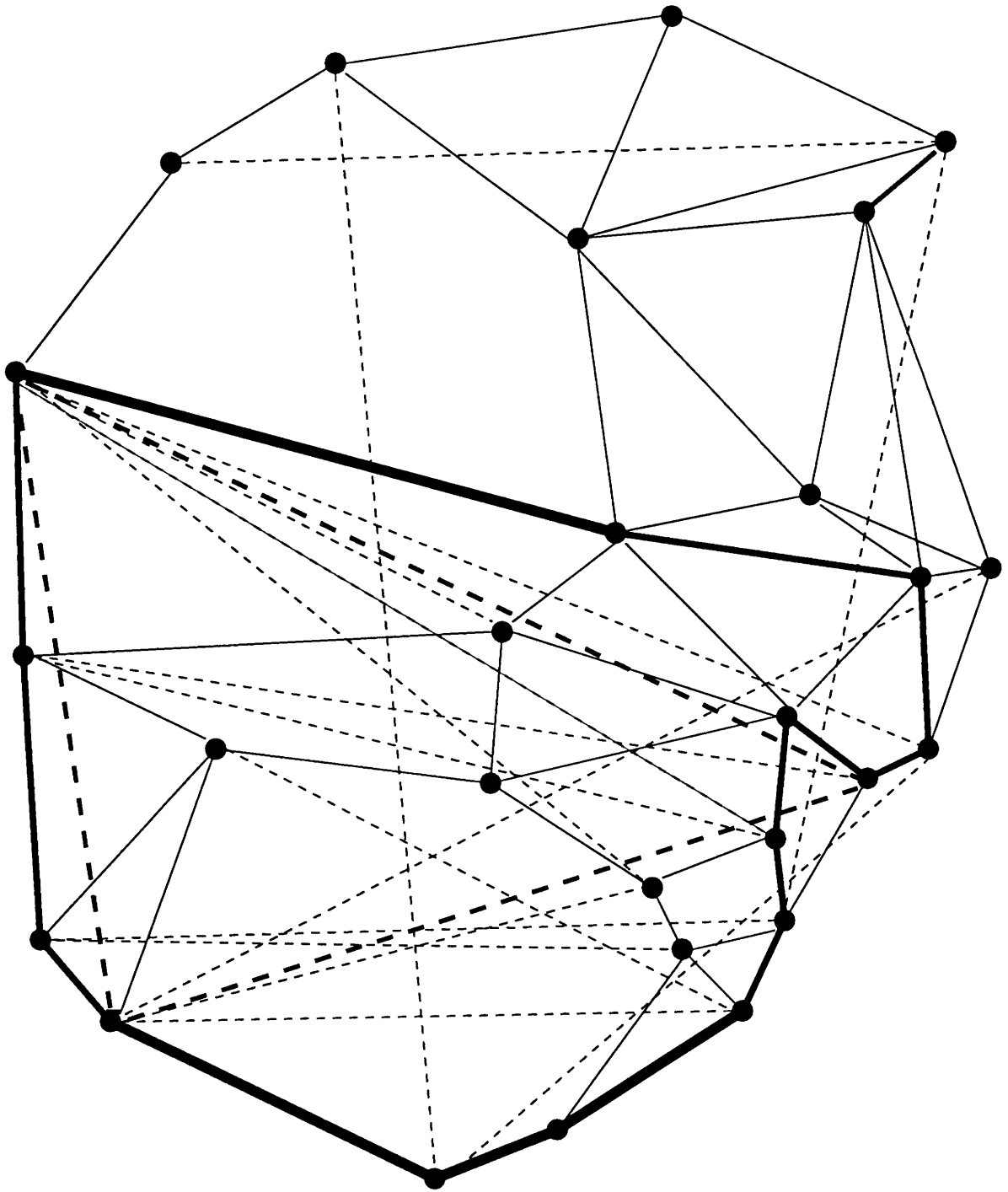
Erste Rechenergebnisse an einem selbstgewählten Beispiel mit verschiedenen Kosten für die Kapazitäten zeigen, daß die heuristischen Lösungen etwa 0 bis 5 Prozent von der vom Schnittebenenverfahren bestimmten unteren Schranke entfernt sind.

Eine optimale Lösung ist im Bild dargestellt. Die gestrichelten Linien bezeichnen die Knotenpaare, zwischen denen Verkehr fließen soll. Zwischen genau drei dieser Paare fließt ein Verkehr von 100 Einheiten, zwischen allen anderen ein Verkehr von 6 Einheiten. Die durchgezogenen Linien stellen das optimale Netzwerk dar. Dabei hat der fett gezeichnete Ring durchgehend Kapazität 252, außer auf vier Kanten mit Kapazität 1008, eine einzige etwas dünner gezeichnete Kante rechts oben hat Kapazität 63, und alle anderen haben (die kostenlose) Kapazität 6. (Preisfrage: Wie ist der Verkehr in jeder Ausfallsituation zu routen?)

Unser nächstes Ziel ist es, die Laufzeit der Heuristiken zu verbessern und spezielle Anforderungen an die Flußvariablen mitzubedenken.

Literatur

1. M. Stoer, G. Dahl: *Polyhedral Approach to Multicommodity Survivable Network Design*. Preprint SC 93-20, ZIB-Berlin 1993.



Optimale Kapazitätserweiterung

Fahrzeugeinsatzplanung im Behindertentransport

Bearbeiter: R. Borndörfer, M. Grötschel, F. Klostermeier, C. Küttner

Kooperation: Berliner Zentralausschuß für Soziale Aufgaben (BZA)

Förderung: Das Projekt wurde durch Sondermittel der Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung im Rahmen der Technologieforschung und durch die DFG gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Dieses Projekt zielt auf die Verbesserung des vom BZA betriebenen "Telebus-Fahrdienstes" für Behinderte, deren Fahrtwünsche mit einer Flotte von Spezialbussen erfüllt werden. Hierbei entsteht täglich das Dispositionsproblem, einen Fahrzeugeinsatzplan zu entwickeln, der ein Maximum an Service (möglichst pünktliche und schnelle Beförderung) bei gleichzeitiger Kostenminimierung erreicht. Seit dem 1. Juni 1992 besteht eine Kooperation zwischen dem ZIB und dem BZA mit dem Ziel, ein vollautomatisches Dispositionssystem zu entwickeln, zu testen und beim BZA zu installieren.

In Zusammenarbeit mit dem BZA wurden die betrieblichen Rahmenbedingungen ermittelt, sowie eine Datenbasis (anonyme Fahrtwunschedaten, Fahrzeugstammdaten, digitalisierter Stadtplan von Berlin, etc.) geschaffen. Das Telebus-Problem wurde als Set-Partitioning-Problem der ganzzahligen Optimierung modelliert. Die Handlungsalternativen des Planers werden dabei in einer sehr großen 0/1-Matrix (1000 Zeilen, bis zu mehreren Millionen Spalten) repräsentiert, die von einem parametrisierten Matrixgenerator erzeugt wird. Ein solcher Matrixgenerator wurde im Rahmen der Diplomarbeiten von F. Klostermeier und C. Küttner implementiert. Unter anderem enthält er eine Vielzahl von neuen heuristischen, zum Teil speziell für das Telebus-Problem und die Berliner Situation entwickelten Planungsverfahren. Der Matrixgenerator wurde vom 7. bis 20. Februar 1993 beim BZA probeinstalliert und unter realen Bedingungen getestet. Die im Rahmen dieses Projektes entwickelten Heuristiken haben sich dabei als sehr leistungsfähig und den bisher verwendeten Planungsmethoden deutlich überlegen gezeigt, siehe [1].

Mit Abschluß ihrer Diplomprüfungen wurden F. Klostermeier und C. Küttner aus Sondermitteln der Senatsverwaltung für Soziales vom BZA eingestellt und setzen dort ihre Arbeit insbesondere in organisatorischer und planerischer Hinsicht fort. Gleichzeitig wurde ein Branch&Cut-Algorithmus für das Set-Partitioning-Problem implementiert, der später ebenfalls beim BZA installiert werden soll. Die Rechenergebnisse zeigen noch erhebliche Einsparungspotentiale.

Der Algorithmus ist jedoch für einen praktischen Einsatz noch nicht geeignet. Polyedertheoretische Studien, des Set-Partitioning-, -Packing- und -Covering-Polyeders, die zur Zeit von R. Borndörfer und M. Grötschel durchgeführt werden,

Asymmetrische Travelling Salesman Probleme mit Präzedenzrelationen

Bearbeiter: N. Ascheuer, M. Grötschel, M. Stoer

Kooperation: M. Jünger und S. Thienel (Universität zu Köln), G. Reinelt (Universität Heidelberg)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Zu den meiststudierten Problemen der Kombinatorischen Optimierung gehört u.a. das Travelling Salesman Problem (TSP). Allerdings tritt es in vielen praktischen Anwendung nicht in seiner reinen Form auf, sondern in Zusammenhang mit weiteren Nebenbedingungen. Eine dieser Einschränkungen sind z.B. Präzedenzrelationen, die besagen, daß ein gewisser Ort erst besucht werden kann, wenn ein anderer schon besucht wurde.

Solche Präzedenzrelationen treten z.B. in der Fertigungstechnik auf, wo aufgrund der Produktionstechniken gewisse Arbeiten an einem Werkstück abgeschlossen sein müssen, bevor andere Arbeiten ausgeführt werden können. Auch bei der Fahrzeugeinsatzplanung treten diese Nebenbedingungen auf, wo sie besagen können, daß an gewissen Orten zuerst Ladung aufgenommen werden muß, bevor sie an anderen Orten abgeliefert werden kann.

Diese Problemklasse wurde bislang kaum untersucht. Balas, Fischetti und Pulleyblank [2] führten die ersten grundlegenden polyedrischen Untersuchungen durch. Wir arbeiten momentan an einer weitergehenden polyedertheoretischen Untersuchung des Problems und an einer algorithmischen Umsetzung dieser Resultate. Wir implementieren einen Branch&Cut-Algorithmus, um gegebene reale Problembeispiele optimal zu lösen [1].

Eine Beobachtung war, daß die Präzedenzrelationen sowohl theoretische als auch rechentechnische Schwierigkeiten mit sich bringen. Obwohl die meisten der Problembeispiele in annehmbarer Rechenzeit optimal gelöst werden konnten, ist es uns z.B. noch nicht gelungen ein Problembeispiel mit 100 Knoten optimal zu lösen, obwohl dies für vergleichbare TSP ohne Präzedenzrelationen keine beeindruckende Größenordnung mehr ist.

Literatur

1. N. Ascheuer, M. Jünger, G. Reinelt, S. Thienel: *A branch&cut algorithm for the sequential ordering problem*. (In Vorbereitung).
2. E. Balas, M. Fischetti, W.R. Pulleyblank: *The precedence constrained asymmetric traveling salesman polytope*. Report 15213 (1992), Carnegie Mellon University, Pittsburgh.

Optimierung von Flexiblen Fertigungssystemen

Bearbeiter: A. Abdel-Hamid, N. Ascheuer, M. Grötschel, N. Kamin

Kooperation: Business Unit PC, Siemens-Nixdorf AG (SNI), Augsburg

Beschreibung der Forschungsarbeit: In Augsburg befindet sich die zentrale Produktionsstätte von SNI für Personal Computer und periphere Geräte in Deutschland. Das Ziel des Projekts war es, den Materialfluß in einem komplexen, flexiblen Fertigungssystem, das aus mehreren Produktionslinien, Hochregallagern, einem fahrerlosen Transportsystem und einem automatischen Testbereich besteht (vgl. Abb. 1 und 2), zu optimieren.

Wir entwickelten Optimierungsansätze für verschiedene Teilkomponenten des Systems, die unter Echtzeitbedingungen im realen Produktionsablauf eingesetzt werden sollten (siehe [1],[2]). Um Aussagen über eine mögliche Performanceverbesserung des Gesamtsystems durch Optimierung von Teilkomponenten treffen zu können, ist es notwendig, dieses in geeigneter Weise zu modellieren. Aufgrund der Komplexität des Systems war es nicht möglich ein analytisches mathematisches Modell für das Fertigungssystem zu entwickeln, welches dieses hinreichend genau beschreibt. Wir entwickelten und implementierten deshalb ein ereignisorientiertes Simulationsmodell, welches zum einen das Gesamtsystem relativ genau abbildet, und zum anderen kurze Rechenzeiten aufweist. Dies ermöglichte es uns, quantitative Aussagen darüber zu geben, welche Auswirkung die Änderungen von Teilkomponenten auf das Gesamtsystem haben wird.

Die Frage der Minimierung der Leerfahrten des Bediengeräts eines Hochregallagers wurde als "dynamisches" Hamilton'sches Wege Problem modelliert. Ein Optimierungspaket zur Lösung dieses On-line Problems ist seit nunmehr fast zwei Jahren auf insgesamt sechs Hochregallagern mit Erfolg im Einsatz befindet. Mit Hilfe dieses Paketes ist es möglich im Hochlastbetrieb die Leerfahrzeiten des Bediengerätes um mehr als 30% zu reduzieren.

Literatur

1. A. Abdel-Hamid, N. Ascheuer, M. Grötschel, H. Schorer: *Simulation und Optimierung einer PC-Fertigung unter Echtzeitbedingungen*. Erscheint in: *Mathematik in der Praxis*, herausgegeben von A. Bachem, M. Jünger und R. Schrader.
2. T. Krippner, H. Matejka: *On-line Optimierung eines Testregallagers: Modellierung und Vergleich verschiedener Heuristiken*. Diplomarbeit 1993, Universität Augsburg.

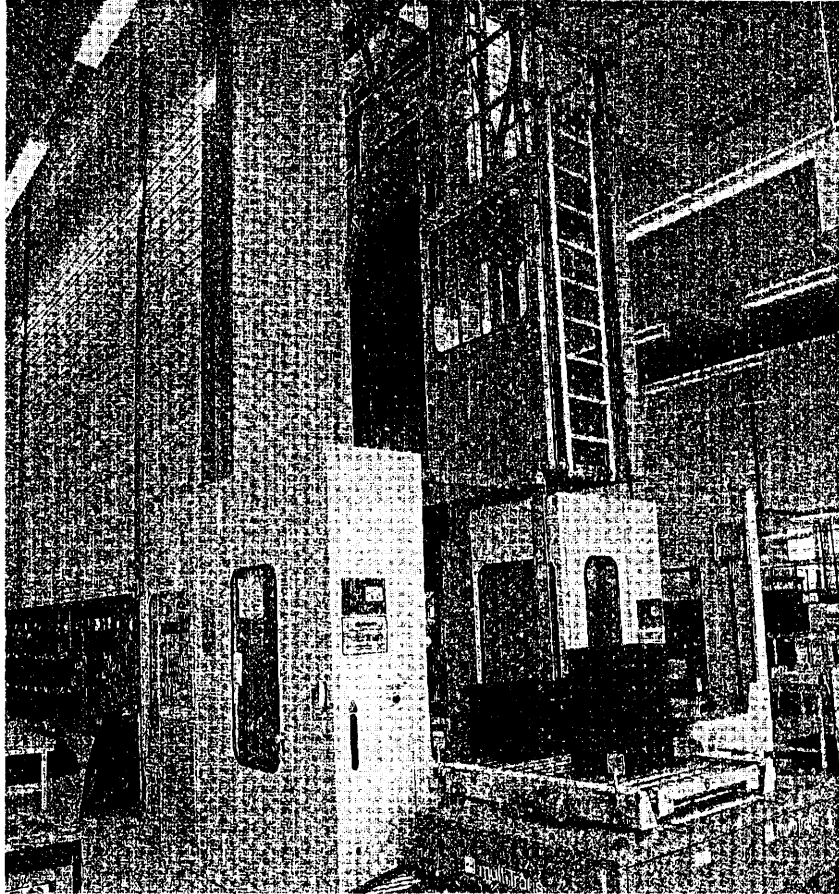


Abb. 1 : Hochregallager und fahrerloses Transportfahrzeug

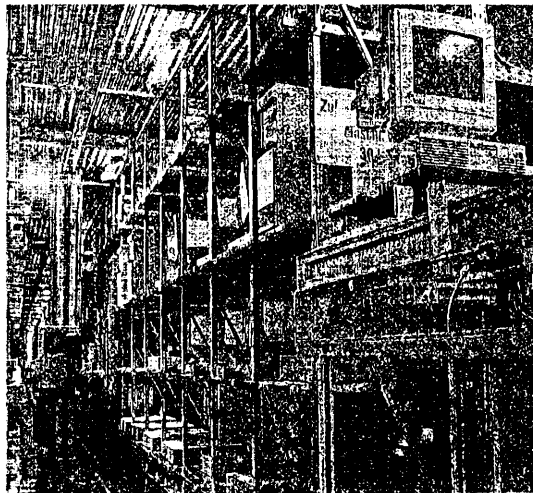


Abb. 2 : Dauertest-Regallager

Animation vom Simulationsmodellen

Bearbeiter: N. Ascheuer, B. Kirkorowicz

Beschreibung der Forschungsarbeit: In einem Kooperationsprojekt mit der Siemens-Nixdorf AG, Augsburg, ist das Simulationspaket AMSEL entstanden, welches für die Simulation eines fahrerlosen Transportsystems und der Fahrbewegung des Bediengerätes eines Hochregallagers verwendet wird. Die Simulationsprogramme, die ursprünglich auf einem Siemens PC MX300 entwickelt worden sind, werden jetzt im ZIB auf SUN-Workstations weiterentwickelt.

Für die Animation des Transportsystems wurde geeignete Software gesucht, mit der es möglich ist zwei Simulationläufe gleichzeitig zu beobachten und so leicht zwei verschiedene Algorithmen miteinander vergleichen zu können. Alle Abläufe sollen zeitgetreu dargestellt werden, gestoppt, unterbrochen oder zurückgespult werden können.

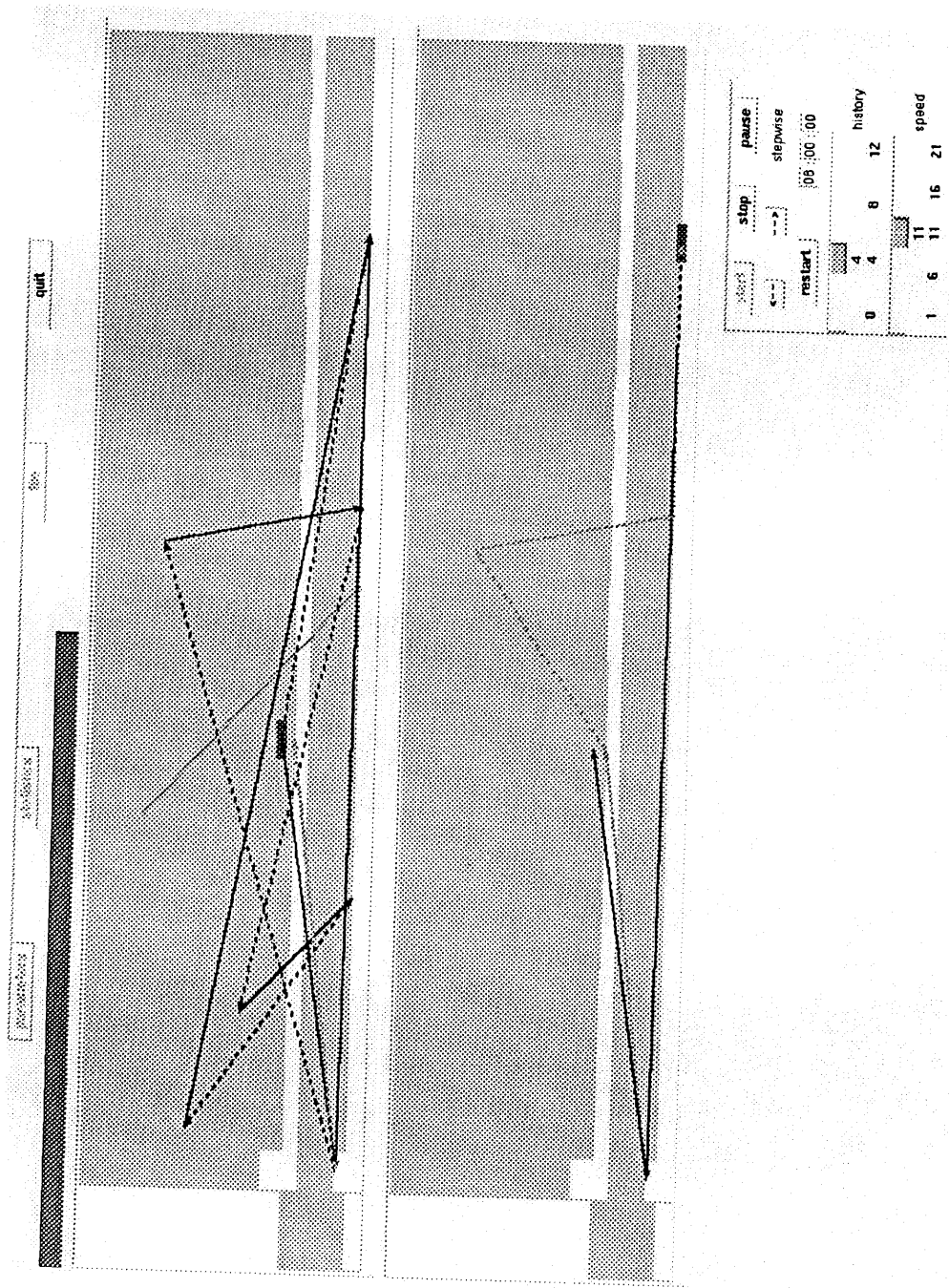
Die Programme sollen änderungsfreundlich sein, um sie leicht für die Animation anderer Bewegungsabläufe einsetzen zu können.

Die Wahl fiel auf Tk_Tcl (Tool Kit — Tool Command Language) von John K. Ousterhout von der University of California in Berkeley/USA.

In einer ersten Umsetzung des entwickelten Konzeptes werden durch ein Kontrollprogramm zwei Simulationen gestartet. Mit Hilfe eines "Graphical User Interface" wird aus 13 verschiedenen Methoden gewählt und einige Bedingungen wie der Zeitraum der Simulation festgelegt. Für das Ende der Simulation können verschiedene Statistiken angefordert werden.

In zwei untereinander angeordneten Darstellungen wird gezeigt, welche Fahraufträge sich im Auftragspool befinden, welche Leerfahrten dazu notwendig sind, wie die Fahrten ausgeführt werden und — in anderer Farbe gekennzeichnet — die gerade durch das Regalbediengerät erledigten Fahrten.

Im Fenster des Kontrollprogrammes gibt es einen Schieberegler, der interaktiv einen Zeitfaktor einstellt, mit dem Geschwindigkeit eingestellt wird, in der die Abläufe dargestellt werden soll.



Vergleichende Darstellung zweier Simulationsläufe

Stochastische Optimierung und angewandte Wahrscheinlichkeitstheorie

Bearbeiter: N. Gröwe, J. Polzehl, R. Schultz

Kooperation: A. Brandt, M. Brandt, W. Römisch (Humboldt-Universität Berlin)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Anliegen des Projektes ist die Entwicklung von Instrumenten, die der mathematischen Durchdringung und praktischen Umsetzung komplexer Modelle unter Einbeziehung von Ungewißheiten dienen. Teilprojekte beinhalten dabei sowohl eine direkte Kooperation mit der Praxis als auch die Forschung zu anwendungsbezogenen Themen der Mathematik, die eine spätere praktische Umsetzung erwarten lassen. Diese Teilprojekte beinhalten im Einzelnen:

- Stochastische Modelle der Nachrichtenverkehrstheorie und im Netzmanagement (Modellierung und Analyse von Zellströmen in ATM-Systemen, Modellierung eines UNIX-Rechners durch ein Prozessor-Sharing Modell),
- Zuverlässigkeitsuntersuchungen komplexer Systeme (Statistische Schätzverfahren für Parameter komplexer Systeme, Algorithmen zur Berechnung der Zuverlässigkeit komplexer Systeme), Stochastische Optimierung und angewandte Wahrscheinlichkeitstheorie
- Statistische Vorhersage bei empirischen Optimierungs- und Risikokriterien (Energiebedarfsvorhersagen),
- Optimierungsmethoden in der Elektroenergieerzeugung (Tageseinsatzoptimierung, Optimale Blockauswahl, Struktur und Numerik stochastischer Optimierungsaufgaben).

Die Arbeiten an diesem Projekt laufen im Rahmen einer gemeinsamen Projektgruppe des Konrad-Zuse-Zentrums mit der Humboldt-Universität Berlin. Die Gruppe wird seit Oktober 1993 von der Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung finanziell gefördert.

Literatur

1. A. Brandt, M. Brandt: *On the distribution of the number of packets in the fluid-flow approximation of packet arrival streams*. Preprint 1993, Questa (erscheint)
2. A. Brandt, M. Brandt, A. Makarov: *Abschlußbericht zum Forschungsvertrag "Verteilung von Zellankünften in einem Zeitintervall der Dauer t"*. TELEKOM FTZ, Darmstadt 1993
3. N. Gröwe: *Nonparametric estimators in chance-constrained programs*. Preprint 1993

4. N. Gröwe, W. Römisch, R. Schultz: *Planning electricity production under uncertainty*. DFG-Schwerpunktprogramm "Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung", Report No. 428 (1993)
5. W. Römisch, R. Schultz: *Strong convexity and directional derivatives of marginal values in two-stage stochastic programming*. DFG-Schwerpunktprogramm "Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung", Report No. 484 (1993)

Optimale Blockauswahl bei der Kraftwerkseinsatzplanung

Bearbeiter: R. Schultz

Kooperation: W. Römisch, D. Pateva, A. Möller (alle Humboldt-Universität zu Berlin), Vereinigte Energiewerke AG (VEAG), Berlin

Förderung: Das Projekt wurde durch Sondermittel der Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung im Rahmen der Technologieforschung und durch das BMFT gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Ziel der optimalen Blockauswahl (unit commitment) ist die kostenoptimale Auswahl von Erzeugereinheiten eines Kraftwerkssystems, so daß der auftretende Elektroenergiebedarf in einem gewissen Planungszeitraum (mittel- bzw. längerfristig) erfüllt wird. Für Energieversorgungsunternehmen ist die optimale Blockauswahl eine wichtige Routineaufgabe bei der Kraftwerkseinsatzplanung. Resultat der optimalen Blockauswahl sind Einsatzpläne für die einzelnen Kraftwerksblöcke. Diese beinhalten Festlegungen, wann die Blöcke ans Netz zu schalten sind, wann sie vom Netz zu nehmen sind und in einem Warmhaltestatus verbleiben oder wann sie ganz auf Null zu fahren sind. Darüber hinaus werden für die Zeit der Zuschaltung ans Netz für jeden Block zu produzierende Mengen an Elektroenergie bezüglich einer gewissen Zeitrasterung (z.B. Stundenintervalle) festgelegt. Bei Kraftwerkssystemen, die überdies Pumpspeicherwerke und/oder Verträge mit externen Anbietern/Abnehmern einsetzen, müssen für diese ebenfalls Fahrpläne erstellt werden.

Bei der optimalen Blockauswahl handelt es sich um ein Optimierungsproblem, das sowohl stetige (zu produzierende Energiemengen) als auch binäre (Schaltregimes der Blöcke) Variablen beinhaltet und über Nichtlinearitäten in der Zielfunktion (Brennstoffkosten) verfügt. Für realistische Erzeugersysteme ergeben sich schnell viele tausend Variable. Für Optimierungsaufgaben dieser Art gibt es momentan weder eine allgemeine Theorie noch zufriedenstellende Lösungsverfahren. Daher werden in vorhandenen Algorithmen zur optimalen Blockauswahl exakte Methoden (dynamische Optimierung, Lagrange'sche Relaxation) und Heuristiken (Prioritätslisten) miteinander verknüpft.

Im Projekt wird nun einerseits ein neuer primaler Zugang mittels kombinatorischer Optimierung (Branch&Cut Technik) verfolgt. Durch Elimination der stetigen Variablen wird dabei die Gesamtvariablenzahl erheblich verkleinert. Andererseits wird der bekannte duale Zugang algorithmisch mit modernen Methoden der nichtdifferenzierbaren Optimierung (Bundle-Trust Verfahren) verbessert. Durch Kopplung beider Zugänge ergeben sich wechselseitig Gütekriterien für aktuelle primale und duale Iterationen.

Die im Projekt erstellte Software kann in Energieversorgungsunternehmen als eine zentrale Komponente bei der rechnergestützten Kraftwerkssteuerung genutzt werden. Größere Energiesysteme sind so über längere Optimierungszeiträume mit höherer Präzision steuerbar. Modell und Verfahren werden an die Erzeugerstruktur der Vereinigten Energiewerke AG (VEAG) Berlin angepaßt, die in diesem Projekt als Verbundpartner mitwirkt.

Das Projekt ist Bestandteil des Förderprogramms "Anwendungsorientierte Verbundvorhaben auf dem Gebiet der Mathematik" des Bundesministeriums für Forschung und Technologie.

Literatur

1. J. Guddat, W. Römisch, R. Schultz: *Some Applications of Mathematical Programming Techniques in Optimal Power Dispatch*. Computing **49**, 193–200 (1992)
2. A. Möller: *Über die Lösung des Blockauswahlproblems mittels Lagrange'scher Relaxation*. Diplomarbeit, Humboldt-Universität zu Berlin, Fachbereich Mathematik, in Vorbereitung.

4 Wissenschaftliche Dienstleistungen

Das DMV-Projekt "Fachinformation" – Status und Perspektiven

Bearbeiter: M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber

Kooperation: 51 Mathematische Institute und Fachbereiche an Universitäten und Hochschulen sowie außeruniversitäre Forschungseinrichtungen in Deutschland, Fachinformationszentrum Karlsruhe, Springer Verlag, Deutsche Mathematiker-Vereinigung, Deutsche Physikalische Gesellschaft, Projektträger Fachinformation

Förderung: Das Projekt wurde durch das BMFT gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Jahre 1993 wurde das 1992 begonnene DMV-Projekt "Fachinformation" weitergeführt. Alle 51 Institutionen, die an diesem Projekt teilnehmen, konnten Anfang des Jahres 1993 den Aufbau ihrer technischen Infrastruktur abschließen, so daß der Zugriff auf die Datenbanken des FIZ Karlsruhe und des Springer-Verlages ab diesem Zeitpunkt möglich ist. In mehr als 30 Institutionen gibt es heute über den Netzzugang einen direkten Zugriff auf die Datenbanken vom Arbeitsplatz des Wissenschaftlers aus. Ursprüngliche Einzelplatzlösungen als Rechercestationen sind vielfach auf Netzzugänge erweitert worden. Die Gesamtnutzung der Online-Datenbank MATH innerhalb des DMV-Projekts stieg von durchschnittlich ca. 14 TDM auf 33 TDM pro Monat an. Es ist hier jedoch anzumerken, daß die Nutzung der Datenbanken in den einzelnen Institutionen noch stark differiert. Mehr als 1500 Wissenschaftler und Studenten nahmen an Vorlesungen, Seminaren und Übungen zu Datenbankrecherchen in den Fachbereichen teil. In einigen Institutionen sind diese Veranstaltungen inzwischen auch Bestandteil der Vorlesungsverzeichnisse. Die Workshops und der e-mail-Verteiler des Projekts sind zu einem Diskussionsforum der Datenbanknutzer und der Datenbankproduzenten geworden. Ein konkretes Resultat ist die Neukonzeption der CD-ROM-Version der Datenbank MATH, die 1994 unter einem völlig neuen Retrievalmodus auch in einer UNIX-Version erscheinen wird. Den Fachbereichen wurde zusätzlich eine Trainings- und Übungs-CD-ROM zur Verfügung gestellt, die auch einem Erstnutzer einen einfachen Einstieg in Datenbankrecherchen ermöglicht. Insgesamt hat das DMV-Projekt "Fachinformation" eine gute Akzeptanz und Resonanz in den mathematischen Institutionen erreicht. Für eine dauerhafte Absicherung und Nutzung ist allerdings eine umfassende Erschließung der Möglichkeiten elektronischer Fachinformation notwendig. Insbesondere bieten neue Tools im Internet (Gopher, WAIS, WWW) Möglichkeiten für einen (relativ einfachen) Aufbau lokaler Informationssysteme. Diese Dienste werden heute schon z.B. von der American Mathematical Society oder der Society of Industrial and Applied Mathematics genutzt, um ein breites elektroni-

Elektronische Bibliothek eLib für mathematische Software

Bearbeiter: W. Dalitz, J. Lügger, M. Mayer

Kooperation: R. Boisvert (National Institute of Standards and Technology – NIST, Center for Computing and Applied Mathematics, Gaithersburg, USA), E. Grosse (AT&T Bell Labs, New Jersey, USA), A.C. Hearn (The Rand Corporation, Santa Monica, USA), Fachgruppe “Numerische Software” von GI, GAMM und DMV, Fachgruppe “Computeralgebra” von GI, GAMM und DMV, G. Schneider (Institut für Experimentelle Mathematik, Universität Essen)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die elektronische Bibliothek eLib ist jetzt schon seit 4 Jahren im Einsatz und bietet der mathematischen Community einen kostenfreien Zugriff auf nun über 10000 mathematische Algorithmen und Dokumente aus allen Bereichen des wissenschaftlichen Rechnens. Insbesondere die hauseigenen Softwareentwicklungen werden hierüber der wissenschaftlichen Öffentlichkeit zur Verfügung gestellt.

Das heutige Verständnis von Informationssystemen erfährt einen grundsätzlichen Wandel. Informationen werden zunehmend nicht mehr zentral bereitgestellt und gepflegt, sondern verteilt angeboten. Möglich ist dies heute durch konsequenten Einsatz von auf Client-Server Architekturen basierender Software, die es nicht nur erlaubt, andere Informationsserver direkt anzusprechen, sondern die sich auch durch eine komfortable Benutzerschnittstelle auszeichnet. Im Berichtszeitraum haben wir deshalb die am ZIB verfügbare mathematische Software zunehmend über diese Möglichkeit offeriert, die den Auf- und Ausbau der im Internet weithin verbreiteten Informationsserver wie gopher, WWW und WAIS beinhaltet. Durch das Zusammenspiel dieser Server untereinander, erhält man sogar zusätzliche Funktionalitäten. Es ist z.B. möglich, eine WAIS-Anfrage über einen Gopher- bzw. WWW-Client zu starten oder einen Gopher-Server über einen WWW-Client abzufragen. Die Integration von mathematischer Software in einen WAIS-Server gelang dabei nur auf Umwegen. Statt der fraglichen Indizierung von z.B. Fortranquellen und Datenfiles, haben wir die Metainformation dieser Dateien indiziert, die i.d.R. in sogenannten Indexfiles schon bereitstanden. Dies erlaubt dann eine aussagekräftige Recherche über die am ZIB gehaltene Software, mit direktem Zugriff auf ebendiese. Für den Zugriff auf die o.g. Informationsserver ist allerdings die Anbindung an das Internet wesentliche Voraussetzung. Die eLib als Zugriffstool hat im Gegensatz zu den o.g. Internet-Tools immer schon einen größeren Anwendungskreis unterstützt, so daß man mit ihr eben auch über Datex-P/X.25 oder über E-mail (und sogar über eine Modemschnittstelle) auf ihre Ressourcen zugreifen kann. Daß die sehr guten Netzanbindungen des ZIB (noch) nicht überall selbstverständlich sind, sollte man in diesem Zusammenhang bedenken. Deswegen unterstützen wir auch weiterhin die verschiedenen technischen Zugangsmöglichkeiten zur eLib.

Literatur

1. R.F. Boisvert, S.E. Howe, D.H. Kahaner: *The Guide to Available Mathematical Software Classification System*, National Institute of Standards and Technology, Rep. NISTIR 4475, (Nov. 1990)
2. R.F. Boisvert, S.E. Howe, D.H. Kahaner: *GAMS: A Framework for the Management of Scientific Software*, ACM TOMS, **11**, No. 4, pp. 313–355 (Dec. 1985)
3. J.J. Dongarra, E. Grosse: *Distribution of Mathematical Software via Electronic Mail*, Comm. ACM, **30**, No. 5, pp. 403–407 (May 1987)
4. J. Lügger, W. Dalitz: *Verteilung mathematischer Software mittels elektronischer Netze: Die elektronische Softwarebibliothek eLib ZIB*, Technical Report TR 91-2, (Feb. 1991)

Einsatz der Informationstechnik im Museum

Bearbeiter: C. Saro, B. Schröder, K. Mader

Kooperation: Deutsches Historisches Museum, Institut für Museumskunde, Institut für Museumswesen, Bayerisches Nationalmuseum, Museum für Völkerkunde (Staatliche Museen zu Berlin), Museum für Volkskunde (Staatliche Museen zu Berlin), Museen in Sachsen-Anhalt und Mecklenburg-Vorpommern

Beschreibung der Forschungsarbeit: Seit einigen Jahren wird das am ZIB weiterentwickelte Datenbankprogramm GOS auch von einzelnen großen Museen benutzt. Die Zusammenarbeit ist zum Teil durch direkte Kooperation mit dem ZIB, zum Teil durch die Kooperationsverträge mit dem Institut für Museumskunde bzw. dem Institut für Museumswesen geregelt. Mit dem Deutschen Historischen Museum (DHM) besteht seit September 1991 ein direkter Kooperationsvertrag. Am DHM wird GOS auf etwa 40 zum großen Teil vernetzten PC's unter dem Betriebssystem OS/2 eingesetzt. Dabei wurden bisher (Januar 1994) etwa 80.000 Objekte nach einem sehr ausführlichen Kategorienschema (ca. 240 Kategorien) inventarisiert. Der Gesamtbestand des DHM wird auf ungefähr 600.000 Objekte geschätzt. Seit Mitte 1992 gibt es eine intensive Zusammenarbeit mit dem Bayerischen Nationalmuseum in München. Ziel eines Projekts ist dort die Umstellung einer bisher manuell geführten Standortkartei für etwa 200.000 Objekte auf ein Novell-Computernetz. Die von einer Fremdfirma vorgenommene Datenerfassung wurde im Dezember 1993 abgeschlossen. Nach der dringend notwendigen Überarbeitung dieser Daten kann mit einem zunächst probeweisen Einsatz der neuen Standortverwaltung begonnen werden. Das Anfang 1992 begonnene Projekt am Museum für Völkerkunde (der Staatlichen Museen zu Berlin) zur EDV-Unterstützung der Rückführung von im zweiten Weltkrieg nach Leningrad ausgelagerten Beständen konnte 1993 abgeschlossen werden. Durch verschiedene Vergleichslisten konnte ein Abgleich der ausgelagerten mit den rückgeführten Beständen durchgeführt werden. Die bei diesem Projekt gesammelten Erfahrungen und Daten bilden die Grundlage für eine weitergehende Inventarisierung an mehreren Abteilungen des Völkerkundemuseums. Am wiedervereinigten Museum für Volkskunde der Staatlichen Museen zu Berlin laufen seit 1992 zwei verschiedene Projekte. Beim ersten dieser Projekte wurden Hilfsmittel für die Unterstützung des sehr kurzfristig notwendig gewordenen Umzugs des Museums von der Museumsinsel geschaffen. Längerfristig ist auch hier in einem zweiten Projekt an eine vollständige Inventarisierung der Bestände gedacht (etwa 200.000 Objekte). Das Mitte 1992 in Zusammenarbeit mit dem Institut für Museumswesen begonnene Projekt zur computermäßigen Umsetzung eines in der ehemaligen DDR für die meisten Museen verbindlichen Handbuchs zur Inventarisierung konnte 1993 durch mehrere Einführungskurse an ca. 15 Museen in einen routinemäßigen Betrieb übergehen.

Visualisierungsservice

Bearbeiter: H.Ch. Hege, T. Höllerer, H. Jaedicke, J. Langendorf, O. Paetsch, D. Stalling

Kooperation: U. Weinberg, S. Träger, D. Urbaniak (Terratools), K. Fischer (Forced Media)

Beschreibung der Entwicklungs- und Serviceprojekte: Schwerpunkte der Gruppe *Visualisierung* waren die Bereitstellung einer geeigneten Geräteausstattung, die Auswahl, Beschaffung und Anpassung geeigneter Fremd-Software, die Entwicklung eigener Visualisierungs-Software und die Durchführung von Projekten der wissenschaftlichen Visualisierung.

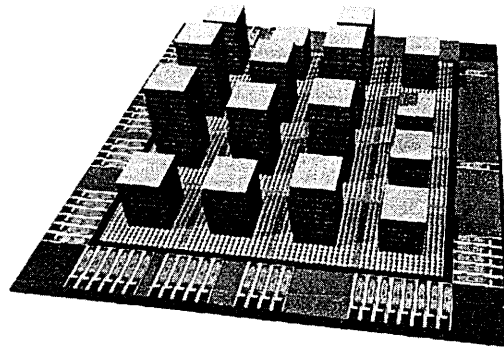
Die interaktive Visualisierungsumgebung IRIS-Explorer 2.0 wurde um neue Module erweitert, so daß u.a. auf Tetraedergittern definierte Daten visualisiert werden können. Dadurch kann das bisher verwendete Programm GRAPE teilweise ersetzt werden. In einer internen Studie wurden die Visualisierungsmöglichkeiten derartiger Daten mit GRAPE und Explorer verglichen. Ebenfalls wurden Vergleiche zwischen Explorer und dem direkten Konkurrenzprodukt AVS für das gleiche Einsatzgebiet durchgeführt. Hierzu wird ein Technical Report erscheinen. Die optimale Nutzung der verschiedenen, recht heterogenen Softwaresysteme erfordert die Entwicklung und Implementierung geeigneter Bindeglieder. So wurde zum Beispiel ein Konverter erstellt, um Molekülkdaten, die mit UniChem auf der Cray berechnet wurden, für leistungsfähige Visualisierungssysteme verfügbar zu machen. Weiterhin wurde im Berichtszeitraum die Entwicklung der grafischen Benutzerschnittstelle für GRAZIL abgeschlossen. Dadurch ist die Benutzung dieses Plotprogrammes erheblich vereinfacht worden. Die zugehörige Dokumentation wurde neu gestaltet und als Technical Report herausgegeben. Für das von GRAZIL benutzte GKS wurde ein X11-Ausgabetreiber implementiert.

Die Programme zum Aufzeichnen und Schneiden computererzeugter Bildsequenzen wurden komplett neu implementiert und mit einer prozeduralen Schnittstelle versehen. Ebenso wurden die Programme zur Bildaufzeichnung mit dem Diabelichter weiterentwickelt und um Backup-Möglichkeiten ergänzt. In Zusammenarbeit mit anderen Abteilungen und externen Kooperationspartnern wurden Videofilme zu den Themenbereichen Hyperthermieplanung und Strömungsforschung erstellt. In diesem Zusammenhang wurde vorhandene Software durch Eigenentwicklungen teilweise erheblich erweitert.

Anwender-Betreuung und -Information: Neben der Betreuung von Anwendern in Einzelprojekten waren die vielfältigen Grafik- und Visualisierungsmöglichkeiten am ZIB allen ZIB-Mitarbeitern sowie den externen Benutzern nahezubringen. Dazu wurde eine aktuelle Version des *Handbuchs zur Visualisierung am ZIB* erstellt. Am Aufbau eines Visualisierungsservice für externe Benutzer der ZIB-Rechner wurde unterstützend teilgenommen. In Zusammenarbeit mit der Abt. Vektorrechner und externen Kooperationspartnern wurden Planungen und Vor-

arbeiten für Visualisierungsprojekte im geplanten *Regionalen Testbed für Breitbandnetze in der Region Berlin/Brandenburg* durchgeführt.

Filmische Dokumentation der wissenschaftlichen Arbeit am ZIB: Um die Arbeits- und Forschungsschwerpunkte am ZIB in einem Film zu dokumentieren, wurde zunächst ein Drehbuch konzipiert und teilweise bereits mit der Anfertigung computeranimierter Sequenzen begonnen. Insbesondere wurde in Anlehnung an eine Szene aus dem Filmklassiker "Metropolis" ein Vorspann erstellt, der allgemein für Videoproduktionen am ZIB benutzt werden soll. Um Daten und Ergebnisse aus ganz unterschiedlichen Projekten mit dem Softwaresystem Advanced Visualizer der Firma Wavefront Technologies geeignet visualisieren zu können, wurden mehrere Werkzeuge und Konverter entwickelt, die teilweise auch allgemeiner verwendbar sind. Die Arbeiten an dem Film wurden in Kooperation mit externen Partnern durchgeführt.



Erste Iterationsstufe der Zellaufteilung auf einer VLSI-Chip-Grundfläche bei Lösung des Plazierungsproblems (Einzelbild aus Film).

Literatur

1. Abt. Visualisierung und Paralleles Rechnen: *Handbuch zur Visualisierung am ZIB*, Konrad-Zuse-Zentrum, TR 92-7 (1993)
2. J. Langendorf, O. Paetsch: *GRAZIL, Beschreibung der Version 6.1 des Plotpakets*, Konrad-Zuse-Zentrum, TR 93-1 (1993)

Paralleles und verteiltes Rechnen

Bearbeiter: M. Grammel, H.Ch. Hege, G. Skorobohatyj, R. Wunderling

Beschreibung der Forschungsarbeit: *Evaluation paralleler Rechnersysteme:* In Zusammenarbeit mit der Abteilung Vektorrechner wurde im Berichtsjahr ein Konzept für den Ausbau des Berliner Landeshöchstleistungsrechners erarbeitet. Es sieht eine substantielle Erweiterung der Rechenkapazität des Universal-Vektorrechners sowie den Einstieg in die zukunftssträchtige Technologie massiv-paralleler Rechnersysteme vor. Das Konzept stützt sich auf eine umfangreiche Evaluierung und Marktanalyse, für die die Abteilung Visualisierung und Paralleles Rechnen eine Suite von Benchmarkprogrammen zusammenstellte, die sowohl Kernalgorithmen aus den internen Bereichen Numerik, kombinatorische Optimierung und Symbolik umfaßt, als auch Algorithmen externer Nutzer. Zusätzlich wurde ein Kriterienkatalog zur Beurteilung einer angebotenen Rechnerausstattung erstellt. Eine detaillierte Auswertung der von den Anbietern gelieferten Ergebnisse und Informationen ergab eine eindeutige Präferenz. Die Realisierung des Ausbaukonzeptes wurde Ende des Jahres beantragt.

Implementierung von Kernalgorithmen der kombinatorischen Optimierung: Verschiedene Algorithmen der Netzwerkflußtheorie wurden implementiert und parallelisiert. Wie im Vorjahr wurde die Parallelisierung auf externen Rechnern, eine Intel Paragon und iPSC/860 der KFA Jülich sowie ein Fujitsu AP1000 von Fujitsu Tokio, vorgenommen. Für den "minimum mean cycle"-Algorithmus von Young, Tarjan und Orlin zeigte sich, daß eine Beschleunigung auf diesen Rechnersystemen nicht erzielt werden kann, da die Diskrepanz zwischen der feinen Granularität des Algorithmus und den Latenzzeiten der Prozessorkommunikation zu groß ist. Dies erscheint uns für weitere Kernalgorithmen der kombinatorischen Optimierung verallgemeinerbar. Weitere Algorithmen mit theoretisch guter Parallelisierbarkeit wurden implementiert, erwiesen sich jedoch im sequentiellen Fall gegenüber anderen Algorithmen als unterlegen. So kann der auf dem "minimum mean cycle"-Algorithmus aufbauende "negative cycle"-Algorithmus nicht mit einem Netzwerk-Simplexalgorithmus zur Lösung des "minimum cost flow"-Problems konkurrieren. Ein jüngst von Karger und Stein entwickelter "minimum cut"-Algorithmus bietet grobgranulare Parallelität und zeigte gute Skalierbarkeit, ist jedoch z.B. sequentiellen "preflow-push"-Algorithmen unterlegen.

Infrastruktur: Neben der Pflege bereits installierter Software wurde das Programmsystem "LEDA" (Library of Efficient Datastructures and Algorithms) zur Verfügung gestellt und weitere wie „1stGrade“ und "daVinci" für den Bereich kombinatorische Optimierung evaluiert. Zum Verteilen von Anwendungen im Workstation-Netz wurde die neueste Version der "Message Passing"-Bibliothek PVM ("Parallel Virtual Machine"), ein De-facto-Standard, bereitgestellt und eingesetzt.

Daten- und Programmsammlung für den Bereich Mathematical Programming / Kombinatorische Optimierung

Bearbeiter: G. Skorobohatyj

Kooperation: Autoren von Public Domain Codes

Beschreibung der Forschungsarbeit: Aufgrund der Zielrichtung des ZIB, effiziente Algorithmen zur Lösung von Problemen aus verschiedenen Anwendungsbereichen zu entwickeln, entstand der Wunsch nach einer Online-Sammlung von Testdaten als Vergleichsbasis für den Bereich "Mathematical Programming" (kombinatorische Optimierung, lineare und ganzzahlige Programmierung, etc.) sowie einer Sammlung von Referenzcodes für neuere Algorithmen.

Eine Testdatensammlung "MP-TESTDATA" wurde aus Beiträgen von ZIB-Mitarbeitern und anderen Instituten aufgebaut und in der ZIB-eLib abgelegt, wo sie allgemein zugänglich zur Verfügung steht. Die Sammlung enthält auch Hinweise auf andere Quellen, da dem Benutzer ein möglichst umfassender Überblick geboten werden soll. Eine Codesammlung "MATHPROG", die zur Zeit hauptsächlich Programme für Netzwerkflußprobleme enthält, wurde nach Rücksprache mit den Autoren aus Public-Domain-Codes und eigenen Codes zusammengestellt. Beide Sammlungen werden gepflegt und laufend ergänzt.

5 Rechenzentrum

5.1 Aufgaben und Organisation

Das Rechenzentrum des ZIB hat folgende Aufgaben:

- Betrieb und Ausbau des Landeshöchstleistungsrechners als Dienstleistungsangebot des ZIB an Universitäten und Forschungseinrichtungen im Land Berlin und im Norddeutschen Vektrorechnerverbund.
- Erschließung der weiteren Höchstleistungsrechner im Norddeutschen Vektrorechnerverbund für Berliner Nutzer.
- Schaffung und Unterhaltung der informationstechnischen Basis für die Forschungsarbeit des ZIB.

Die Entwicklungsprojekte des Rechenzentrums sind grundsätzlich an seine Serviceaufgaben gebunden. Über diese Projekte wird an anderer Stelle berichtet. Ein Organigramm des Rechenzentrums findet sich in Kapitel 2 dieses Berichtes.

5.2 Ausbau des Landeshöchstleistungsrechners

5.2.1 Ausbaupläne

In einer Voranfrage an den Wissenschaftsrat vom 12. Mai 1993 haben wir eine ausführliche allgemeine Begründung für den geplanten Ausbau gegeben. Diese Begründung ist nach wie vor gültig und wird im folgenden nochmals wiedergegeben.

“Bedeutende Teilgebiete der Physik, Chemie und Ingenieurwissenschaften, aber auch der Medizin, der Geowissenschaften und Umweltforschung sind immer noch auf Supercomputer als Forschungsinstrument angewiesen, insbesondere werden teure Experimente teilweise durch kostengünstige Simulationen auf Supercomputern ersetzt. Sehr viele der untersuchten Probleme sind so komplex, daß mit stark vereinfachten Modellen und reduzierten Problemgrößen gearbeitet werden muß; die aktuellen Fragestellungen und Problemgrößen orientieren sich daher am technisch Machbaren, d.h. internationale Konkurrenzfähigkeit erfordert für solche Forschungsgebiete Zugriff auf Rechner der höchsten Leistungsklasse nach internationalem Standard. So wurden Simulationen der Schadstoffausbreitung vor 10 Jahren notgedrungen noch ohne Berücksichtigung der chemischen Reaktionen in der Atmosphäre gerechnet, während seit etwa 5 Jahren die Möglichkeit besteht, durch Hinzunahme einer wachsenden Zahl von chemischen Reaktionen Resultate zu erhalten, die der Wirklichkeit erheblich näherkommen. Methoden der ab initio Quantenchemie gestatten heute die Berechnung von Eigenschaften kleinerer und mittlerer Moleküle mit einer Güte, die mit dem Experiment vergleichbar sind, so daß zunehmend derartige Simulationen kostengünstiger auch von “Nicht-Theoretikern” parallel zum Experiment durchgeführt werden. Dynamische Simulationen molekularer Systeme auf verschiedenen theoretischen Niveaus gewinnen zunehmend an Bedeutung, lassen sich jedoch nur unter drastischen Einschränkungen auf den gegenwärtig verfügbaren Computersystemen realisieren. Zu den wünschenswerten Themenkreisen, die aber zur Zeit nur unvollkommen durchführbar sind, zählen zum Beispiel:

- die routinemäßige ab initio Berechnung von Molekülen mit mehr als 100 Atomen;
- die Untersuchung der Dynamik kleiner reaktiver Systeme mit ab initio Methoden;
- die Simulation von dynamischen Prozessen in Biosystemen in einem Zeitintervall oberhalb des Picosekunden-Bereiches;
- die genaue Berechnung von Eigenschaften angeregter Zustände großer Systeme;
- die hinreichend genaue Modellierung von Lösungsmiteleinflüssen auf chemische Reaktionen.

Der Preis für solche fortgeschrittenen Computeranwendungen ist ein extrem angewachsener Hauptspeicherbedarf, verbunden mit Anforderungen an Prozessorleistung und Hintergrundspeicher, die vor 5 Jahren kaum vorstellbar waren. In der Medizin sind inzwischen nicht nur die klassischen Anwendungen - wie z.B. große epidemiologische Modelle, tomographische Diagnoseverfahren und Bestrahlungspläne - durch Einsatz von Supercomputern signifikant gefördert worden, sondern in neuerer Zeit knüpfen sich auch bei der Suche nach Krebs- und AIDS-Heilmitteln große Hoffnungen an den Einsatz von Supercomputern. Aufbauend auf ermutigenden Forschungsergebnissen hat die Industrie in den Industrienationen begonnen, Supercomputer in den Entwicklungsabteilungen einzusetzen. Nach der Raumfahrtindustrie und den Rohstofferkundungsfirmen waren es vor allem die Automobilfirmen, die inzwischen vollständig mit Supercomputern ausgestattet sind. Gleichzeitig begannen sich die Supercomputer in der Elektronikindustrie durchzusetzen. Seit etwa 4 Jahren ist die chemische Industrie das strategische Marktziel der Supercomputerhersteller. Die in Berlin ausgebildeten Wissenschaftler, die es gelernt haben, in ihren Gebieten Supercomputer und die dafür erforderlichen Methoden einzusetzen, sind weltweit anerkannte und gesuchte Fachleute. Der Supercomputer in Berlin dient also nicht nur der Forschung, sondern auch der Lehre auf höchstem Niveau."

Der zuletzt zitierte Absatz aus der vom Senat von Berlin am 27. April 1993 verabschiedeten Strukturplanung zur "Ausstattung der Berliner Hochschulen mit Geräten der Informations- und Kommunikationstechnik" zeigt deutlich, wie wichtig neben dem Höchstleistungsrechner für Probleme der höchsten Komplexitätsstufe auch ähnlich strukturierte Geräte kleinerer Dimension als Bereichsrechner oder auch zentrale Server, insbesondere auch für die Lehre, sind.

"In Berlin haben sich neue, inzwischen als eigenständige Forschungsdisziplinen anerkannte Forschungsgebiete etabliert, in denen Computer, meist Supercomputer, als ausschließliches Forschungsinstrument genutzt werden. Die künftige Attraktivität des Wissenschaftsstandortes Berlin in den Augen der (meist jüngeren) Wissenschaftler, die solche Forschungsrichtungen vertreten, steht und fällt mit dem Angebot an Superrechnerkapazität. Ohne Beitrag des Landes Berlin zum Supercomputing wäre die bisherige günstige Entwicklung der theoretisch orientierten Fächer an den Berliner Universitäten, an denen zahlreiche Arbeitsgruppen auf die Nutzung von Supercomputern existenziell angewiesen sind, nicht möglich gewesen. Namhafte Forscherpersönlichkeiten konnten und können nur durch das Angebot ausreichender Supercomputerkapazität in Berlin gehalten werden. Auch der Zugriff auf die nicht unerheblichen Superrechnerkapazitäten anderer Bundesländer war nur möglich, weil Berlin im Austausch seinerseits Kapazitäten anbieten konnte.

Ein günstiger Einfluß auf die industrielle Entwicklung des Landes ist in erster Linie durch die Ausbildung hervorragender Wissenschaftler, die methodisch den Umgang mit Supercomputern gelernt haben und nun in der Industrie arbeiten, zu beobachten. Wissenschaftler, die im Rahmen ihrer Studien die Höchstleistungsrechner des Norddeutschen Vektorrechnerverbundes intensiv genutzt haben, arbeiten inzwischen in nahezu allen wichtigen Zweigen der technologieorientierten Industrie. Rechenzeit auf Superrechnern in einem Umfang, wie er auch nur

von einem einzigen Forschungsprojekt benötigt wird, ist praktisch nur durch Erwerb eines eigenen Supercomputers zu erhalten. Weltweit sind die Supercomputer voll ausgelastet, weil grundsätzlich der Bedarf an Höchstleistungsrechnerkapazität höher ist, als er unter den gegebenen wirtschaftlichen und technischen Bedingungen befriedigt werden kann. So erfordert die Berechnung eines einzelnen größeren Moleküls auf einem der derzeit im Norddeutschen Vektorrechnerverbund vorhandenen Supercomputer 50 bis 250 Stunden Systemzeit. Für die Entwicklung z.B. des Medikaments Valium mußten mehrere tausend Substanzen synthetisiert werden. Solche durchaus umweltschädlichen Entwicklungen durch Supercomputersimulation zu ersetzen, würde also heute noch alle vorhandenen Rechnerkapazitäten sprengen. In den letzten Dekaden war ein ständiger Fortschritt in der Entwicklung leistungsfähigerer Rechner, verbunden mit immer leistungsfähigeren wissenschaftlichen Berechnungsmethoden, zu beobachten. An der Entwicklung besonders effektiver Methoden ist das ZIB maßgeblich beteiligt. Die im ZIB entwickelten fundamentalen Verbesserungen in den mathematischen Methoden wirken sich praktisch in allen Anwendungsgebieten aus. Zur Zeit besteht eine besonders gute Zusammenarbeit mit Wissenschaftlern aus dem Umfeld der Chemischen Verfahrenstechnik, der Ingenieurwissenschaften und der Medizin. Man kann in vielen Gebieten nachweisen, daß der Fortschritt auf dem Gebiet der Rechenmethoden ungefähr gleichgewichtig neben dem Fortschritt bei der Entwicklung leistungsfähigerer Computer war. Das ZIB ist eine der wenigen weltweit anerkannten Einrichtungen, die neben dem Angebot von Superrechnerkapazität einen namhaften Beitrag zur Methodenentwicklung leisten. Echte Supercomputeranwendungen, die weder durch verteiltes Rechnen auf Hochleistungsworkstations noch durch Verlagerung auf einen kleineren Spezialrechner bearbeitet werden können, lassen sich in allen oben genannten Gebieten nachweisen und einzelnen Forschungsgruppen zuordnen."

5.2.2 Hardware-Ausbau im Berichtszeitraum

Der Landeshöchstleistungsrechner ist ein komplexes technisches System, das aus unterschiedlichen Rechnern, Datenhaltungskomponenten und anderen Spezialgeräten besteht, die durch ein leistungsstarkes Kommunikationsnetzwerk verbunden sind (siehe Konfigurationsskizze, Absatz 5.4). Der praktisch kontinuierliche Ausbau des Gesamtsystems mit ständig wechselnden Investitionsschwerpunkten spiegelt das Bemühen des ZIB wider, im Rahmen der vorhandenen Haushaltsmittel einem möglichst breiten Spektrum von Forschungsvorhaben auf dem Gebiet des wissenschaftlichen Hochleistungsrechnens (HPSC – High Performance Scientific Computing) die technischen Voraussetzungen für eine Lösung zu bieten. Im Bereich der Rechnernetze wurden folgende Verbesserungen und Erweiterungen im Berichtszeitraum vorgenommen:

- Der 2 Mb/s-WiN-Anschluß brachte entscheidende Verbesserungen für die Verbindung des ZIB mit anderen Forschungszentren.
- Für den Zugang zum Internet wurde das DFN als Dienstanbieter gewählt.
- Ein FDDI-Ring wurde als ZIB-Backbone in Betrieb genommen. An diesen FDDI-Ring wurden die CRAY-Computer und die Router direkt angeschlossen.
- Jedes Sub-Ethernet ist – ebenso wie die Superrechner – über zwei verschiedene Router mit dem FDDI-Backbone verbunden.

- Die Wegewahl im hausinternen Netz wird automatisch dem Netzzustand angepaßt (Ausfallsicherheit!).
- Der Nameserver wird konsequent eingesetzt.
- Ein Netzwerkmonitor von CRAY Research wird im Operating eingesetzt.

Die neue Netzkonfiguration (vgl. 5.4 – Konfigurationszeichnung) hat sich inzwischen bewährt. Ältere Netzdienste (CDC-Net und die DFN-Dienste RJE und FT) wurden außer Betrieb genommen. Das Datenarchiv des Fileservers wurde auf 36-Spur-Magnetbandtechnik umgestellt und dadurch die Kapazität auf etwa 5 TByte erweitert. Der Landeshöchstleistungsrechner selbst wurde nur geringfügig (im I/O-Bereich) erweitert, da der Ersatz des Landeshöchstleistungsrechners durch die Kombination eines Vektorrechners mit einem Parallelrechner im Rahmen der Hochschulbauförderung beim Wissenschaftsrat beantragt wurde. Eine Realisierung dieser Maßnahme steht für 1994 in Aussicht.

5.2.3 Software-Ausbau im Berichtszeitraum

Die Anwendungsbereiche auf dem Berliner Höchstleistungsrechner gliedern sich in die vier Schwerpunkte

- Theoretische Chemie
- Theoretische Physik
- Ingenieurwissenschaften
- Umwelt- und Klimaforschung.

Zur Versorgung der Anwendungsbereiche wird überwiegend kommerziell entwickelte Software, ergänzt um Public-Domain-Software, eingesetzt, da die Entwicklung eigener Software im allgemeinen zu aufwendig ist. In den bisherigen Jahren wurde eine umfangreiche Sammlung von Programmen und Bibliotheken aufgebaut, die im Berichtszeitraum aktualisiert und durch weitere wichtige Produkte ergänzt wurde. Bei den Betriebssystemen wird weiterhin das bewährte offene System UNIX in den herstellerspezifischen Versionen UNICOS (Cray Research), SunOS und IRIX (Silicon Graphics) eingesetzt. Hier geht der Trend zur Standardisierung in Richtung POSIX auf Basis des UNIX System V von AT&T. Bei den Programmiersprachen ist nach wie vor Fortran 77 die im Bereich der Höchstleistungsrechner meistverwendete Programmiersprache. Dies ist nicht zuletzt auf die breite Basis von in Fortran 77 zur Verfügung stehender Anwendungssoftware zurückzuführen. Für die Zukunft ist ein Übergang auf die modernere Programmiersprache Fortran 90 zu erwarten. Die Programmiersprache C hat für die Höchstleistungsrechner bisher nur eine untergeordnete Bedeutung. Dies könnte sich einerseits beim Übergang auf Parallelrechnersysteme, andererseits bei zunehmender Verfügbarkeit von Anwendungssoftware insbesondere in der moderneren Programmiersprache C++ ändern. Mit dem Betriebssystem UNICOS steht

den Benutzern der Höchstleistungsrechner eine umfangreiche Sammlung sehr leistungsfähiger Werkzeuge zur Programmentwicklung und Programmoptimierung zur Verfügung. Diese Werkzeuge sind dank ihrer grafischen Benutzeroberfläche leicht zu bedienen und damit von einem großen Benutzerkreis ohne spezielle EDV-Kenntnisse einsetzbar. Mit der Ankündigung des Cray Distributed Programming Environment (DPE) werden diese Werkzeuge etwa Mitte 1994 auch auf dem Vorrechner ufer zur Verfügung stehen. Für die Entwicklung und Optimierung von Programmen für Parallelrechner sowie für verteilte Anwendungen ist für 1994 die Beschaffung weiterer Programmierwerkzeuge und Entwicklungsumgebungen geplant. Erste Schritte wurden bereits mit der Bereitstellung von PVM (Parallel Virtual Machine) und HeNCE (Heterogeneous Network Computing Environment) sowie des CRAY T3D Emulator auf den Vektorrechnern des ZIB unternommen. Die Liste der Bibliotheken konnte neben den Standardbibliotheken BLAS, LINPACK, EISPACK und LAPACK sowie der IMSL Libraries und der NAG Library (für Fortran und C) um die CERNLIB insbesondere für Anwendungen aus der Theoretischen Physik ergänzt werden.

Für Anwendungen im Bereich Grafik und Visualisierung wurde eine Workstation Silicon Graphics Indigo² Extreme beschafft und installiert. Diese Hochleistungsgrafik-Workstation steht den Benutzern der Berliner Höchstleistungsrechner für die Visualisierung ihrer Anwendungen zur Verfügung. Der Visualisierungsbereich wurde um die bewährten Produkte AVS und Khoros ergänzt. Über einen neu eingerichteten Videofilm-Service können die Benutzer ihre Visualisierungsergebnisse auf Videocassetten aufzeichnen lassen. Im Bereich der Theoretischen Chemie wurden schwerpunktmäßig wichtige Produktionsprogramme in ihren aktuellen Versionen installiert (Gaussian 92, UniChem 2.0 mit MNDO91, CADPAC 5.1 und DGauss 2.0). Neu erworben wurden Lizenzen für SPARTAN 2.0 und MOLPRO92. Während SPARTAN 2.0 für routinemäßige Untersuchungen im Bereich der Organischen Chemie bevorzugt eingesetzt werden kann, wird mit MOLPRO92 das Spektrum der verfügbaren theoretisch anspruchsvollen Methoden im Bereich der Quantenchemie erweitert. Beide Programme ergänzen die in Gaussian 92 nutzbaren Verfahren sinnvoll. Für die Simulation biologisch relevanter Makromoleküle wurde CHARMM 22.0 installiert.

In den Ingenieurwissenschaften werden weiterhin die Systeme ABAQUS und ADINA (jeweils in ihrer neuesten Version) für Anwendungen aus der Strukturmechanik eingesetzt. Die folgende Tabelle gibt einen Überblick über den Stand der Software Ende 1993. Im Berichtszeitraum neu beschaffte oder aktualisierte Software ist mit der jeweiligen Versionsnummer angegeben. Neben den beiden Höchstleistungsrechnern CRAY Y-MP2E/264 und CRAY X-MP/216 gibt die Tabelle auch einen Überblick über das Software-Angebot auf den Vorrechnern Sun SPARCserver 4/670MP ufer und SGI Iris Indigo² Extreme aventurin.

Tabelle: Software-Ausbau am ZIB, Stand: 31.12.1993

	CRAY Y-MP2E	CRAY X-MP	SPARCserver <i>ufer</i>	Indigo ² <i>aventurin</i>
Betriebssystem	UNICOS 7.0	UNICOS 8.0	SunOS 4.1	IRIX 4.0.5H
Compiler	CF77 6.0	CF77 6.0	Sun F77	Fortran 77
	CF90 1.0		NAGware f90 2.0a	
	SCC 3.0	SCC 4.0	Sun C	SGI C
			GNU C	GNU C
	C++ 1.0			
	Pascal 4.2	Pascal 4.2		
	Lisp			
Programmierwerkzeuge	UNICOS Visual Interfaces 7.0	UNICOS Visual Interfaces 8.0	OpenWindows	Workspace
	CrayTools 1.1	CrayTools 1.1		
	Cray Network PVM-3	Cray Network PVM-3		
	AIT 2.0			
	CRAY T3D Emulator			
Bibliotheken	BLAS	BLAS		
	LINPACK	LINPACK		
	EISPACK	EISPACK		
	LAPACK	LAPACK		
	CERNLIB 93d	CERNLIB 93d	CERNLIB 93d	
	IMSL Libraries	IMSL Libraries		
	IMSL Interactive Documentation Facility 2.0		IMSL Interactive Documentation Facility 2.0	
	NAG C Library Mark 2		NAG C Library Mark 2	
	NAG Fortran Library	NAG Fortran Library	NAG Fortran Library	
			NAG On-line Information Supplement	
Grafik	NewGKS	NewGKS	NewGKS	
	XGKS	XGKS	XGKS	
	CVT 2.0 (X11R5, Motif, XView, DGL, PEXlib, Tcl, Tk)	X11R5	OpenWindows (X11R4, XView)	Iris Inventor
	BIZEPS	BIZEPS		
	GRIPS	GRIPS		
	NAG Graphics Library	NAG Graphics Library	NAG Graphics Library	
	NCAR Graphics 3.1.3a	NCAR Graphics 3.1.3a	NCAR Graphics 3.1.3a	NCAR Graphics 3.1.3a

Tabelle: Software-Ausbau am ZIB, Stand: 31.12.1993 (Fortsetzung)

	CRAY Y-MP2E	CRAY X-MP	SPARCserver ufer	Indigo ² aventurin
Visualisierung	AVS 5		AVS 5	AVS 5
	Iris Explorer 1.0			Iris Explorer 2.0
			Khoros 1.0.5	Khoros 1.0.5
	MPGS 5.0			MPGS 5.0
Chemie	AMBER	AMBER		
	AMPAC	AMPAC		
	CADPAC 5.1			
	CHARMm 22.0			
	DGauss 2.0			
	GAMESS-UK	GAMESS-UK		
	GAMESS-USA	GAMESS-USA		
	GAUSSIAN 92	GAUSSIAN 92		
	GRADSCF	GRADSCF		
	GROMOS	GROMOS		
	MNDO91 3.1			
	MOLPRO 92.10			
	MOPAC	MOPAC		
	RPAC	RPAC		
	SPARTAN			
UniChem 2.0			UniChem 2.0	
Strukturmechanik	ABAQUS 5.2			
	ADINA 6.0			

Der vom ZIB weltweit angebotene Dienst eLib (einschließlich CodeLib, NetLib und RedLib) steht den Benutzern des Berliner Höchstleistungsrechners ebenfalls zur Verfügung. Das Dokumentationssystem des Rechenzentrums wurde im Berichtszeitraum um eine Gopher-Schnittstelle ergänzt. Für 1994 ist die Bereitstellung eines ZIB-weiten Informationssystems ZIBIS auf Basis des World-Wide Web (WWW) und der grafischen Benutzeroberfläche Mosaic geplant.

5.3 Nutzung des Landeshöchstleistungsrechners

5.3.1 Norddeutscher Vektorrechnerverbund (NVV) — wechselseitige Rechnernutzung

Zwischen den Ländern Schleswig-Holstein, Niedersachsen und Berlin besteht ein Vertrag über die wechselseitige Nutzung von Vektorrechnern. Das ZIB verwaltet neben den lokalen Rechnern auch die Anteile des Landes Berlin auf den Rechnern der Partnerländer. Nachstehende Tabelle zeigt die wechselseitige Inanspruchnahme von Vektorrechnerkapazität im NVV seit 1984.

Jahr	System	Nutzung (in Prozent) durch		
		Berlin	Schleswig-Holstein	Niedersachsen
1984	CRAY 1-M/1200 (Berlin)	85	10	5
1985	CRAY 1-M/1200 (Berlin)	68	13	19
1986	CRAY 1-M/1200 (Berlin)	66	17	17
1987	CRAY X-MP/24 ¹ (Berlin)	65	16	19
1988	CRAY X-MP/24 (Berlin)	81	4	15
	CRAY X-MP/216 ² (Kiel)	17	82	1
1989	CRAY X-MP/24 (Berlin)	86	2	12
	CRAY X-MP/216 (Kiel)	12	79	9
1990	CRAY X-MP/24 (Berlin)	87	4	9
	CRAY X-MP/216 (Kiel)	16	79	5
	SIEMENS VP 200 ³ (Hannover)	2	0	98
1991	CRAY X-MP/24 (Berlin)	90	7	3
	CRAY Y-MP2E/164 (Berlin) ⁴	85	15	0
	CRAY X-MP/216 (Kiel)	14	85	1
	SIEMENS S 400/40 (Hannover)	8	3	89
1992	CRAY X-MP/216 (Berlin)	88	12	0
	CRAY Y-MP2E/164 (Berlin)	83	16	1
	CRAY X-MP/216 (Kiel)	5	95	0
	SIEMENS S 400/40 (Hannover)	7	4	89
1993	CRAY X-MP/216 (Berlin)	85	15	0
	CRAY Y-MP2E/264 (Berlin)	82	17	1
	CRAY X-MP/216 (Kiel)	4	96	0
	SIEMENS S 400/40 (Hannover)	9	14	77

Fußnoten:

- 1 Installiert Januar 1987
erweitert zur CRAY X-MP Anfang 1992
- 2 Installiert Dezember 1987 als CRAY X-MP/18,
erweitert zur CRAY X-MP/216 im 4. Quartal 1988
- 3 Installiert Januar 1990 als SIEMENS VP200,
Erweiterung zur SIEMENS S400/10 Ende 1990,
Erweiterung zur SIEMENS S400/40 Ende 1991
- 4 Installiert September 1991, erweitert zur Y-MP2E/264 Ende 1992

Da die Systeme durchweg voll ausgelastet waren, ist nur die prozentuale Verteilung der Nutzung angegeben. In der Reihenfolge der Investitionsmaßnahmen fand die letzte größere Erweiterung im NVV planungsgemäß in Niedersachsen statt, dementsprechend steht dort auch die leistungsstärkste Maschine. Berlin und Schleswig-Holstein erhalten jetzt dort die in den früheren Jahren "ausgeliehene" Kapazität zurück, während Niedersachsen die anderen Rechner seit 1991 kaum noch nutzt. Dies zeigt, daß sich das Prinzip des Kapazitätsausgleichs im NVV bewährt hat.

5.3.2 Projekte mit großem Rechenzeitverbrauch

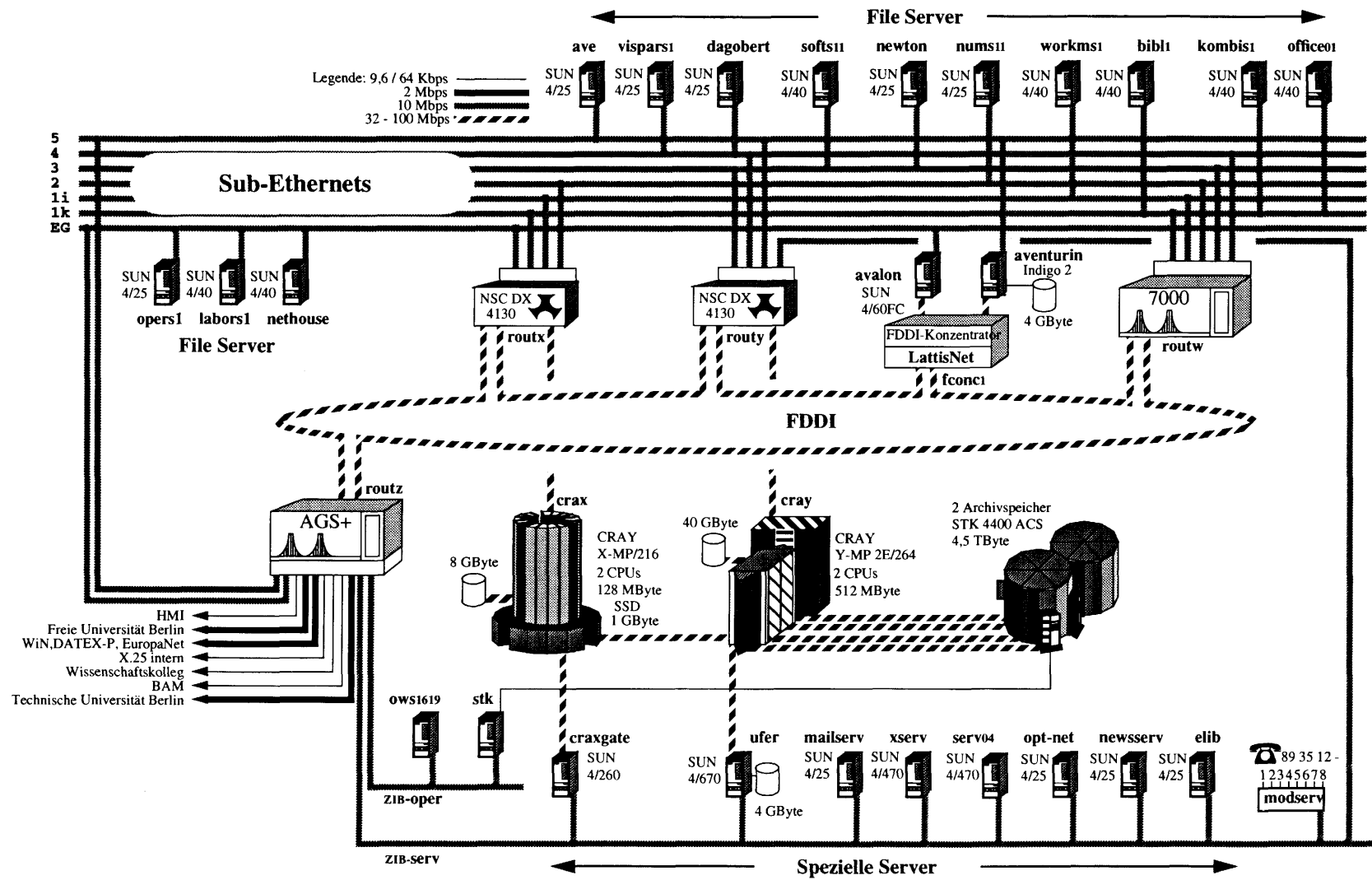
Die folgenden Projekte wurden für 1993 noch von den bis Ende 1993 zuständigen Gremien der Berliner Hochschulen zugelassen. Seit Ende 1993 gilt – entsprechend den Vorgaben der DFG – ein neues Zulassungsverfahren: 60% der Kapazität des Landeshöchstleistungsrechners werden durch eine wissenschaftliche Kommission, den "Zulassungsausschuß" verteilt. Für die Vorbereitung von Großprojekten und die Lehre können die Berliner Universitäten und das ZIB je 10% der Kapazität nach ihren jeweiligen internen Regeln selbständig verteilen. Die folgende Tabelle ist nach Sachgebieten geordnet. Es werden jeweils die verantwortlichen Wissenschaftler und die Institute genannt. Der Rechenzeitverbrauch wird in CPU-Stunden, getrennt nach den vier Rechnern des NVV, angegeben.

Tabelle: Projekte mit großem Rechenzeitverbrauch

Einrichtung Institut	Thema	CRAY X-MP	CRAY Y-MP	CRAY X-MP Kiel	S 400 Hannover
Physik					
Prof. Dr. V. Linke, Institut für Theoretische Physik, FUB	Monte-Carlo-Simulationen zu Modellen der Quantenfeldtheorie und statistischen Physik	638	220	90	1226
Prof. Dr. F. Forstmann, Institut für Theoretische Physik, FUB	Bestimmung der strukturellen und thermodynamischen Eigenschaften von Modellflüssigkeiten. durch numerische Lösung gekoppelter Integralgleichungssysteme	819	139	64	0
Prof. Dr. H. Kleinert, Institut für Theoretische Physik, FUB	Berechnung der Phasenstruktur von Flüssigkristallen durch Monte-Carlo-Simulationen	1376	463	356	0
Prof. Dr. M. Müller-Preußker, Institut für Elementarteilchenphysik, HUB	Monte-Carlo-Simulation der Quantenelektrodynamik in Gitterapproximationen	411	54	0	0
Dr. D. Hennig Institut für Theoretische Physik, HUB	Gesamtenergierechnungen von adsorbatbedeckten Übergangsmetalloberflächen mit der ab initio full-potential LMTO-Methode	66	210	0	0
Prof. Dr. E. Sedlmayr, Institut für Astronomie und Astrophysik, TUB	Staubbildung in pulsierenden Sternatmosphären und Modellierung und Chemie zirkumstellarer Staubhüllen. Gegenstand der Projekte ist die Simulation der Entstehung von Staub im Universum. Dies erfordert die Lösung nichtlinearer gekoppelter Differentialgleichungssysteme.	975	505	0	0
Prof. Dr. S. Hess, Institut für Theoretische Physik, TUB	Theoretische Untersuchungen von Polymerströmungen, statische und dynamische Struktur von Flüssigkeiten und Untersuchung molekularer Gase und Stoßprozesse. Diese Projekte untersuchen vorwiegend Vielteilchensysteme (ca. 1000 Teilchen), die durch zeitabhängige partielle Differentialgleichungen beschrieben werden.	1679	917	0	0
Dr. U. Geppert, Institut für Kosmosforschung der ehemaligen Akademie der Wissenschaften der DDR	Simulation der Magnetfeldentstörung in Neutronensternen	128	0	0	0
Prof. Dr. H. Holweger, Institut für Theoretische Physik und Sternwarte, Universität Kiel	Untersuchung von Nichtgleichgewichtsatmosphärenmodellen und die Simulation von Konvektion und Strahlungstransport in Atmosphären heißer Sterne.	2190	1800	-	-
Dr. J. Noffke, Institut für Theoretische Physik B, TU Clausthal	Berechnung der elektronischen Struktur dünner Schichten	0	142	-	-
Summe Physik		8282	4450	510	1226
Chemie					
Prof. Dr. H. Baumgärtel, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, FUB	Moleküldynamik von Clustern	342	224	61	0
Prof. Dr. V. Bonacic-Koutecky, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, FUB	Quantenchemische Berechnung von Metallclustern und Molekülen	583	2794	0	0

Tabelle: Projekte mit großem Rechenzeitverbrauch (Fortsetzung)

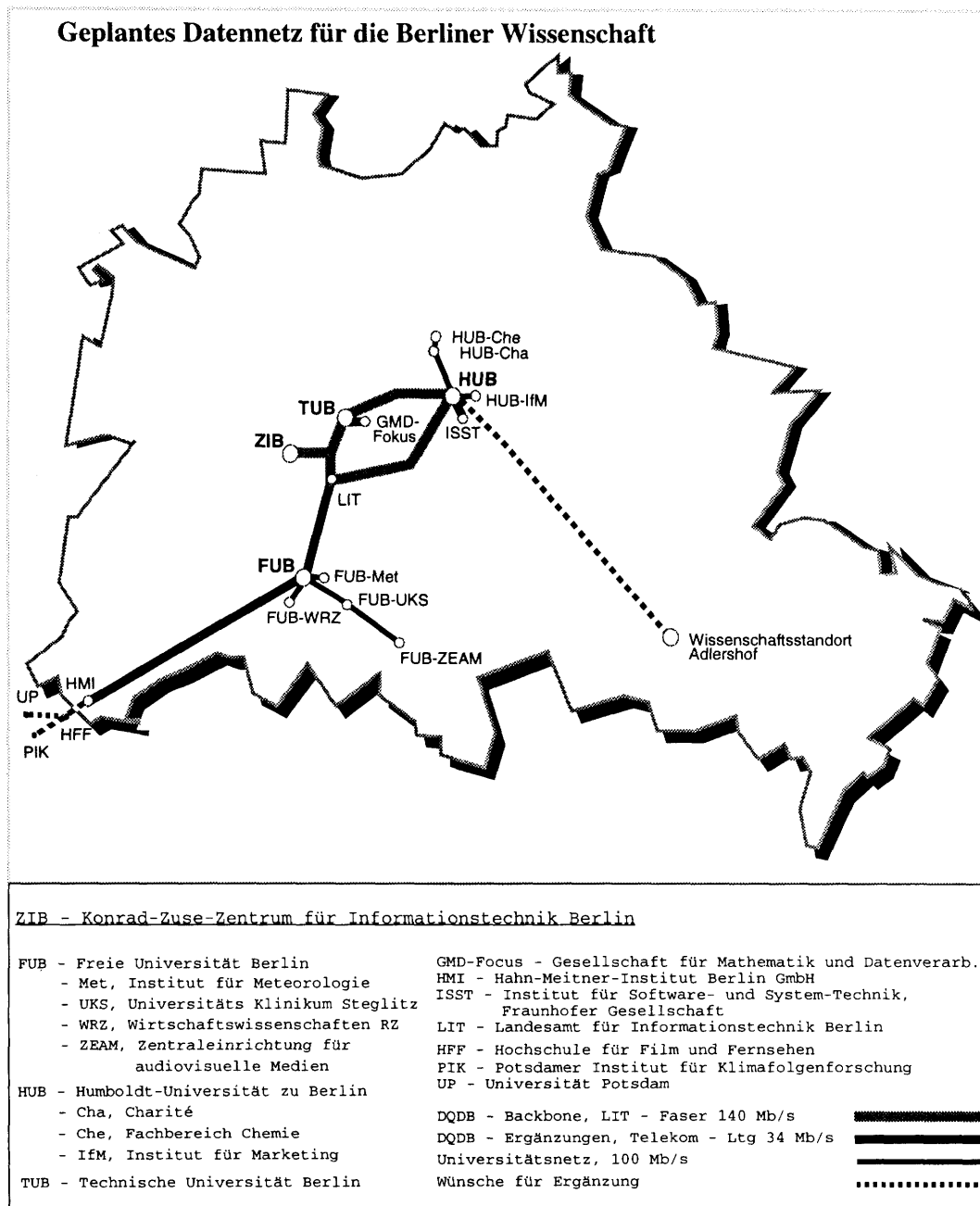
Einrichtung Institut	Thema	CRAY X-MP	CRAY Y-MP	CRAY X-MP Kiel	S 400 Hannover
Prof. Dr. J. Manz, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, FUB	Simulation molekularer Reaktionsdynamik	68	479	0	0
Dr. K.-M. Weitzel, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, FUB	Berechnung von Potentialflächen von Ionenreaktionen	68	83	0	65
Prof. Dr. H.-D. Höltje Institut für Pharmazie, FUB	Theoretische Untersuchungen zur Pharmakon-Rezeptor-Wechselwirkung	0	313	0	0
Prof. Dr. E. Kemnitz Institut für Anorganische Chemie, HUB	Quantenchemische Untersuchungen von Li-Verbindungen	32	144	0	0
Prof. Dr. J. Sauer, AG Quantenchemie an der HUB	Ab-initio Berechnungen der Struktur und Eigenschaften großer molekularer Cluster in der Gasphase und Festkörper (mit UNICHEM)	0	265	0	0
Prof. Dr. J. Sauer, AG Quantenchemie an der HUB	Nichtempirische Berechnung von Eigenschaften von Zeolithen und A _{III} -B _V -Halbleiter für die spektroskopische Analyse und Bestimmung von empirischen Potentialparametern für dynamische Simulationen.	1	267	0	0
Prof. Dr. H. Schwarz, Institut für Organische Chemie, TUB	Berechnung von Eigenschaften molekularer Systeme und Simulation unimolekularer Reaktionen in der Gasphase.	306	1882	35	455
Prof. Dr. W. Bruns, Iwan-N.-Stranski-Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, TUB	MD/MC-Simulation von Polymersystemen: Simulationsrechnungen zur Untersuchung der Dynamik polymerer Systeme mit dem Monte-Carlo- und moleküldynamischen Verfahren.	237	429	0	0
Prof. Dr. F. Dietz, Institut für Theoretische und Physikalische Chemie, Universität Leipzig	Ab initio Berechnungen der Potentialhyperflächen von Grund- und angeregten Zuständen des Oxetan- und Cyaninsystems unter Verwendung korrelierter Zustandsfunktionen.	372	289	0	0
Dr. D. Heidrich, Institut für Theoretische und Physikalische Chemie, Universität Leipzig	Quantenchemische Untersuchungen zum Protonen-Transfer	0	122		0
Dr. I. Boustani, Universität Wuppertal	Untersuchung der Stabilität geometrischer und elektronischer Strukturen von Metallclustern unter Verwendung nichtempirischer Verfahren.	211	437	0	0
Summe Chemie		2220	7728	96	520
Ingenieurwissenschaften/Bauwesen					
Prof. Dr. F. Thiele, Hermann-Föttinger-Institut für Thermo- und Fluidodynamik, TUB	Instationäre Profilumströmung mit abgelöster Wirbelströmung und Analyse abgelöster Strömungen; Untersuchung von Brennkammerströmungen mit hohem Drall mit Hilfe von FE-Volumenverfahren unter Berücksichtigung neuerer Turbulenzmodelle; numerische Simulation der Umströmung um oszillierende Tragflügelprofile durch Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen.	1484	86	0	108
Summe Ingenieurwissenschaften/Bauwesen		1484	86	0	108
Geodäsie/Meteorologie/Ozeanographie					
Prof. Dr. K. Labitzke, Institut für Meteorologie, FUB	Numerische Simulation zur Klimaforschung	3030	1147	0	0
Dr. C. Böning, Institut für Meereskunde, Abteilung Ozeanographie, Universität Kiel	Ozeanographische Modelle: Assimilation von simulierten Satelliten-Altimeterdaten in ein numerisches Ozeanzirkulationsmodell.	5	598	-	-
Dr. H. Stümpel, Institut für Geodäsie, Universität Kiel	Erstellung synthetischer seismischer Daten und Bearbeitung seismischer Reflexionsdaten	81	43	-	-
Summe Geodäsie/Meteorologie/Ozeanographie		3116	1788	0	0
Summe Gesamt		15102	14052	606	1854
An Benutzer abgegebene CPU-Zeit insgesamt		15639	14749	607	1857



118

5.5 Beteiligung des ZIB an der Planung des Berliner Metropolitan Area Network (MAN)

In den letzten Jahren haben sich die Methoden und Anwendungen der Datenverarbeitung schneller als je zuvor verändert: Moderne Informationssysteme setzen leistungsfähige Netzverbindungen für die Übertragung von Bildinformation und



die Nutzung audio-visueller Medien voraus, Superrechner werden mehr und mehr im Rahmen integrierter verteilter Anwendungen (mit Bildübertragung) genutzt, Autoren von Publikationen sind bei der kooperativen Arbeit ebenso auf leistungsfähige Netze angewiesen wie Ingenieure und Techniker. Das Landesamt für Informationstechnik Berlin (LIT) hat die Bedeutung dieser Entwicklungen auch für Politik und Verwaltung rechtzeitig erkannt und arbeitet an der Planung und Realisierung eines landeseigenen Glasfasernetzes als Grundlage für ein künftiges MAN. Das ZIB war von Anfang an – gemeinsam mit anderen Einrichtungen aus dem Wissenschaftsbereich – in diese Planungen einbezogen. Anlässlich des vom LIT veranstalteten Kongresses vom 4. bis 6. Mai 1993 konnte für eine längere Testperiode eine Verbindung zwischen dem ZIB und der Humboldt-Universität zu Berlin über das DQDB-Testnetz des LIT (34 Mb/s) zur Verfügung gestellt werden. Auf dem Ausstellungsstand des ZIB wurden während des Kongresses verteilte Anwendungen zwischen Workstations und Supercomputern sowie andere Netzanwendungen als Demonstration für den Nutzen eines MAN gezeigt. Die Zusammenarbeit mit dem LIT war die Basis für die erfolgreiche Bewerbung um die Durchführung des Entwicklungsauftrages "Berlin Regional Testbed – BRTB": Da ein flächendeckendes Hochgeschwindigkeitsnetz für die Wissenschaft in Deutschland zur Zeit nicht finanziert werden kann, hat der DFN-Verein die Förderung von einigen regionalen Hochgeschwindigkeitsnetzen beschlossen. In diesen sogenannten regionalen "Testbeds" sollen Anwendungen im Feldversuch erprobt werden, die auf dem derzeitigen Wissenschaftnetz (maximal 2 Mb/s) wegen unzureichender Übertragungsleistung nicht möglich sind. Die Nutzung des bislang vom LIT erstellten privaten Kernnetzes für das BRTB ermöglicht die Realisierung des regionalen Testbeds zu vertretbaren Kosten für das Land Berlin.

5.6 Interne Dienstleistungen des Rechenzentrums

Das Workstationnetz im ZIB und in seinen Außenstellen wurde weiterhin auf einem möglichst sachgerechten Stand gehalten. So wurden etliche neue Workstations (überwiegend der Firmen SUN und SGI) zu den vorhandenen beschafft. Damit einher ging der Austausch älterer Maschinentypen. Das Serverkonzept wurde konsequent weiterverfolgt, so wurden etliche Server für Spezialaufgaben wie Mailedienste, News, eLib, Opt-Net, Gateways und für verschiedene Testumgebungen in Betrieb genommen. Für die USENET NetNews wurde ein Newsserver installiert. Dadurch wurde die Verfügbarkeit aller Dienste für die Mitarbeiter des ZIB weiterhin verbessert. Wider Erwarten mußten für spezielle Anwendungen (Software-Referenzmaschinen und Planungsarbeiten im Zusammenhang mit dem ZIB-Neubau) einige PCs der gehobenen Leistungsklasse beschafft werden. Für die Geräte der Firmen SUN und SGI betreut der Bereich Rechenzentrum die Betriebssysteme in vollem Umfang. Auch die Hardwarewartung wird im wesentlichen als Eigenleistung ausgeführt. Hierbei bewährte sich, ebenso wie bei der

Betreuung der Rechnernetze, die gute Zusammenarbeit mit dem Elektroniklabor. Für Systeme anderer Hersteller, die als Referenzmaschinen oder für Spezialaufgaben im ZIB betrieben werden, kann das Rechenzentrum lediglich einen minimalen Service anbieten. Eine Übersicht über die Rechnerausstattung des ZIB am Ende des Berichtszeitraums gibt die folgende Tabelle.

Tabelle: Rechnerausstattung des ZIB Ende 1993

Hersteller	Arbeitsplatz-rechner (od. X-Terminal)	Arbeitsgruppen-server	Zentrale Server
APPLE	15	-	-
CRAY	-	-	2
DEC	4	-	-
IBM	1	-	-
HP	2	1	-
MOTOROLA	1	-	-
SILICON GRAPHICS	5	4	1
SUN	89	23	12
Diverse X-Terminals	15	-	-
Diverse PCs und Laptops	30	-	-

6 Publikationen

6.1 Preprints

SC 93- 1. Nicht erschienen.

SC 93- 2. M. Grötschel; A. Martin; R. Weismantel. *Packing Steiner Trees: Separation Algorithms.*

Abstract: In this paper we investigate separation problems for classes of inequalities valid for the polytope associated with the Steiner tree packing problem, a problem that arises, e. g., in VLSI routing. The separation problem for Steiner partition inequalities is \mathcal{NP} -hard in general. We show that it can be solved in polynomial time for those instances that come up in switchbox routing. Our algorithm uses dynamic programming techniques. These techniques are also applied to the much more complicated separation problem for alternating cycle inequalities. In this case we can compute in polynomial time, given some point y , a lower bound for the gap $\alpha - a^T y$ over all alternating cycle inequalities $a^T x \geq \alpha$. This gives rise to a very effective separation heuristic. A by-product of our algorithm is the solution of a combinatorial optimization problem that is interesting in its own right: Find a shortest path in a graph where the “length” of a path is its usual length minus the length of its longest edge.

SC 93- 3. Karin Gatermann; Bodo Werner. *Group Theoretical Mode Interactions with Different Symmetries.*

Abstract: In two-parameter systems two symmetry breaking bifurcation points of different types coalesce generically within one point. This causes secondary bifurcation points to exist. The aim of this paper is to understand this phenomenon with group theory and the innerconnectivity of irreducible representations of supergroup and subgroups. Colored pictures of examples are included.

SC 93- 4. C.E. Ferreira; A. Martin; R. Weismantel. *Facets for the Multiple Knapsack Problem.*

Abstract: In this paper we consider the multiple knapsack problem which is defined as follows: given a set N of items with weights f_i , $i \in N$, a set M of knapsacks with capacities F_k , $k \in M$, and a profit function c_{ik} , $i \in N, k \in M$; find an assignment of a subset of the set of items to the set of knapsacks that yields maximum profit (or minimum cost). With every instance of this problem we associate a polyhedron whose vertices are in one to one correspondence to the feasible solutions of the instance. This polytope is the subject of our investigations. In particular, we present several new classes of inequalities and work out necessary and sufficient conditions under which the corresponding inequality defines a facet. Some

of these conditions involve only properties of certain knapsack constraints, and hence, apply to the generalized assignment polytope as well. The results presented here serve as the theoretical basis for solving practical problems. The algorithmic side of our study, i.e., separation algorithms, implementation details and computational experience with a branch and cut algorithm are discussed in the companion paper SC 93-7.

SC 93- 5. Jürgen Richter–Gebert. *Mechanical Theorem Proving in Projective Geometry.*

Abstract: We present an algorithm that is able to confirm projective incidence statements by carrying out calculations in the ring of all formal determinants (brackets) of a configuration. We will describe an implementation of this power and present a series of examples treated by the prover, including *Pappos' and Desargues' Theorems*, the *Sixteen Point Theorem*, *Saam's Theorem*, the *Bundle Condition*, the *uniqueness of a harmonic Point* and *Pascal's Theorem*.

SC-93- 6. Peter Deuffhard. *A Study of Lanczos-Type Iterations for Symmetric Indefinite Linear Systems.*

Abstract: The Lanczos iteration for symmetric indefinite linear systems seems to be well-known for quite a while. However, in order to modify it with the aim of improved performance, the present paper studies certain aspects in terms of an adjoint scalar three-term recurrence. Thus, at least a different view is opened. Moreover, an alternative $3n$ -implementation in terms of the Euclidean orthogonal basis has been found that easily permits generalizations. The study is understood as a start-off for further numerical investigations and experiments.

SC 93- 7. C.E. Ferreira; A. Martin; R. Weismantel. *A Cutting Plane Based Algorithm for the Multiple Knapsack Problem.*

Abstract: In this paper we describe a cutting plane based algorithm for the multiple knapsack problem. We use our algorithm to solve some practical problem instances arising in the layout of electronic circuits and in the design of main frame computers, and we report on our computational experience. This includes a discussion and evaluation of separation algorithms, an LP-based primal heuristic and some implementation details. The paper is based on the polyhedral theory for the multiple knapsack polytope developed in our companion paper SC-93-04 and meant to turn this theory into an algorithmic tool for the solution of practical problems.

SC 93- 8. Bodo Erdmann; Ronald H.W. Hoppe; Ralf Kornhuber. *LARGE Adaptive Multilevel – Methods for Obstacle Problems in Three Space Dimensions.*

Abstract: We consider the discretization of obstacle problems for second

order elliptic differential operators in three space dimensions by piecewise linear finite elements. Linearizing the discrete problems by suitable active set strategies, the resulting linear sub-problems are solved iteratively by preconditioned cg-iterations. We propose a variant of the BPX preconditioner and prove an $O(j)$ estimate for the resulting condition number. To allow for local mesh refinement we derive semi-local and local a posteriori error estimates. The theoretical results are illustrated by numerical computations.

SC 93- 9. M. Grötschel; C.L. Monma; M. Stoer. *Handbook in Operations Research and Management Science. Volume on "Networks". Chapter on "Design of Survivable Networks"*.

SC 93-10. Christof Schütte. *A quairesonant smoothing algorithm for the fast analysis of selective vibrational excitation.*

Abstract: One key problem in modern chemistry is the simulation of the dynamical reaction of a molecule subjected to external radiation. This is described by the Schrödinger equation, which, after eigenfunction expansion, can be written in form of a system of ordinary differential equations, whose solutions show a highly oscillatory behaviour. The oscillations with high frequencies and small amplitudes confine the stepsizes of any numerical integrator – an effect, which, in turn, blows up the simulation time. Larger stepsizes can be expected by averaging these fast oscillations, thus smoothing the trajectories. This idea leads to the construction of a quairesonant smoothing algorithm (QRS). In QRS, a natural and computationally available splitting parameter δ controls the smoothing properties. The performance of QRS is demonstrated in two applications treating the selective excitation of vibrational states by picosecond laser pulses. In comparison with standard methods a speedup factor of 60–100 is observed.

A closer look to purely physically motivated quairesonant approximations such as WFQRA shows some additional advantages of the above smoothing idea. Among these the possibility of an adaptive formulation of QRS via the parameter δ is of particular importance.

SC 93-11. Victor Reiner; Günter M. Ziegler. *Coxeter-associahedra.*

Abstract: Recently M. M. Kapranov [Kap] defined a poset KPA_{n-1} , called the *permuto-associahedron*, which is a hybrid between the face poset of the *permutahedron* and the *associahedron*. Its faces correspond to the partially parenthesized, ordered, partitions of the set $\{1, 2, \dots, n\}$, with a natural partial order.

Kapranov showed that KPA_{n-1} is the face poset of a CW-ball, and explored its connection with a category-theoretic result of MacLane, Drinfeld's work on the Knizhnik-Zamolodchikov equations, and a certain moduli space of curves. He also asked the question of whether this CW-ball can be realized

as a convex polytope.

We show that this permuto-associahedron corresponds to the type A_{n-1} in a family of convex polytopes KPW associated to each of the classical Coxeter groups, $W = A_{n-1}, B_n, D_n$. The embedding of these polytopes relies on the *secondary polytope* construction of the associahedron due to Gel'fand, Kapranov, and Zelevinsky. Our proofs yield integral coordinates, with all vertices on a sphere, and include a complete description of the facet-defining inequalities.

Also we show that for each W , the dual polytope KPW^* is a refinement (as a CW-complex) of the *Coxeter complex* associated to W , and a coarsening of the barycentric subdivision of the Coxeter complex. In the case $W = A_{n-1}$, this gives an elementary proof of Kapranov's original sphericity result.

- SC 93-12. J. Ackermann; R. Roitzsch. *On a Two-Dimensional Multilevel Adaptive Finite Element Method for the Time-Independent Schrödinger-Equation.*

Abstract: The subject of this study is a multilevel Finite Element Method based on an error estimator and step by step grid refinement as an universal tool for solving time-independent Schrödinger-eigenvalue problems. Numerical results for standard problems appearing in vibrational motion and molecular electronic structure calculations are given and discussed.

- SC 93-13. M. Grötschel; L. Lovasz. *Combinatorial Optimization.*

Abstract: This paper will appear as Chapter 28 of the forthcoming "Handbook on Combinatorics" (editors: R. Graham, M. Grötschel, L. Lovasz) to be published in 1994, by North-Holland.

- SC 93-14. Christof Schütte; Andreas Hohmann; Manfred Dinand. *Numerical Simulation of Relaxation Oscillations of Waveguide-Lasers.*

Abstract: An analysis of relaxation oscillations in local Er-doped optically pumped lasers is reported. It is based on a time dependent rate equation model for a quasi-two-level-system with wavelength dependent emission- and absorption cross-sections. For the first time a numerically reliable simulation of the characteristic laser behaviour was possible: the onset and decay of the oscillations, the time-dependent repetition period and the steady state signal output power. The characteristic waveguide parameters, as the erbium-concentration profile, the polarization dependent pump- and signal mode intensity profiles, the scattering losses, the cavity length and the front and rear reflectivities were all taken into account. The basic formulas are general and can also be used for Er-doped fiber lasers. Mathematically the problem can be characterized as a large boundary value problem, which can approximately be replaced by a stiff initial value problem of ordinary differential equations. The used algorithmic replacement procedure is motivated and discussed in detail.

Here, pump- and signal evolution versus time are presented for an planar Er-diffused Ti:LiNbO₃ waveguide laser. The numerically obtained results show a nearly quantitative agreement with experimental investigations. Simultaneously they supply knowledge about non-measurable (space-dependent population dynamic of the Er-atoms) and till today not measured data (dynamical response of the laser by a sharp peak in the external pump).

SC 93-15. A. Martin; R. Weismantel. *Packing Paths and Steiner Trees: Routing of Electronic Circuits.*

Available **only** via **anonymous-ftp**

Abstract: One of the challenging problems in the design of electronic circuits is the so-called routing problem. Roughly speaking, the task is to connect so-called terminal sets via wires on a predefined area. In addition, certain design rules are to be taken into account and an objective function such as the wiring length must be minimized. The routing problem in general is too complex to be solved in one step. Depending on the user's choice of decomposing the chip design problem into a hierarchy of stages, on the underlying technology, and on the given design rules, various subproblems arise. We discuss several variants of practically relevant routing problems and give a short overview on the underlying technologies and design rules. Many of the routing problems that come up this way can be formulated as the problem of packing so-called Steiner trees in certain graphs. We consider the Steiner tree packing problem from a polyhedral point of view and present three possibilities to define an appropriate polyhedron. Weighing their pros and cons we decide for one of these polytopes and sketch some of our investigations.

SC 93-16. K. Gatermann; B. Werner. *Secondary Hopf bifurcation caused by steady-state steady-state mode interaction.*

Abstract: In two-parameter systems with symmetry two steady state bifurcation points of different symmetry types coalesce generically within one point. Under certain group theoretic conditions involving the action of the symmetry group on the kernels, we show that secondary Hopf bifurcation is borne by the mode interaction. We explain this phenomenon by using linear representation theory. For motivation an example with D_3 -symmetry is investigated where the main properties causing the Hopf bifurcation are summarized.

SC 93-17. Persi Diaconis; Bernd Sturmfels. *Algebraic Algorithms for Sampling from Conditional Distributions.*

Abstract: We construct Markov chain algorithms for sampling from discrete exponential families conditional on a sufficient statistic. Examples

include generating tables with fixed row and column sums and higher dimensional analogs. The algorithms involve finding bases for associated polynomial ideals and so an excursion into computational algebraic geometry.

SC 93-18. Ralf Kornhuber. *Monotone Multigrid Methods for Elliptic Variational Inequalities I.*

Abstract: Extending well-known linear concepts of successive subspace correction, we arrive at extended relaxation methods for elliptic variational inequalities. Extended underrelaxations are called monotone multigrid methods, if they are quasioptimal in a certain sense. By construction, all monotone multigrid methods are globally convergent. We take a closer look at two natural variants, which are called symmetric and unsymmetric multigrid methods, respectively. While the asymptotic convergence rates of the symmetric method suffer from insufficient coarse-grid transport, it turns out in our numerical experiments that reasonable application of the unsymmetric multigrid method may lead to the same efficiency as in the linear, unconstrained case.

SC 93-19. Ralf Kornhuber. *Monotone Multigrid Methods for Elliptic Variational Inequalities II.*

Abstract: We derive fast solvers for discrete elliptic variational inequalities of the second kind as resulting from the approximation by piecewise linear finite elements. Following the first part of this paper, monotone multigrid methods are considered as extended underrelaxations. Again, the coarse grid corrections are localized by suitable constraints, which in this case are fixed by fine grid smoothing. We consider the standard monotone multigrid method induced by the multilevel nodal basis and a truncated version. Global convergence results and asymptotic estimates for the convergence rates are given. The numerical results indicate a significant improvement in efficiency compared with previous multigrid approaches.

SC 93-20. Mechthild Stoer; Geir Dahl. *A Polyhedral Approach to Multicommodity Survivable Network Design.*

Abstract: The design of cost-efficient networks satisfying certain survivability constraints is of major concern to the telecommunications industry. In this paper we study a problem of extending the capacity of a network by discrete steps as cheaply as possible, such that the given traffic demand can be accommodated even when a single edge or node in the network fails. We derive valid and non-redundant inequalities for the polyhedron of capacity design variables, by exploiting its relationship to connectivity network design and knapsack-like subproblems. Computational work using this model and the additional inequalities is in progress.

SC 93-21. Ralf Kornhuber; Harry Yserentant. *Multilevel Methods for Elliptic Problems on Domains not Resolved by the Coarse Grid.*

Abstract: Elliptic boundary value problems are frequently posed on complicated domains which cannot be covered by a simple coarse initial grid as it is needed for multigrid like iterative methods. In the present article, this problem is resolved for selfadjoint second order problems and Dirichlet boundary conditions. The idea is to construct appropriate subspace decompositions of the corresponding finite element spaces by way of an embedding of the domain under consideration into a simpler domain like a square or a cube. Then the general theory of subspace correction methods can be applied.

SC 93-22. Peter Deuffhard; Jörg Ackermann. *Adaptive Discrete Galerkin-Methods for Macromolecular Processes.*

Abstract: In this paper, a rather recent algorithmic approach to the numerical simulation of macromolecular processes is surveyed. It avoids the numerical stiff integration of thousands up to millions of ODEs by constructing a scale of discrete Hilbert spaces, especially weighted sequence spaces, and establishing corresponding Galerkin method. Examples including polyreactions of industrial relevance and ecological waste management by biochemical recycling illustrate the importance and efficiency of the algorithm.

SC 93-23. Peter Deuffhard. *Cascadic Conjugate Gradient Methods for Elliptic Partial Differential Equations I. Algorithm and Numerical Results.*

Abstract: Cascadic conjugate gradient methods for the numerical solution of elliptic partial differential equations consists of Galerkin finite element methods as outer iteration and (possibly preconditioned) conjugate gradient methods as inner iteration. Both iterations are known to minimize the energy norm of the arising iterations errors. A simple but efficient strategy to control the discretization errors versus the PCG iteration errors in terms of energy error norms is derived and worked out in algorithmic detail. In a unified setting, the relative merits of different preconditioners versus the case of no preconditioning is compared. Surprisingly, it appears that the cascadic conjugate gradient method *without any preconditioning* is not only simplest but also fastest. The numerical results seem to indicate that the cascade principle in itself already realizes some kind of preconditioning. A theoretical explanation of these observations will be given in Part II of this paper.

SC 93-24. Frank Schmidt; Peter Deuffhard. *Discrete Transparent Boundary Conditions for the Numerical Solution of Fresnel's Equation.*

Abstract: The paper presents a construction scheme of deriving transparent, i.e. reflection-free, boundary conditions for the numerical solution of Fresnel's equation (being formally equivalent to Schrödinger's equation).

These boundary conditions appear to be of a nonlocal Cauchy type. As it turns out, each kind of linear implicit discretization induces its own discrete transparent boundary conditions.

SC 93-25. Jürgen Richter-Gebert; Günter M. Ziegler *Huge Zonotopal Tilings and the Bohne-Dress Theorem*

Abstract: We prove a natural bijection between the polytopal tilings of a zonotope Z by zonotopes, and the one-element-liftings of the oriented matroid $\mathcal{M}(Z)$ associated with Z . This yields a simple proof and a strengthening of the Bohne-Dress Theorem on zonotopal tilings.

SC 93-26. Martin Grötschel; Alexander Martin; Robert Weismantel. *Optimum Path Packing on Wheels: The Noncrossing Case.*

Abstract: We show that, given a wheel with nonnegative edge lengths and pairs of terminals located on the wheel's outer cycle such that no two terminal pairs cross, then a path packing, i. e., a collection of edge disjoint paths connecting the given terminal pairs, of minimum length can be found in strongly polynomial time. Moreover, we exhibit for this case a system of linear inequalities that provides a complete and nonredundant description of the path packing polytope, which is the convex hull of all incidence vectors of path packings and their supersets.

SC 93-27. Wolfram Koepf. *A package on formal power series.*

Abstract: Formal Laurent-Puiseux series of the form

$$f(x) = \sum_{k=k_0}^{\infty} a_k x^{k/n}$$

are important in many branches of mathematics. Whereas MATHEMATICA supports the calculation of truncated series with its `Series` command, and the MATHEMATICA package `SymbolicSum` that is shipped with MATHEMATICA version 2 is able to convert formal series of the type mentioned above in some instances to their corresponding generating functions, in six publications of the author we developed an algorithmic procedure to do these conversions that is implemented by the author, A. Rennoch and G. Stölting in the MATHEMATICA package `PowerSeries`. The implementation enables the user to reproduce most of the results of the extensive bibliography on series of Hansen, E. R.: *A table of series and products*. Prentice-Hall, 1975. Moreover a subalgorithm of its own significance generates differential equations satisfied by the input function.

SC 93-28. R. Wunderling; H.Ch. Hege; M. Grammel. *On the Impact of Communication Latencies on Distributed Sparse LU Factorization.*

Abstract: Sparse LU factorization offers some potential for parallelism, but at a level of very fine granularity. However, most current distributed

memory MIMD architectures have too high communication latencies for exploiting all parallelism available. To cope with this, latencies must be avoided by coarsening the granularity and by message fusion. However, both techniques limit the concurrency, thereby reducing the scalability. In this paper, an implementation of a parallel LU decomposition algorithm for linear programming bases is presented for distributed memory parallel computers with noticeable communication latencies. Several design decisions due to latencies, including data distribution and load balancing techniques, are discussed. An approximate performance model is set up for the algorithm, which allows to quantify the impact of latencies on its performance. Finally, experimental results for an Intel iPSC/860 parallel computer are reported and discussed.

SC 93-29. Folkmar A. Bornemann; Bodo Erdmann; Ralf Kornhuber. *A Posteriori Error Estimates for Elliptic Problems.*

Abstract: Let $u \in H$ be the exact solution of a given self-adjoint elliptic boundary value problem, which is approximated by some $\tilde{u} \in \mathcal{S}$, \mathcal{S} being a suitable finite element space. Efficient and reliable a posteriori estimates of the error $\|u - \tilde{u}\|$, measuring the (local) quality of \tilde{u} , play a crucial role in termination criteria and in the adaptive refinement of the underlying mesh. A well-known class of error estimates can be derived systematically by localizing the discretized defect problem using domain decomposition techniques. In the present paper, we provide a guideline for the theoretical analysis of such error estimates. We further clarify the relation to other concepts. Our analysis leads to new error estimates, which are specially suited to three space dimensions. The theoretical results are illustrated by numerical computations.

SC 93-30. Nicht erschienen.

SC 93-31. Dominik Gruntz; Wolfram Koepf. *Formal Power Series.*

Abstract: Formal Laurent-Puiseux series of the form

$$f(x) = \sum_{k=k_0}^{\infty} a_k x^{k/n}$$

with coefficients $a_k \in \mathbb{C}$ ($k \in \mathbb{Z}$) are important in many branches of mathematics. MAPLE supports the computation of *truncated* series with its `series` command, and through the `powerseries` package infinite series are available. In the latter case, the series is represented as a table of coefficients that have already been determined together with a function for computing additional coefficients. This is known as *lazy evaluation*. But these tools fail, if one is interested in an explicit formula for the coefficients a_k . In this article we will describe the MAPLE implementation of an algorithm

presented in several papers of the second author which computes an *exact* formal power series of a given function. This procedure will enable the user to reproduce most of the results of the extensive bibliography on series. We will give an overview of the algorithm and then present some parts of it in more detail. This package is available through the MAPLE-share library with the name FPS. We flavor this procedure with the following example.

```
> FormalPowerSeries(sin(x), x=0);
```

$$\begin{array}{c} \text{infinity} \\ \text{-----} \quad k \quad (2 k + 1) \\ \backslash \quad (-1)^k x \\) \quad \text{-----} \\ / \quad (2 k + 1)! \\ \text{-----} \\ k = 0 \end{array}$$

SC 93-32. Gerhard W. Zumbusch. *Symmetric Hierarchical Polynomials for the $h - p$ Version of Finite Elements.*

Abstract: Adaptive numerical methods using the $h - p$ version of finite elements require special kinds of shape functions. Desirable properties of them are symmetry, hierarchy and simple coupling. In a first step it is demonstrated that for standard polynomial vector spaces not all of these features can be obtained simultaneously. However, this is possible if these spaces are extended. Thus a new class of polynomial shape functions is derived, which is well-suited for the p and h version of finite elements on unstructured simplices. The construction is completed by minimizing the condition numbers of the arising finite element matrices. The new shape functions are compared with standard functions widely used in the literature.

SC 93-33. Folkmar A. Bornemann. *Interpolation Spaces and Optimal Multilevel Preconditioners.*

Abstract: This paper throws light on the connection between the optimal condition number estimate for the BPX method and constructive approximation theory. We provide a machinery, which allows to understand the optimality as a consequence of an approximation property and an inverse inequality in $H^{1+\epsilon}$, $\epsilon > 0$. This machinery constructs so-called *approximation spaces*, which characterize a certain rate of approximation by finite elements and relates them with interpolation spaces, which characterize a certain smoothness.

SC 93-34. Martin Grötschel; Manfred Padberg. *Ulysses 2000: In Search of Optimal Solutions to Hard Combinatorial Problems*

Abstract: Combinatorial optimization problems pervade many areas of human problem solving especially in the fields of business, economics and engineering. Intensive mathematical research and vast increases in raw computing power have advanced the state of the art in exact and heuristic problem solving at a pace that is unprecedented in human history. We survey here in layman's terms some of the fundamental concepts and principles that have led this progress. (This article will appear – possibly in modified form – in a popular science magazine.)

SC 93-35. Martin Seebass; Dennis Sullivan; Peter Wust; Peter Deuffhard; Roland Felix. *The Berlin Extension of the Stanford Hyperthermia Treatment Planning.*

Abstract: In the field of deep regional hyperthermia, one of the most widely used devices is the BSD-2000 Hyperthermia System which employs the Sigma 60 applicator. The Sigma 60 consists of four independent sources, giving it the potential to control the energy pattern within the patient. The independent amplitudes and phases, as well as frequency selection and applicator position, present a large number of parameters for the operator to determine. Computer simulation has long been recognized as an attractive approach to optimizing these parameters.

A treatment planning program was used in clinical practice at Stanford University Medical Center for two years. It demonstrated the feasibility of computer simulation for deep regional hyperthermia in a clinical situation. However, several parts of this system were written in a language specific to one workstation, which severely restricted the wider distribution of the program to other users of the Sigma 60.

A new treatment planning system for the BSD 2000 has been developed and put into clinical practice at the Rudolf Virchow Clinic of the Free University of Berlin. The new method, which we will refer to as the Berlin system, has a simpler model construction program and a considerably better graphics capability. However, the most important feature is that all programs are written in FORTRAN, C, or the X Window graphics system. Therefore, the entire treatment planning system is completely portable to other workstations.

6.2 Technical Reports

TR 93- 1. J. Langendorf; O. Paetsch. *GRAZIL, Beschreibung der Version 6.1 des Plotpakets*

Abstract: GRAZIL ist ein interaktives Programmpaket zur grafischen Darstellung von zwei-dimensionalen Kurvenverläufen. Dem Benutzer stehen zahlreiche Kommandos und ein grafisches User-Interface zum Gestalten des Layouts der Zeichnung zur Verfügung. Die Eingabedaten müssen dem

GRAZIL-Eingabe-Format genügen. Somit wird eine hohe Flexibilität und eine große Bandbreite der Einsatzmöglichkeiten erreicht. GRAZIL wurde mit der grafischen Grundsoftware GKS entwickelt. Dadurch kann ein breites Rechner- und Ausgabegerätespektrum genutzt werden.

TR 93- 2. Herbert Melenk. *Algebraic Solution of Nonlinear Equation Systems in REDUCE.*

Abstract: The strategy for solving nonlinear equation systems automatically in the computer algebra system REDUCE is described. Kernel of the solver is a factoring Buchberger algorithm. Pre – and postprocessors enable the use of the Gröbner techniques in a black box manner. In addition to polynomials equations with surds, trigonometric functions and separable transcendental functions are covered.

TR 93- 3. Ralf Borndörfer; Martin Grötschel; Fridolin Klostermeier; Christian Küttner. *Telebus-Disposition: Ein Konzept zur Serviceverbesserung bei gleichzeitiger Kostensenkung.*

Zusammenfassung: "Telebus" ist der soziale Behindertenfahrdienst im Land Berlin.

Das Telebus-Forschungsprojekt des Konrad-Zuse-Zentrums für Informationstechnik Berlin (ZIB) hat das Ziel, den Fahrdienst (insbesondere die Disposition der Telebusse) zu verbessern, d.h. kundenfreundlicher zu gestalten und gleichzeitig billiger zu machen.

In diesem Bericht werden die bisherigen Ergebnisse dargestellt und weitere Möglichkeiten zur Verbesserung des Service und zur Reduzierung der Kosten skizziert.

TR 93- 4. Martin Grötschel; Joachim Lügger; Wolfgang Sperber. *Wissenschaftliches Publizieren und Elektronische Fachinformation im Umbruch: ein Situationsbericht aus der Sicht der Mathematik.*

Zusammenfassung: In diesem Aufsatz geben wir einen Bericht über den Stand der elektronischen Fachinformation in der Mathematik in Deutschland. Wir sehen diesen Bereich nicht als ein organisatorisch isoliertes Unterfangen, sondern eingebettet in weltweite Bestrebungen und Entwicklungen in der Informationstechnik, im wissenschaftlichen Publikationswesen und natürlich auch in der Mathematik selber. Unser Artikel endet mit einigen weitreichenden (und einigen Lesern möglicherweise spektakulär erscheinenden) Vorschlägen, die sowohl die Informationsanbieter (wie die Fachinformationszentren und Verlage), die öffentlichen Geldgeber als auch die mathematischen Organisationen (wie z. B. die DMV und die mathematischen Fachbereiche) betreffen.

Um den gegenwärtigen Zustand der elektronischen Fachinformation und unsere Gedanken zu diesem Thema adäquat beschreiben zu können, präsentieren wir eine breit angelegte Situationsanalyse. Wir stellen den gegenwärtigen

gen Stand der technologischen Entwicklung im elektronischen Publizieren dar und skizzieren seine Auswirkungen. Wir beschreiben das Feld der Interessen und Kräfte im Bereich des mathematischen Publizierens. Wir geben einen kurzen historischen Abriss der Geschichte der Klassifikation und des Referatewesens und zeigen, wie dieses in die elektronische Fachinformation auf dem Gebiet der Mathematik mündete und dann zum DMV-Projekt Fachinformation führte, das der Anlass zur Abfassung dieses Artikels war. Wir skizzieren die gegenwärtige Rezeption elektronischer Fachinformation in der Mathematik in Deutschland.

Ausgehend von einer Darstellung und Bewertung verschiedener Modelle des Referatewesens zeigen wir unter Einbeziehung der vorhandenen technischen Gegebenheiten (elektronische Netze etc.) verschiedene Möglichkeiten zur Liberalisierung und Rationalisierung des weltweiten mathematischen Informationswesens auf. Wir sehen den Austausch von Information in engem Zusammenhang mit dem Austausch von Software im Wissenschaftsbereich und regen auch in diesem Bereich an, internationale Kooperation und Offenheit anzustreben.

TR 93- 5. Bodo Erdmann; Jens Lang; Rainer Roitzsch. *Kaskade Manual — Version 2.0.*

Abstract: The KASKADE toolbox defines an interface to a set of C subroutines which can be used to implement adaptive multilevel Finite Element Methods solving systems of elliptic equations in two and three space dimensions. The manual contains the description of the data structures and subroutines. The main modules of the toolbox are a runtime environment, triangulation and node handling, assembling, direct and iterative solvers for the linear systems, error estimators, refinement strategies, and graphic utilities. Additionally, we included appendices on the basic command language interface, on file formats, and on the definition of the partial differential equations which can be solved. The software is available on the ZIB ftp-server `elib` in the directory `pub/kaskade`. TR 93-5 supersedes TR 89-4 and TR 89-5.

TR 93- 6. Günter M. Ziegler. *Lectures on Polytopes. (Preliminary Version.)* [out of print]

Abstract: These lecture notes have several aims:

- to give an introduction to some basic facts about convex polytopes, with an emphasis on the basic methods that yield them (Fourier-Motzkin elimination, Schlegel diagrams, shellability, Gale transforms and oriented matroids),
- to discuss some important examples and elegant constructions (cyclic and neighborly polytopes, zonotopes, Minkowski sums, permutahedra and associahedra, fiber polytopes, the Lawrence construction)

- and to illustrate why polytope theory is exciting, with highlights like Kalai's new diameter bounds, the construction of non-rational polytopes, the Bohne-Dress tiling theorem, shellability and the upper bound theorem,

For several of these topics the decisive break-through is very recent, which suggests that there is much more discovered.

TR 93- 7. H.Ch. Hege, T. Höllerer, D. Stalling. *Volume Rendering - Mathematical Models and Algorithmic Aspects.*

Abstract: In this paper various algorithms for rendering gaseous phenomena are reviewed. In computer graphics such algorithms are used to model natural scenes containing clouds, fog, flames and so on. On the other hand it has become an important technique in scientific visualization to display three dimensional scalar datasets as cloudy objects. Our emphasis is on this latter subject of so-called *direct volume rendering*. All algorithms will be discussed within the framework of linear transport theory. The equation of transfer is derived. This equation is suitable to describe the radiation field in a participating medium where absorption, emission, and scattering of light can occur. Almost all volume rendering algorithms can be shown to solve special cases of the equation of transfer. Related problems like the mapping from data values to model parameters or possible parallelization strategies will be discussed as well.

TR 93- 8. Andreas Hohmann. *An Implementation of Extrapolation Codes in C++.*

Abstract: This report describes the new object oriented implementation of extrapolation codes EULEX, EULSIM, DIFEX for ordinary differential equations. The resulting C++ class library provides a simple and flexible interface to these methods and incorporates advanced features like continuous output and order-stepsize freezing. The interface of the ODE classes allows in particular a user-defined solver for the linear systems occurring in the linearly implicit discretization scheme. The library also provides some classes for numerical objects such as vectors and (full) matrices. Due to the underlying data-view concept it is possible to access substructures without copying. In addition, we included several utility classes such as a timer and a minimal command language that may be useful in other contexts, too.

TR 93- 9. Jens Lang. *KARDOS - KAskade Reaction Diffusion One-dimensional System.*

Abstract: A software package for the adaptive solution of time-dependent reaction-diffusion systems and linear elliptic systems in one space dimension is presented. The used algorithm is based on fundamental arguments in J. Lang, A. Walter: *A Finite Element Method Adaptive in Space and*

Time for Nonlinear Reaction-Diffusion Systems. IMPACT of Computing in Science and Engineering, 4, p. 269-314 (1992). Here, only brief outlines of the algorithm are given. This software package is based on the KASKADE toolbox B. Erdmann, J. Lang, R. Roitzsch: *KASKADE - Manual.* To appear as Technical Report TR 93-5, Konrad-Zuse-Zentrum (ZIB) (1993).

TR 93-10. Peter Deuffhard; Reinhard Bölling; Raoul H. Bott. *Materialien zur Euler-Vorlesung in Sanssouci.*

Aus dem Inhalt: Vorwort; Leonhard Euler - aus der Zeit seines Wirkens in Berlin; Introductory Remarks.

TR 93-11. Nicht erschienen.

TR 93-12. Konrad Zuse. *Cellular structured space (Rechnender Raum) and physical phenomena.*

Abstract: The problem of nonlocal correlation and symmetry in space is of great importance in physical phenomena like the "Einstein-Poloski-Rosen-Paradox" and others. It is shown that in Cellular Automata (Rechnender Raum) the structure of the space offers solutions for such problems.

TR 93-13. Andreas Hohmann. *Inexact Gauss Newton Methods for Parameter Dependent Nonlinear Problems.*

Abstract: A new approach to inexact Gauss Newton methods for the solution of underdetermined nonlinear problems is presented. It is based on a convergence theorem being invariant under affine transformations of the domain and results in an easily implementable accuracy matching strategy for the arising linear subproblems which guarantees the quadratic convergence. Thanks to the weak assumptions on the given nonlinear problem, the results provide a general framework for multilevel Newton and continuation methods. As an example, a new multilevel Newton h-p collocation method for boundary value problems of ordinary differential equations is developed. It combines the inexact Newton method with a linear collocation solver using adaptive refinement and variable orders. The performance of the resulting C++ class library COCON is demonstrated by some numerical examples including singular perturbed problems. In addition, the new method is applied to a realistic railway bogie model in which a branch of periodic solutions emanates from a branch of fixed points at a Hopf bifurcation.

TR 93-14. U. Nowak. *Adaptive Linienmethoden für nichtlineare parabolische Systeme.*

Abstract: A new method for the numerical solution of highly nonlinear, coupled systems of parabolic differential equations in one space dimension is

presented. The approach is based on a classical method of lines treatment. Time discretization is done by means of the semi-implicit Euler discretization. Space discretization is done with finite differences on non-uniform grids. Both basic discretizations are coupled with extrapolation techniques. With respect to time the extrapolation is of variable order whereas just one extrapolation step is done in space. Based on local error estimates for both, the time and the space discretization error, the accuracy of the numerical approximation is controlled and the discretization stepsizes are adapted automatically and simultaneously. Besides the local adaptation of the space grids after each integration step (static regridding), the grid may even move within each integration step (dynamic regridding). Thus, the whole algorithm has a high degree of adaptivity. Due to this fact, challenging problems from applications can be solved in an efficient and robust way.

6.3 Beiträge in Zeitschriften

1. K. Akemi, Ph. deForcrand, M. Fujisaki, T. Hashimoto, H.Ch. Hege, et.al.: *Quantum Chromodynamics Simulations on a Nondedicated Highly Parallel Computer*. Preprint Yamagata-HEP 93-1 und IPS Research Report 93-64 (1993)
2. K. Akemi, Ph. deForcrand, M. Fujisaki, T. Hashimoto, H.Ch. Hege, et.al.: *QCD on the Massively Parallel Computer AP1000*. Int. J. Mod. Phys. C4 1233-1253 (1993)
3. K. Akemi, Ph. deForcrand, M. Fujisaki, T. Hashimoto, H.Ch. Hege, et.al.: *Autocorrelation in Updating Pure SU (3) Lattice Gauge Theory by the Use of Overrelaxed Algorithms*. Nucl. Phys. B Proc. Suppl. **30**, 253-256 (1993)
4. K. Akemi, Ph. deForcrand, M. Fujisaki, T. Hashimoto, H.Ch. Hege, et.al.: *Study of Spatial Size Effects in Quenched Wilson Hadron Spectroscopy at $\beta = 6.3$* . Nucl. Phys. B Proc. Suppl. **30**, 373-376 (1993)
5. K. Akemi, Ph. deForcrand, M. Fujisaki, T. Hashimoto, H.Ch. Hege, et.al.: *Monte Carlo Renormalization Group Study at Large β in the Confinement Region*. Nucl. Phys. B Proc. Suppl. **30**, 517-520 (1993)
6. N. Ascheuer, L.F. Escudero, M. Grötschel, M. Stoer: A Cutting Plane Approach to the Sequential Ordering Problem (With Applications to Job Scheduling in Manufacturing), *SIAM Journal on Optimization* **3** (1993), 25-42.

7. A. Björner, M. Las Vergnas, B. Sturmfels, N. White, G.M. Ziegler: *Oriented Matroids*, Encyclopedia of Mathematics, **46**, Cambridge University Press, Cambridge 1993, 516 pages.
8. F. Bornemann, B. Erdmann, R. Kornhuber: *Adaptive Multilevel Methods in Three Space Dimensions*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, **36**, p. 3187–3203, (1993)
9. T.H. Brylawski, G.M. Ziegler: Topological representation of dual pairs of oriented matroids, Special issue on “Oriented Matroids” (eds. J. Richter-Gebert, G. M. Ziegler), *Discrete & Computational Geometry* (3) **10** (1993), 237–240.
10. W. Dalitz, J. Lügger, G. Schneider: *Das Informationssystem CAIS*. In: *Computeralgebra in Deutschland – Bestandsaufnahmen, Mögliche Perspektiven*. Fachgruppe Computeralgebra der GI, DMV und GAMM (Herausgeber), Passau und Heidelberg, p. 301–304 (1993)
11. M. Dinand, Ch. Schütte: *Theoretical Modelling of Relaxation Oscillations in Er-doped Waveguide Lasers*. Eingereicht in Journal of Lightwave Technology.
12. M. Dinand, Ch. Schütte, R. Brinkmann, W. Sohler, H. Suche: *Relaxation Oscillations in Er-diffused Ti : LiNbO₃ Waveguide Lasers*. Proceedings of the 6th European Conference of Integrated Optics 1993 in Neuchâtel (ECIO '93), **3** (1993)
13. B. Erdmann, M. Frei, R.H.W. Hoppe, R. Kornhuber, U. West: *Adaptive Finite Element Methods for Variational Inequalities*. East-West J. Numer. Math., **1**, No. 3, p. 165–197 (1993)
14. C.E. Ferreira, M. Grötschel, S. Kiefl, C. Krispenz, A. Martin, R. Weismantel: Some Integer Programs Arising in the Design of Main Frame Computers, *Zeitschrift für Operations Research* **38** (1993), 77–100.
15. S.D. Flåm, Schultz,R.: A new approach to stochastic linear programming, *Numerical Functional Analysis and Optimization* **14** (1993), 545–554.
16. K. Gatermann: *Computation of Bifurcation Graphs*. In: *Exploiting Symmetry in Applied and Numerical Analysis*. 1992 AMS–SIAM Summer Seminar in Applied Mathematics, July 26 – August 1, 1992. E. Allgower, K. Georg, R. Miranda (eds.), AMS Lectures in Applied Mathematics, **29**, Providence, RI, USA (1993)
17. M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber: *Elektronische Fachinformation an Hochschulen und Statusbericht zum DMV-Projekt “Fachinformation”*. Mitteilungen der DMV **2** (1993)

18. M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber: *Wissenschaftliches Publizieren und Elektronische Fachinformation im Umbruch: Ein Situationsbericht aus der Sicht der Mathematik*. In: Jahrbuch "Überblicke Mathematik 1994", S.D. Chatterji, B. Fuchssteiner, U. Kulisch, R. Liedl (eds.), Vieweg-Verlag (1993)
19. M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel: Routing in Grid Graphs by Cutting Planes, In: G. Rinaldi, L. A. Wolsey (eds.), Proceedings of the 3rd Conference "Integer Programming and Combinatorial Optimization", Erice, Italy 1993, 447-461.
20. M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber: DMV-Projekt "Fachinformation", *Mitteilungen der DMV* **2** (1993), 21-28.
21. W. Koepf: *Algorithmic development of power series*. In: Artificial intelligence and symbolic mathematical computing, ed. von J. Calmet, J.A. Campbell, International Conference AISMC-1, Karlsruhe, Germany, August 1992, Proceedings, Lecture Notes in Computer Science **737**, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, p. 195-213, (1993)
22. W. Koepf: *Examples for the algorithmic calculation of formal Puiseux, Laurent and power series*. SIGSAM Bulletin **27**, p. 20-32, (1993)
23. W. Koepf, A. Ben-Israel: *Integration mit DERIVE*. Didaktik der Mathematik **21**, p. 40-50, (1993)
24. W. Koepf: *Eine Vorstellung von MATHEMATICA und Bemerkungen zur Technik des Differenzierens*. Didaktik der Mathematik **21**, p. 125-139, (1993)
25. W. Koepf: *Ein elementarer Zugang zu Potenzreihen*. Didaktik der Mathematik **21**, p. 292-299, (1993)
26. R. Kornhuber, G. Wittum: *Discretization and Preconditioning of Convection Diffusion Equations*. In: Incomplete Decompositions (ILU) - Algorithms, Theory, and Applications, W. Hackbusch et al. (eds.), Vieweg, p. 67-77, (1993)
27. R. Kornhuber, R. Roitzsch: *Self Adaptive Finite Element Simulation of Bipolar, Strongly Reverse Biased pn-Junctions*. Communications in Numerical Methods in Engineering, **9**, p. 243-250, (1993)
28. J. Lang, A. Walter: *An adaptive Rothe method for nonlinear reaction-diffusion systems*. Applied Numerical Mathematics **13**, p. 135-146 (1993)
29. J. Liu, L.E. Trotter, G.M. Ziegler: On the hight of the minimal Hilbert basis, *Results in Mathematics* **23** (1993), 374-376.

30. Ch. Lubich, U. Nowak, U. Pöhle, Ch. Engstler: *An Overview of MEXX: Numerical Software for Integration of Multibody Systems*. In: W. Schielen (ed.): *Advanced Multibody System Dynamics*, 421–426 (1993)
31. J. Lügger, W. Dalitz: *OPT-Net: A New Communication Facility for Scientists Interested in Optimization*. *GMÖOR Newsletter* **2**, p. 7–9 (1993)
32. J. Manz, G. Paramonov, M. Polasek, Ch. Schütte: *Overtone state-selective isomerization by series of infrared picosecond laser pulses: Model simulations for $Be_2H_3D^-$* . *Israel Journal of Chemistry*. Erscheint im Mai 1994.
33. N.E. Mnëv, G.M. Ziegler: Combinatorial models for the finite-dimensional Grassmannians, Special issue on “Oriented Matroids” (eds. J. Richter-Gebert, G.M. Ziegler), *Discrete & Computational Geometry* (3) **10** (1993), 241–250.
34. U. Nowak: *Dynamic Sparsing in Stiff Extrapolation Methods*. *IMPACT of Comp. in Science and Engineering* **5**, 53–74 (1993)
35. W. Römisch, R. Schultz: *Stability of solutions for stochastic programs with complete recourse*. *Mathematics of Operations Research*, **18**, p. 590–603 (1993)
36. F. Schmidt: *An Adaptive Approach to the Numerical Solution of Fresnel’s Wave Equation*. *IEEE Journal of Lightwave Technology*, **11**, No. 9, p. 1425–1434 (1993)
37. Ch. Schütte: *A Quasiresonant Smoothing Algorithm for the Fast Analysis of Selective Vibrational Excitation*. *IMPACT of Computing in Science and Engineering*, **5**, p. 176–200 (1993)
38. R. Schultz: Continuity properties of expectation functions in stochastic integer programming, *Mathematics of Operations Research* **18** (1993), 578–589.
39. M. Seebass, W. Schlegel, P. Wust, J. Nadobny: *Thermal Modelling for Brain Tumors*. In: *Medical Radiology. Interstitial and Intracavitary Thermoradiotherapy*, M.H. Seegenschmiedt, R. Sauer (Eds.), Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, pp. 143–146 (1993)
40. B. Sturmfels, G.M. Ziegler: Extension spaces of oriented matroids, *Discrete & Computational Geometry* **10** (1993), 23–45.
41. G.M. Ziegler: Higher Bruhat orders and cyclic hyperplane arrangements, *Topology* **32** (1993), 259–279.

42. G.M. Ziegler: On the difference between real and complex arrangements, *Mathematische Zeitschrift* **212** (1993), 1–11.
43. G.M. Ziegler: “What is a complex matroid?” Special issue on “Oriented Matroids” (eds. J. Richter–Gebert, G. M. Ziegler), *Discrete & Computational Geometry* (3) **10** (1993), 313–348.
44. G.M. Ziegler: Some almost exceptional arrangements, *Advances in Mathematics* **101** (1993), 50–58.
45. G.M. Ziegler, R.T. Živaljević: Homotopy types of subspace arrangements via diagrams of spaces, *Mathematische Annalen* **295** (1993), 527–574.

6.4 Monographien

Numerische Mathematik II. Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen.

Bearbeiter: P. Deuffhard, F. Bornemann

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Berichtszeitraum ging ein großer Teil der Energie und Zeit in die Arbeit an diesem Lehrbuch. Das wissenschaftliche Ziel, nämlich eine Vereinheitlichung der Begriffe und Konzepte der Gebiete Dynamische Systeme und Numerische Mathematik von gewöhnlichen Differentialgleichungen erwies sich als arbeitsintensiv, aber äußerst lohnend. In der Tat ist inzwischen eine wesentliche konzeptionelle Straffung des Stoffes geglückt, unter anderem durch Einführung von Begriffen wie diskrete Evolution, Kondition von Anfangswertproblemen, diskrete Kondition von Diskretisierungsmethoden und eine daraus abgeleitete natürliche Charakterisierung von steifen Differentialgleichungen, die sich mit der Empirie und Historie deckt. Effektive Algorithmen werden direkt aus der Theorie auf möglichst kurzen Wegen hergeleitet. Schrittweitensteuerung als Kern von adaptiven Integratoren erhält gesonderte Bedeutung durch eine Interpretation als diskreter PID-Regler. Das Manuskript in seiner jetzigen Form ist sicherlich für Mathematiker und Theoretische Physiker geeignet, vielleicht aber nicht mehr, wie ursprünglich anvisiert, auch noch für allgemeine Naturwissenschaftler und Ingenieure. Wir glauben dennoch, daß das Buch eine Lücke füllt: Mathematiker werden üblicherweise bei komplexen Anwendungsproblemen nur dann hinzugezogen, wenn die Standard-Software nicht mehr zur Problemlösung führt; genau dann ist aber das Wissen gefragt, das wir in unserem Buch vermitteln wollen. Im folgenden wird die Gliederung des bereits fertiggestellten Teils des Buches als Vorabinformation angegeben.

1 Mathematische Modelle zeitabhängiger Prozesse

- 1.1 Newtonsche Himmelsmechanik
- 1.2 Chemische Reaktionskinetik
- 1.3 Dynamische Systeme

2 Existenz und Eindeutigkeit

- 2.1 Globale Existenz- und Eindeutigkeitsaussagen
- 2.2 Beispiele maximaler Fortsetzbarkeit
- 2.3 Struktur nichteindeutiger Lösungen
- 2.4 Schwach singuläre Anfangswertprobleme
- 2.5 Differentiell-algebraische Anfangswertprobleme

- 3 Kondition und Stabilität**
 - 3.1 Sensitivität gegen Störungen
 - 3.1.1 Variationsgleichung und Propagationsmatrix
 - 3.1.2 Konditionszahlen
 - 3.1.3 Störungsindex differentiell–algebraischer Probleme
 - 3.2 Stabilität von Differentialgleichungen
 - 3.2.1 Begriff der Stabilität
 - 3.2.2 Invariante Teilräume linearer Differentialgleichungen
 - 3.2.3 Stabilität von stationären Punkten
 - 3.3 Stabilität rekursiver Abbildungen
 - 3.3.1 Invariante Teilräume linearer Rekursionen
 - 3.3.2 Spektren rationaler Funktionen von Matrizen

- 4 Einschrittverfahren für nichtsteife Probleme**
 - 4.1 Konsistenz und Diskretisierungsfehler
 - 4.2 Explizite Runge–Kutta Verfahren
 - 4.2.1 Idee der Runge–Kutta Verfahren
 - 4.2.2 Klassische Runge–Kutta Verfahren
 - 4.2.3 Komplexität der Bedingungsgleichungen
 - 4.2.4 Diskrete Kondition
 - 4.3 Extrapolationsverfahren
 - 4.3.1 Idee der Extrapolation
 - 4.3.2 Asymptotische Entwicklung des Diskretisierungsfehlers
 - 4.3.3 Extrapolation von Runge–Kutta Verfahren
 - 4.3.4 Extrapolierte explizite Mittelpunktsregel

- 5 Schrittweitensteuerung bei Einschrittverfahren**
 - 5.1 Lokale Genauigkeitskontrolle
 - 5.2 Regelungstechnische Analyse
 - 5.2.1 Exkurs über PID–Regler
 - 5.2.2 Schrittweitensteuerung als Regler
 - 5.3 Prinzip der Fehlerschätzung
 - 5.4 Eingebettete Runge–Kutta Verfahren
 - 5.5 Erzielte Genauigkeit

- 6 Einschrittverfahren für steife und differentiell–algebraische Probleme**
 - 6.1 Vererbung der Stabilität eines linearen Phasenflusses
 - 6.1.1 Rationale Approximationen der Exponentialfunktion
 - 6.1.2 Stabilitätsgebiete
 - 6.1.3 Stabilitätsbegriffe

- 6.1.4 Reversibilität und diskrete Isometrien
- 6.1.5 Vererbung bei nichtlinearen Problemen
- 6.2 Implizite Runge–Kutta Verfahren
 - 6.2.1 Stabilitätsfunktionen von Runge–Kutta Verfahren
 - 6.2.2 Lösung der nichtlinearen Gleichungssysteme
- 6.3 Runge–Kutta Verfahren vom Kollokationstyp
 - 6.3.1 Idee der Kollokation
 - 6.3.2 Gauß- und Radau–Verfahren
 - 6.3.3 Dissipative Differentialgleichungen
 - 6.3.4 Erhalt quadratischer erster Integrale
- 6.4 Linear–implizite Einschrittverfahren
 - 6.4.1 Linear–implizite Runge–Kutta Verfahren
 - 6.4.2 Extrapolation des linear–implizite Euler–Verfahrens
- 7 Mehrschrittverfahren**
 - 7.1 Lineare Mehrschrittverfahren über äquidistantem Gitter
 - 7.1.1 Konsistenz
 - 7.1.2 Stabilität als notwendige Konvergenzbedingung
 - 7.1.3 Folgenkalkül und Konvergenzsatz
 - 7.1.4 Diskrete Kondition
 - 7.2 Vererbung der Stabilität eines linearen Phasenflusses
 - 7.2.1 Schwache Instabilität von Mehrschrittverfahren
 - 7.2.2 Stabilitätsbegriffe
 - 7.3 Konstruktionsprinzipien
 - 7.3.1 Numerische Quadratur: Adams–Verfahren
 - 7.3.2 Numerische Differentiation: BDF–Verfahren
 - 7.4 Ordnungs- und Schrittweitensteuerung
 - 7.4.1 Adams–Verfahren über variablem Gitter
 - 7.4.2 BDF–Verfahren über variablem Gitter
 - 7.4.3 Nordsieck–Darstellung

Softwareverzeichnis

Literaturverzeichnis

Symbolverzeichnis

Index

Mathematik mit DERIVE

Bearbeiter: W. Koepf

Kooperation: A. Ben-Israel (Rutgers-University, NJ, USA), R.P. Gilbert (University of Delaware, DE, USA)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die Miniaturisierung der Computertechnologie sowie die Verbreitung von Computeralgebrasystemen hat zur Folge, daß in der zukünftigen mathematischen Lehre dieser neuen Situation Rechnung getragen und die graphischen, numerischen und symbolischen Fähigkeiten solcher Systeme als Hilfsmittel eingesetzt werden sollten. Ein entsprechendes Forschungsprojekt, das in den vergangenen Jahren durch Mittel der Alexander von Humboldt-Stiftung sowie durch Sonderforschungsmittel der Freien Universität Berlin gefördert worden ist, hatte die Zielsetzung, den Einsatz eines Computeralgebrasystems in der mathematischen Lehre durch die Erarbeitung eines Lehrbuchs zu fördern. Dabei sollte die Verwendung eines Computeralgebrasystems als didaktisches Hilfsmittel die Wissensvermittlung durch die Zurverfügungstellung graphischer, numerischer sowie symbolischer Rechenfähigkeiten anreichern. Wirklich rechenintensive Problemstellungen sind dann nicht von vornherein aussichtslos. Aufgrund der einfachen Benutzung sowie der hohen Verfügbarkeit haben wir uns für die Verwendung von DERIVE entschieden.

Schließlich entstand eine deutsche Lehrbuchversion im Rahmen meiner Vorlesungsaktivität des Analysis-Zyklus am Fachbereich Mathematik/Informatik der Freien Universität Berlin. Im Berichtszeitraum sind die Arbeiten zur eindimensionalen Analysis abgeschlossen worden, und das Lehrbuch [1] erschien beim Vieweg-Verlag.

Die Abbildung zeigt eine dreidimensionale graphische Darstellung von DERIVE aus [1].

Literatur

1. W. Koepf, A. Ben-Israel, R.P. Gilbert: *Mathematik mit DERIVE*. Vieweg-Verlag, Braunschweig-Wiesbaden, 1993.

7 Produkte

7.1 REDUCE/PSL

Das ZIB vertreibt den LISP Dialekt Portable Standard LISP (PSL) und das darauf aufbauende Programmsystem REDUCE für symbolische Mathematik (Anthony C. Hearn et al.) weltweit für zahlreiche Rechnersysteme. Zusätzlich wurden vom ZIB Vertriebslizenzen vergeben an CALCODE (Venice, CA, USA), Universität Köln (REDUCE für IBM /370, mit Version 3.5 ausgelaufen), Joint Institute for Nuclear Research (Dubna, Rußland), Queen Mary & Westfield College (London, U.K.), Technische Universität Prag (Tschechien) und Softec Corp. (Obayashi, Japan).

7.2 GOS

Das System GOS dient zur Unterstützung der Inventarisierung und Dokumentation im Museum. GOS bietet Datenstrukturen und Verarbeitungsmoduln an, die den komplexen Informationsstrukturen in diesem Bereich besonders angepaßt sind. GOS wird vom ZIB in der Form PC-GOS (für Personal Computer) weitergegeben – vgl. auch Kapitel 4.

7.3 Symbolische Verfahren

7.3.1 POWERSERIES

W. Koepf: *Ein Mathematica Package für die Behandlung von Differentialgleichungen, Rekursionsgleichungen und symbolischen Potenzreihen*. Das Package ist auf dem Server [ftp.zib-berlin.de](ftp://ftp.zib-berlin.de) über anonymous ftp im Verzeichnis `pub/PowerSeries` erhältlich.

7.3.2 FPS

D. Gruntz, W. Koepf: *Ein Maple Package für die Behandlung von Differentialgleichungen und symbolischen Potenzreihen*. Das Package ist auf dem Server [ftp.zib-berlin.de](ftp://ftp.zib-berlin.de) über anonymous ftp im Verzeichnis `pub/FPS` erhältlich.

7.4 code++

Eine C++ Klassenbibliothek für gewöhnliche Differentialgleichungen

Bearbeiter: A. Hohmann, Ch. Schütte

Kooperation: M. Wulkow (CiT, Wiefelstede)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die im letzten Jahr vorgestellte modulare Implementierung der Extrapolationsintegratoren für gewöhnliche Differentialgleichungen in C (siehe TR 92–5) wurde zu einer C++ Klassenbibliothek umgearbeitet und dabei beträchtlich erweitert und verbessert.

So wurden beispielsweise Algorithmen für die stetige Ausgabe von Trajektorien für Extrapolationsmethoden implementiert. Die dabei definierte abstrakte Trajektorienklasse kann über diese direkte Anwendung hinaus benutzt werden, um beliebige vom Benutzer definierte Zwischenergebnisse verfügbar zu machen.

Ferner wurde die Möglichkeit eingebaut, die Ordnungs- und Schrittweitenfolge "einzufrieren", d.h., abzuspeichern und für weitere Integrationen einzusetzen. Dies erweist sich zum Beispiel bei der Lösung von Variationsgleichungen als sinnvoll, die nun direkt entlang der kontinuierlich vorliegenden Trajektorien mit derselben Diskretisierung vorgenommen werden kann.

Die Robustheit der auf semiimpliziten Diskretisierung basierenden Integratoren wurde durch einen neuen residuenorientierten Monotonietest deutlich gesteigert. Dieser Test hat sich auch in komplexeren Integratoren für abzählbare Differentialgleichungssysteme (CODEs) bewährt.

Durch die Möglichkeiten in C++ konnte das gesamte Paket deutlich übersichtlicher strukturiert und die Benutzerschnittstellen vereinfacht werden. Als Basis dient eine Sammlung von Klassen für Objekte der linearen Algebra (Vektoren, Matrizen, Pseudoinverse, etc.), die zusammen mit den weiteren zur Verfügung gestellten Klassen (Listen, zeilenorientierter Interpreter) auch in anderem Zusammenhang von Nutzen sein kann. Als nächste Erweiterungen sind geplant:

- Sparse Matrix Klassen und Löser, insbesondere zur Berechnung der Pseudoinversen, basierend auf den Programmen von C. Klein-Robbenhaar.
- Fortsetzungsverfahren für stationäre und periodische Lösungen gewöhnlicher Differentialgleichungen.

Die Bibliothek wurde im TR 93–8 dokumentiert und ist öffentlich verfügbar über den anonymen ftp-Zugang der eLib

elib.ZIB-Berlin.de (130.73.108.11)

in dem Verzeichnis pub/code++.

7.5 CODELIB

Das ZIB entwickelt und unterhält eine Sammlung von Algorithmen, genannt CODELIB, für Anwendungen auf dem Gebiet "Scientific Computing". Die folgende Aufstellung umfaßt die Namen der bisher von der Abteilung "Numerische Softwareentwicklung" des ZIB nach Software-Gesichtspunkten bearbeiteten Produkte und ihre kurze Charakterisierung. Ein ausführlicheres Verzeichnis der CODELIB sowie Produktinformationen können vom ZIB angefordert werden.

7.5.1 Große nichtsymmetrische lineare Gleichungssysteme

GBIT 1 Iterative Sekanten-Methode basierend auf "Good Broyden updates" mit passender optimaler Schrittlängenbestimmung (mnemotechnisch für: Good Broyden Iteration)

7.5.2 Nichtlineare Gleichungssysteme und Ausgleichsrechnung

- NLEQ1 Newton-Verfahren, vollbesetzte Jacobi-Matrix, ohne Rangstrategie
- NLEQ1S Newton-Verfahren, dünnbesetzte Jacobi-Matrix, ohne Rangstrategie
- NLEQ2 Newton-Verfahren, vollbesetzte Jacobi-Matrix, mit Rangstrategie
- NLSCON Gauss-Newton-Verfahren für nichtlineare Ausgleichsrechnung, evtl. mit nichtlinearen Gleichungsbeschränkungen (mnemotechnisch für: Nonlinear Least Squares with nonlinear equality CONstraints)
- GIANT Inexaktes Newton-Verfahren für sehr große Systeme, iterative Lösung der linearen Gleichungssysteme (mnemotechnisch für: Global Inexact Affinvariant Newton Techniques)

7.5.3 Lösung von Anfangswertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen

- EULEX Nichtsteife Systeme erster Ordnung, explizite Euler-Diskretisierung mit h -Extrapolation
- DIFEX1 Nichtsteife Systeme erster Ordnung, explizite Mittelpunktsregel mit h^2 -Extrapolation
- DIFEXM Nichtsteife Systeme zweiter Ordnung, Störmer-Diskretisierung mit h^2 -Extrapolation
- KEPLEX Nichtsteife Systeme zweiter Ordnung, Kepler-Diskretisierung mit h^2 -Extrapolation
- EULSIM Steife Systeme erster Ordnung, semi-implizite Euler-Methode mit h -Extrapolation
- METAN1 Steife Systeme erster Ordnung, semi-implizite Mittelpunktsregel mit h^2 -Extrapolation
- LIMEX Extrapolationsverfahren mit h -Extrapolation, linear-implizite differentiell-algebraische Systeme
- LIMEXS LIMEX-Variante für große Systeme mit dünnbesetzter Jacobimatrix
- MEXX h -Extrapolationsverfahren für differentiell-algebraische Systeme aus der Mehrkörperdynamik
- LARKIN Simulation großer chemischer Reaktionskinetik

7.5.4 Lösung von Randwertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen

- BVPSOL Mehrzielmethode mit explizitem oder semi-implizitem Integrator und Newton-Verfahren mit "condensing" Algorithmus für 2-Punkt-Randwertprobleme (Standardprobleme)
- BVPSOG Mehrzielmethode mit explizitem oder semi-implizitem Integrator und Newton-Verfahren mit globalem linearen Löser für 2-Punkt-Randwertprobleme (Standardprobleme)
- BVPLSQ Mehrzielmethode mit explizitem Integrator DIFEX1 und Gauss-Newton-Verfahren für überbestimmte 2-Punkt-Randwertprobleme
- MULCON Mehrzielmethode mit Pfadverfolgungsmethode und "condensing" Algorithmus für parameterabhängige 2-Punkt-Randwertprobleme

7.5.5 Stationäre partielle Differentialgleichungen

- KASKADE Baukasten für adaptive Multilevel-Verfahren auf beliebigen Gebieten in 2D
- ELLKASK2D Anwendung des KASKADE-Baukastens für skalare, lineare elliptische Probleme
- ELLKASK3D Adaptives Multilevel-Verfahren mit linearen finiten Elementen für skalare, lineare elliptische Probleme auf beliebigen Gebieten in 3D

7.5.6 Instationäre partielle Differentialgleichungen

- KARDOS Reaktions- Diffusionsgleichungen in 1D und Verwendung eines speziellen KASKADE-Baukastens
- KASTIO Parabolischer Gleichungslöser (2D)

7.5.7 Freie Randwertprobleme für partielle Differentialgleichungen

- OBSTACLE Adaptive Multilevel-Methode zur Lösung freier Randwertprobleme (2D, 3D)

7.5.8 Gemischt symbolisch-numerische Verfahren

- SYMCON K. Gatermann, A. Hohmann: *Lösung von Gleichungssystemen mit Symmetrie mit Hilfe von Fortsetzungsmethoden*. 2. Version erhältlich unter anonymous ftp von elib am ZIB, 1992.

8 Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern

8.1 Vorträge und Gastaufenthalte

A. Abdel-Hamid

- 02.03.93 *Polyedrische Ansätze für verallgemeinerte Zuordnungsprobleme.* Berichtskolloquium des DFG-Schwerpunktes "Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung", Suhl/Thüringen
- 30.04.93 *Kombinatorische Optimierung beim Design und Management von Hochregallagern.* 12. Berliner Algorithmen-Tag (BAT), TU Berlin
- 17.08.93 *Generalized Assignment Problems encountered in the optimization of an automatic storage system.* 4th Stockholm Optimizations Days, Royal Institute of Technology, Stockholm/Schweden
- 01.09.93 *Optimization questions associated with the design and management of a storage system.* 18. Symposium über Operations Research, Universität zu Köln

N. Ascheuer

- 19.01.93 *On-line Hamiltonian path problems.* Conference on "Combinatorial Optimization", Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach
- 23.04.93 *Bounds for on-line Hamiltonian path problems.* European Doctoral Program in Quantitative Methods in Management, Meeting at Imperial College, London/England
- 20.05.93 *Asymmetric Hamiltonian path problems with precedence constraints.* Science workshop 1993, Schloß Dagstuhl
- 01.09.93 *A Branch&Cut-approach to the sequential ordering problem.* Symposium on Operations Research (SOR), Köln
- 25.11.93 *Mathematik in der Praxis.* ZIB-Berlin

R. Borndörfer

- 01.11.93 *An Application of Set Partitioning to Handicapped People's Transport.* Tagung über Algorithmische Methoden der Diskreten Mathematik, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

F. Bornemann

- 23.01.93** *Adaptive Solution of one-dimensional scalar conservation laws with convex flux.* 9. GAMM Seminar Kiel über "Adaptive Methods: Algorithms, Theory & Applications"
- 28.01.93** *Adaptive Lösung zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen.* TU Magdeburg
- 06.05.93** *Adaptivität und schnelle Löser bei partiellen Differentialgleichungen.* Qualitativ ökonomisches Colloquium des Fachbereichs Wirtschaftswissenschaft der FU Berlin
- 22.06.93** *Adaptive Lösung zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen.* Universität – Gesamthochschule – Essen
- 02.08.93** *Adaptive Rothe's Method for Time-Dependent PDEs.* 2. Gauß-Symposion, München
- 25.10.93** *Adaptive Multilevel Solution of Time-Dependent PDEs.* Courant Institute, New York/USA
- 29.10.93** *Interpolation Spaces and Additive Schwarz Methods.* 7th International Conference on Domain Decomposition Methods, Pennsylvania State University, USA
- 30.11.93** *Adaptive Rothe-Methoden zur Lösung zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen.* Universität Bonn

H. Busch

- 01.04.93** *How to save inodes on a Data Migration File System without angering the users.* Cray User Group Conference Spring '93 in Montreux/Schweiz
- 06.05.93** *Pläne für eine breitbandige Vernetzung.* Cray-Netztag, Hannover
- 07.05.93** *Features des und Erfahrungen mit dem "gated" unter UNICOS 7.0 am ZIB.* Arbeitskreis UNICOS, Hannover
- 29.10.93** *Erlebnisse mit dem UNICOS 8.0 Betatest im ZIB.* Arbeitskreis UNICOS, Stuttgart

W. Dalitz

- 15.06.93** *Eine Auswahl von Internet-Diensten.* 3. Workshop des DMV-Projekts "Fachinformation", 15./17.06.93, ZIB-Berlin

13.12.93 *Der WAIS-Server am ZIB. Workshop: Die Zukunft elektronischer Fachinformation insbesondere in der Mathematik*, 13./15.12.93, ZIB-Berlin und Rathaus Schöneberg

P. Deuffhard

04.01.93 *Adaptive Discrete Galerkin Methods for Countable ODE Systems*. SCADE'93-Tagung, Auckland/New Zealand

08.01.93 *Adaptive Discrete Galerkin Methods for Macromolecular Processes*. Tagung "Advances in Computational Mathematics", New Delhi/India

02.07.93 *The Cascade Principle - Simultaneous Adaptive Multilevel Discretization and Iterative Solution of Partial Differential Equations*. International Meeting "Linear/Nonlinear Iterative Methods and Verification of Solution", University of Electro-Communications, Tokyo/Japan

05.07.93 *Adaptive Multilevel Finite Element Methods for Medical and Technological Applications*. Institute of Statistical Mathematics, Tokyo/Japan

08.07.93 *The Cascade Principle - Simultaneous Adaptive Multilevel Discretization and Iterative Solution of Partial Differential Equations*. International Meeting "Linear/Nonlinear Iterative Methods and Verification of Solution", Matsuyama/Japan

23.09.93 *Algorithmen zur effizienten Simulation von Verbrennungsproblemen*. TU Hamburg-Harburg

13.10.93 *Cascadic Conjugate Gradient Methods for Elliptic PDEs*. Tagung "Adaptive Methoden für partielle Differentialgleichungen", Oberwolfach

25.10.93 *Cascadic Conjugate Gradient Methods for Elliptic PDEs*. Courant Institute, New York/USA

27.10.93 *Cascadic Conjugate Gradient Methods for Elliptic PDEs*. 7th International Conference on "Domain Decomposition Methods", PennState, University Park/USA

16.11.93 *CCG-Methoden für partielle Differentialgleichungen*. Firma Siemens, Erlangen

04.12.93 *Mathematik und Ingenieurwissenschaften - ein fruchtbares Feld*. Tagung Ingenieurschule Biel, Biel/Schweiz

C. Ferreira

01.04.93 *“Multiple knapsack problems”*
DIMACS, Rutgers University, New Jersey/USA

A. Fischer

14.09.93 *Adaptive Multilevel Finite Element Methods for the Kirchhoff Plate.*
10th Conference on “Problems and Methods in Mathematical Physics”,
Chemnitz

H.-H. Frese

13.01.93 *Visualisierung und wissenschaftliches Rechnen.* Multimedia Forum,
Humboldt-Universität zu Berlin

01.04.93 *Remote Job Entry Tool.* Cray User Group Conference Spring '93 in
Montreux/Schweiz

K. Gatermann

15.2/15.3.93 *Dynamical Systems Year – Gastaufenthalt am Fields Institute,*
Waterloo/Kanada

22./28.2.93 *Numeric of Symmetry Breaking and Mode Interaction.* Workshop
on Symmetry Breaking in PDE, The Fields Institute, Waterloo/Kanada

4.5.93 *Steady-State Steady-State Mode Interaction mit verschiedenen Symmetrien.* Gemeinsames Oberseminar “Nichtlineare Dynamik” veranstaltet vom
ZIB, IAAS und FU Berlin

20.8.93 *Verzweigungsprobleme mit Symmetrie.* Algebraische Methoden in der
Numerik. Universität Potsdam

11.10.93 *Automatic classification of normal forms.* University Twente,
Enschede/Niederlande

22.11.93 *Mode interaction with various symmetries.* Max-Planck-Institut für
Extraterrestische Physik – Arbeitsgruppe Nichtlineare Dynamik, Potsdam

29.11.93 *Computeralgebra und Verzweigungsprobleme mit Symmetrie.* Institut
für Angewandte Mathematik, Universität Hamburg

3./9.9.93 *Automatic classification of normal forms.* International Conference
of the European Bifurcation Theory Group: Dynamics, Bifurcation and
Symmetries, new trends and new tools. Cargese/Korsika

J. Gottschewski

- 16.09.93 *Aspects of Supercomputing in Northern Germany.* NEC, Tokyo/Japan
17.09.93 *ZIB and Supercomputing in Northern Germany.* Fujitsu, Numasu/Japan
24.09.93 *The Berlin Konrad Zuse Research Center: Synthesis of Research and Service.* University of Osaka, Japan

M. Grötschel

- 22.01.93 *Packing Steiner Trees.* Oberwolfach–Tagung über “Combinatorial Optimization”, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach
15.03.93 *Mathematik in Industrie und Wirtschaft.* Tagung “Mathematik in Industrie und Wirtschaft” an der Universität zu Köln, Köln
02.04.93 *Packing Steiner Trees: Motivation and Some Polyhedral Results.* DIMACS Workshop “Solving Hard Combinatorial Optimization Problems”, Rutgers University, New Brunswick, New Jersey/USA
12.04.93 *Entwurf und Optimierung von Netzwerken.* GAMM–Jahrestagung 1993 an der Technischen Universität Dresden
15.06.93 *Elektronische Fachinformation im Umbruch — die Situation aus der Sicht der Mathematik.* 3. Workshop des DMV-Projekts “Fachinformation” am Konrad–Zuse–Zentrum für Informationstechnik, Berlin
02.10.93 *Optimization Aspects of Public Transportation.* International Joint Mathematics Meeting der American Mathematical Society (AMS) und der Deutschen Mathematiker Vereinigung (DMV), Heidelberg
25.10.93 *Computerentwurf und –fertigung: Beiträge der diskreten Mathematik.* Symposium “Mathematik in der Produktionstechnik” des Arbeitskreises Mathematik in Forschung und Praxis, Bad Honnef
29.10.93 *Optimizing Production Management.* Minisymposium der New York University über “Optimization”, New York/USA
01.11.93 *Switchbox Routing by Cutting Planes.* ORSA/TIMS–Meeting Phönix, Arizona/USA
15.11.93 *The Polyhedral Approach to Combinatorial Optimization: Basic Ideas.* Escuela de Matematica Aplicada del Grupo Montevideo “Optimizacion y Sistemas Dinamicos”, Universidad Nacional de Buenos Aires, Buenos Aires/Argentinien

16.11.93 *The Polyhedral Approach to Combinatorial Optimization: Proof Techniques.* Escuela de Matematica Aplicada del Grupo Montevideo "Optimizacion y Sistemas Dinamicos", Universidad Nacional de Buenos Aires, Argentinien

17.11.93 *The Polyhedral Approach to Combinatorial Optimization: Typical Results.* Escuela de Matematica Aplicada del Grupo Montevideo "Optimizacion y Sistemas Dinamicos", Universidad Nacional de Buenos Aires, Buenos Aires/Argentinien

18.11.93 *Cutting Plane Methods.* Escuela de Matematica Aplicada del Grupo Montevideo "Optimizacion y Sistemas Dinamicos", Universidad Nacional de Buenos Aires, Buenos Aires/Argentinien

19.11.93 *Design of Survivable Communication Networks.* Escuela de Matematica Aplicada del Grupo Montevideo "Optimizacion y Sistemas Dinamicos", Universidad Nacional de Buenos Aires, Buenos Aires/Argentinien

23.11.93 *Discrete Mathematics in Computer Manufacturing: Solving Large-Scale Problems in Practice.* Universidad Nacional de Rosario, Rosario/Argentinien

03.12.93 *Discrete Mathematics in Manufacturing.* Athens University of Economics, Athen/Griechenland

03.12.93 *Current Trends in German Mathematics.* Athens University of Economics, Athen/Griechenland

14.12.93 *Neue Perspektiven eines verteilten Informationssystems für die Mathematik.* Workshop: Die Zukunft elektronische Fachinformation insbesondere in der Mathematik, 13./15.12.93, ZIB-Berlin und Rathaus Schöneberg

N. Gröwe

16.06.93 *Planning of electricity production under stochastic uncertainty.* GAMM/IFIP Workshop on Stochastic Optimization, Neubiberg/München

08.09.93 *Nonparametric estimators in chance-constrained programs.* Fifth Prague Symposium on Asymptotic Statistics, Prag/Tschechische Republik

19.10.93 *Mathematische Modelle zur Brennstoffkostenoptimierung in Braunkohlekraftwerken.* XXV. Kraftwerkstechnisches Kolloquium, Institut für Energietechnik der TU Dresden.

H.Ch. Hege

- 06.03.93** *Rendering auf massiv-parallelen Rechnern mit verteiltem Speicher.* Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung, Visualisierungslabor, Birlinghoven – St. Augustin
- 08.06.93** *Volume Rendering: Methoden und Parallelisierung.* Workshop “Paralleles Pre- und Postprocessing“, Technische Universität Chemnitz-Zwickau
- 10.08.93** *Research Topics and Prospects in Volume Rendering.* Santa Barbara Studios, Santa Barbara, CA/USA
- 28.09.93** *Computational Geometry Questions in Hyperthermia Treatment Planning.* Seminar “Algorithmische Geometrie“, Freie Universität Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik
- 30.09.93** *Evaluation aktueller Parallelrechner-Architekturen.* Humboldt Universität zu Berlin, Rechenzentrum
- 26.12.93** *Soft- und Hardware zur Visualisierung numerischer Simulationsergebnisse.* Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (IAAS), Berlin

C. Jarst

- 26.04.93** *Berliner Software-Entwicklungs- und Testumgebung BERSET.* Konrad-Zuse-Zentrum Berlin

R. Kornhuber

- 22./24.01.93** *On Adaptive Multilevel Methods for Obstacle Problems in 3 Space Dimensions.* 8. GAMM-Seminar on “Adaptive Methods“, Kiel
- 31.1./6.02.93** *On Adaptive Multilevel Methods for Elliptic Problems.* Workshop on “Asymptotics and Adaptivity in Computational Mechanics“, Oberwolfach
- 01.04.93** *On Adaptive Multilevel Methods for Variational Inequalities in 3 Space Dimensions.* Institut für Angewandte Analysis und Stochastik, Berlin
- 7./9.06.93** *Multilevel Methoden und Gittergenerierung.* Workshop on “Paralleles Pre- und Postprocessing“, TU Chemnitz-Zwickau
- 10./16.10.93** *Monotone Multigrid Methods for Variational Inequalities.* Tagung über “Adaptive Methoden für partielle Differentialgleichungen“, Oberwolfach
- 25.10.93** *Monotone Multigrid Methods for Variational Inequalities.* Courant Institute, New York/USA

27./30.10.93 *A Posteriori Error Estimates for Elliptic Problems in Two and Three Space Dimensions.* 7. International Conference on Domain Decomposition in Science and Engineering, Pennsylvania State University/USA

J. Lang

29.9./1.10.93 *An Adaptive Rothe Method for Nonlinear Reaction-Diffusion-Systems.* Fifth International Conference on Numerical Combustion, Garmisch-Partenkirchen

A. Loebel

02.04.1993 *Ein Multicommodity-Flow-Ansatz für Schedulingprobleme.* Berichtskolloquium des DFG-Schwerpunktes "Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung", Suhl/Thüringen.

J. Lügger

17.06.93 *Ein Spaziergang durch das Internet.* 3. Workshop des DMV-Projekts "Fachinformation", 15./17.06.93, ZIB-Berlin

02.09.93 *OPT-NET: A Communication Facility for the "Fachgruppe Optimierung" of the DMV.* 18. Symposium on Operations Research, 1./3.09.93, University of Cologne

A. Martin

02.04.93 *Steiner tree packing II.* DIMACS Workshop "Solving Hard Combinatorial Optimization Problems", Rutgers University, New Jersey/USA

01.05.93 *Routing in grid graphs by cutting planes.* Conference on "Integer Programming and Combinatorial Optimization (IPCO3)", Erice, Sizilien/Italien

05.10.93 *The Steiner tree packing problem in VLSI design.* Conference "Network Optimization: Theory and Practice (NETFLOW93)", San Miniato/Italien

01.11.93 *Separation algorithms for the Steiner tree packing problem.* TIMS/ORSA 36th Joint National Meeting, Phoenix, Arizona/USA

H. Melenk

12.01.93 *Algebraische Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme unter besonderer Berücksichtigung von Parallelrechnern.* Seminar der Gruppe Computeralgebra, GMD Birlinghoven

14.06.93 *Automatic Solution of Nonlinear Equation Systems in REDUCE*. International IMACS Symposium on Symbolic Computation, Lille/Frankreich

21.12.93 *Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme*. Crashkurs "Computeralgebra", Graduiertenkolleg der Universität zu Köln.

U. Nowak

13.01.93 *Extrapolationsverfahren für steife Differentialgleichungen und differentiell-algebraische Systeme*. IAAS-Seminar, Berlin

11.03.93 *Numerische Simulation großer chemischer Reaktionssysteme und Identifikation ausgewählter Parameter*. IAAS-Kolloquium, Berlin

25.03.93 *Steife Extrapolationsverfahren für semi-diskrete Systeme von 2D-parabolischen Gleichungen*. Seminar, Institut für Chemische Verfahrenstechnik, Stuttgart

19.11.93 *Extrapolation techniques in large chemistry and adaptive methods of lines*. Workshop "On the numerical treatment of the chemical part of large air pollution models", Roskilde/Dänemark

O. Paetsch

14.10.93 *Visualization of Hyperthermia Simulations using GRAPE*. Seminar on "Visualization in Continuum Mechanics", Universität Freiburg

F. Schmidt

1./2.04.93 *Discrete Transparent Boundary Condition for Fresnel's Equation Based on a Recurrence Algorithm*. COST 240 Workshop, Leidschendam/Niederlande

R. Schulz

03.10.93 *Stability in Stochastic Programming*. DMV-AMS Fachtagung, Heidelberg

25.10.93 *Mathematische Methoden zur optimalen Lastverteilung im Innertagesbereich*. Symposium des Arbeitskreises "Mathematik in Forschung und Praxis", Bad Honnef

S. Schulz

19.01.93 *Der Fair Share Scheduler: Erste Erfahrungen seines Einsatzes auf der Cray X-MP.* Konrad-Zuse-Zentrum Berlin

07.05.93 *Erfahrungen mit dem Fair Share Scheduler unter UNICOS 7.0 am ZIB.* Arbeitskreis UNICOS, Hannover

M. Seebass

12.02.93 *3D-Simulation von Hyperthermie-Behandlungen.* GAMM-Workshop "Scientific Computing in der Medizin", Essen

02.03.93 *3D-Gittergenerierung für Hyperthermie-Simulationen.* Gittergenerierungstag am IAAS, Berlin

23.10.93 *Perspektiven der Hyperthermie-Therapieplanung.* Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Medizinische Physik, Erlangen

W. Sperber

15.06.93 *Zum Stand des DMV-Projektes "Fachinformation" aus der Sicht des Projektmanagers.* 3. Workshop des DMV-Projekts "Fachinformation", 15./17.06.93, ZIB-Berlin

06.10.93 *Internet Dienste und Informationssysteme.* 6. Erfahrungsaustausch des NED-Projekts, 5./6.10.93, Jena

17.10.93 *WTI 2000 in der Mathematik – die Vision.* 2. Fortbildungstreffen im DPG-Projekt, 17.10.93, Karlsruhe

3./17.11.93 *Das Internet – Wirkprinzipien und Dienste.* Institut für Information und Dokumentation, Fachhochschule Potsdam

Th. Steinke

06.05.93 *Computersimulation in der Chemie.* LIT-Kongress, Berlin

M. Stoer

18./22.1.93 *A survivable network design problem involving multicommodity flows.* Tagung über "Kombinatorik", Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

17.03.93 *Planung von ausfallsicheren Netzwerken.* DMV-Tagung "Mathematik in Industrie und Wirtschaft", Universität zu Köln

29.3/2.4.93 *Survivable networks of high connectivity.* DIMACS Workshop "Solving Hard Combinatorial Optimization Problems", DIMACS Center, Rutgers University, New Brunswick, New Jersey/USA

05.04.93 *A survivable network design problem involving multicommodity flows.* Bell Communications Research, Morristown, New Jersey/USA

18.05.93 *Design of survivable networks.* TIMS/ORSA Joint National Meeting, Chicago/USA

30.11.93 *Das Leibniz System zum Lösen logischer Systeme.* Seminar über Kombinatorische Optimierung, ZIB

R. Weismantel

08.01.93 *Some Integer Programs Arising In The Design of Main Frame Computers.* Symposium on Applied Mathematical Programming and Modeling, Budapest/Ungarn

01.04.93 *The Multidimensional Knapsack Problem.* DIMACS Workshop "Hard Combinatorial Optimization Problems", New Brunswick/USA

21.05.93 *On the Node Capacitated Graph Partitioning Problem.* Conference "Solving Hard and Complex Combinatorial Optimization Problems", Schloß Dagstuhl

01.11.93 *Packing Steiner Trees: Polyhedral Investigations.* Conference "ORSA-TIMS joint national meeting", Phoenix, Arizona/USA

R. Wunderling

17.11.93 *On the Impact of Communication Latencies on Parallel Sparse LU decomposition.* DIMACS Workshop on "Parallel Algorithms: From Solving Combinatorial Problems to Solving Grand Challenge Problems", Rutgers University, New Jersey/USA

G.M. Ziegler

11.01.93 *Topologie und Kombinatorik von Unterraum-Arrangements.* Ruhr-Universität Bochum

21.01.93 *Constructing the Permuto-Associahedron.* Conference on "Combinatorial Optimization"
Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

8./10.2.93 *Three lectures: Recent Progress on Polytopes.*
"Seminaire Lotharingien", Hesselberg (Franken)

- 23./25.03.93** Drei Vorträge: *Kombinatorik und Geometrie von Polytopen*. Workshop "Volumen und Durchmesser von Polytopen", Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach
- 01.04.93** *Constructing the Permuto-Associahedron*. Conference on "Combinatorial Convexity and Algebraic Geometry", Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach
- 13.04.93** *Kombinatorik und Topologie von Unterraum-Arrangements*. Kolloquium, Mathematisches Seminar der Universität Hamburg
- 14.04.93** *Faser-Polytope*. Studenten-Kolloquium, Mathematisches Seminar der Universität Hamburg
- 13.05.93** *Coxeter-Associahedra*. Conference "Jerusalem Combinatorics", The Hebrew University of Jerusalem/Israel
- 24.05.93, 07.06.1993 und 14.06.1993** "*Polytope*". Graduiertenkolleg "Algorithmische Diskrete Mathematik", Berlin
- 26.06.93** *Two problems on polytopes*. Conference on "Konvexgeometrie", Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach
- 12.07.93** *Prescribing faces and shellings of polytopes*. "6th Franco-Japanese Days on Combinatorics, Optimization and Discrete Geometry", École Normale Supérieure, Paris/Frankreich
- 20.08.93** *Konstruktionen und Schälungen für Polytope*. Institut für Informatik, Universität zu Köln
- 31.08.93** *Coxeter-Associahedra*. NATO Advances Study Institute "POLYTOPES: Abstract, Convex and Computational", Toronto/Kanada
- 07.11.93** *Permuto-Assoziaeder: Konstruktion von Polytopen mit vorgegebener Struktur*. Mathematisches Institut A, Universität Stuttgart

8.2 Vorlesungen und Seminare

P. Deuffhard, K. Gatermann, A. Hohmann: FU Berlin

WS 93/94 Numerik dynamischer Systeme (Seminar)

K. Gatermann: FU Berlin

SS 93 Lineare Darstellungstheorie und symbolisches Rechnen (Vorlesung)

M. Grötschel: TU Berlin

WS 92/93 Kombinatorische Optimierung (Vorlesung)

WS 92/93 Innere-Punkte-Methoden der Linearen Optimierung (Seminar)

SS 93 Schnittebenenverfahren und polyedrische Kombinatorik (Vorlesung)

SS 93 Set Packing, Partitioning und Covering (Seminar)

W. Koepf: FU Berlin

SS 93 Analysis III (Vorlesung)

WS 93/94 Spezielle Funktionen der Analysis in Computeralgebrasystemen (Seminar)

M. Stolle: FU Berlin

SS 93 UNIX-Einführung (Kurs)

SS 93 File-Service mit UniTree (Kurs)

R. Wesel: FU Berlin

WS 92/93 FU-Netz: Stand der Planung (Kolloquium)

SS 93 Stand des Netzausbaus, Probleme im Netz, neue Netz-Hardware (Kolloquium)

G.M. Ziegler: TU Berlin

WS 92/93 Polytope (Vorlesung)

SS 93 Zahlentheoretische Methoden der ganzzahligen Optimierung (Vorlesung)

WS 93/94 Geometrische Algorithmen der linearen Optimierung (Vorlesung)

8.3 Mitveranstalter von auswärtigen Tagungen

M. Grötschel

17.–23.01.93 Oberwolfach-Tagung über "Combinatorial Optimization",
Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

17.–21.05.93 Tagung “Algorithmic Approaches to Large and Complex Combinatorial Optimization Problems” des Twinning-Projektes, Schloß Dagstuhl, Dagstuhl

G.M. Ziegler

22–26.03.93 Oberwolfach-Workshop “Volumen und Durchmesser von Polytopen”, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

21.05.93 “Euler-Vorlesung in Sanssouci” und “Berliner Mathematisches Kolloquium” (Gemeinsame Veranstaltung der Mathematischen Institute in Berlin und Potsdam)

9 Gäste am ZIB

9.1 Gastvorträge

- 14.01.93 Prof. Dr. Laszlo Lovász (Eötvös Lorand Universität, Budapest, Princeton University, Princeton, USA):
Cycle lattices of binary matroids and Reed-Mueller codes.
- 19.01.93 Prof. Dr. Bodo Werner (Universität Hamburg): *Die Verwendung von geränderten Jacobi-Matrizen für eine numerische Verzweigungsanalyse.*
- 20.01.93 Franziska Schöbel (Universität Leipzig): *The Symbolic Classification of Real Four-Dimensional Lie Algebra.*
- 20.01.93 Carsten Schöbel (Universität Leipzig): *On the Classification of Real n -Dimensional Lie Algebras L with a 1- or 2-Dimensional Derived Algebra $L^{(1)}$.*
- 02.02.93 Dr. Dr. Jürgen Richter-Gebert (TELEKOM, Darmstadt):
Automatisches Beweisen geometrischer Sätze.
- 24.02.93 Dr. J. Diemer, Dr. J. Kienhöfer (Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH):
Programmiertechniken für parallele Anwendungen.
- 09.03.93 Dipl.-Math. Peter Bastian (Universität Heidelberg): *Eine flexible Softwareumgebung für adaptive Mehrgitterverfahren.*
- 23.03.93 Prof. Dr. Adolf Schreiner (Universität Karlsruhe):
Software - Eine Herausforderung auch der Hochschulen.
- 05.04.93 Dr. Cid de Souza (Université Catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgien):
Path Block Cycle inequality for the Equipartition Polytope.
- 05.04.93 Prof. Dr. Laurence Wolsey (Université Catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgien):
More on Lot-Sizing Polyhedra.
- 06.04.93 Prof. Dr. Louis Billera (Cornell University, Ithaca, USA):
The asymmetric travelling salesman polytope as a polytope of permutations.
- 18.05.93 Prof. Dr. Raoul Bott (Harvard University, Cambridge, USA):
"Euler-Vorlesung 1993" On Invariants of Manifolds.
- 18.05.93 Prof. Dr. Karl-Heinz Hoffmann (TU München): *Mathematische Modellbildung und Analysis zur Supraleitung.*

- 24.05.93 Prof. Dr. Horst Martini (Universität Chemnitz):
Zonotope und verwandte Körperklassen.
- 25.05.93 Klaus Birken (Universität Stuttgart): *Ein Parallelisierungskonzept für adaptive numerische Berechnungen.*
- 07.06.93 Prof. Dr. Uwe Zimmermann (TU Universität Braunschweig):
Schranken für die Gammafunktion mit Anwendungen auf 0 – 1 Permanente und max-Konvolutionen.
- 15.06.93 Jan Verschelde (Universität Leuven, Belgien): *Solving Polynomial Systems by Homotopy Continuation Methods.*
- 18.06.93 Dr. Peter Schröder (Princeton University, USA): *Wavelet Radiosity.*
- 21.06.93 Prof. Dr. Gerard Cornuéjols (Carnegie–Mellon University, Pittsburgh, USA):
Balanced Matrices.
- 21.06.93 Dr. Bernd Sturmfels (Cornell University, Ithaca, USA):
Gröbner Basen, Random Walks und ganzzahlige Optimierung.
- 22.06.93 Prof. Dr. Gerard Cornuéjols (Carnegie–Mellon University, Pittsburgh, USA):
Recognizing Balanced Matrices.
- 22.06.93 Prof. Dr. Uri Ascher (University of BC, Vancouver, Canada): *Computational Methods for the Shape from Shading Problem.*
- 24.06.93 Prof. Dr. Dietrich Braess (Universität Bochum): *Finite-Elemente-Methoden für Platten bei Kirchhoff- und Reissner-Modellen.*
- 28.06.93 Prof. Dr. H.P. Dikshit (Universität New Delhi, India): *Computing and Mapping Properties of Wachspress Finite Elements.*
- 28.06.93 Prof. Dr. Ernst Rank (Universität Dortmund): *Multiskalen-Probleme mit der hp-Version bei Finite-Elemente-Methoden.*
- 28.06.93 Steve Frank (Kendall Square Research, Inc., Boston): *Allcache: The Future of Parallel Processing.*
- 05.07.93 Prof. Dr. Manfred Padberg (New York University, New York, USA):
Order Preserving assignments.
- 06.07.93 Prof. Dr. Albert Fässler (Ingenieurschule HTL, Biel, Schweiz): *Blockstruktur von Matrizen und Numerische Methoden für Partielle Ableitungen.*

- 09.07.93 Prof. Dr. Donald E. Knuth (Stanford University, Stanford, USA):
 "Berliner Mathematisches Kolloquium" *The Birth of A Giant Component.*
- 27.07.93 Prof. Dr. Donald E. Knuth (Stanford University, Stanford, USA):
Fun with the Stanford Graph Base: A Platform for Combinatorial Computing.
- 10.08.93 Dr. S.V. Nepomnyaschikh (z.Zt. IAAS, Berlin): *Fictitious Domain Methods and Explicit Extension Operators.*
- 12.08.93 Dr. Thomas Wolf (Queen Mary & Westfield College, University of London):
Zur exakten Lösung von Differentialgleichungen mit Computeralgebra.
- 17.08.93 Andrew Bettison (Software Pty, Ltd., Australien): *Prinzipien des Fair Share Schedulers unter Unix.*
- 26.08.93 Andreas Ernst (University of West Australia, Perth, Australien):
Der ASG-Algorithmus und Variationen.
- 26.08.93 Marc-Oliver Padberg (New York University, New York, USA):
Ein Schnittebenenverfahren zur Lösung von Block Design Problemen.
- 31.08.93 Dr. Ulrich Maas (Universität Stuttgart): *Automatische Reduktion von Reaktionsmechanismen zur Simulation reaktiver Strömungen.*
- 06.09.93 Karin Tschirpke (Friedrich-Schiller-Universität Jena):
Orthoschemzerlegungen fünfdimensionaler Simplexe in Räumen konstanter Krümmung.
- 28.09.93 Dr. Terence Parr (z.Zt. TU Dresden): *Language Translation Tools and Their Role in Scientific Computing.*
- 18.10.93 Prof. Dr. V. Shaidurov (Krasnoyarsk/Russia): *Multilevel Algorithms for the hp-Version of the Finite Element Method.*
- 08.11.93 Dr. Michael Dellnitz (Universität Hamburg): *Detektion und Berechnungen von Übergängen im symmetrischen Chaos.*
- 08.11.93 Dr. Mathias Prokop (Medizinische Hochschule Hannover): *Anwendungsmöglichkeiten von 3D-Visualisierungsverfahren.*
- 30.11.93 Prof. Dr. Shmuel Onn (Faculty of Industrial Engineering, Technion, Haifa, Israel):
On lattice polytopes, their width and diameter.
- 01.12.93 Prof. Dr. Geir Dahl (Norwegian Telecom, Research Department, Kjeller, Norwegen):
An Optimization Problem in Mobile Communication Networks.

9.2 Gastaufenthalte

Atef Abdel-Aziz Abdel-Hamid (Universität Kairo, Kairo, Ägypten)

vom 01.08.91 — 30.04.94

(DAAD-Stipendiat)

Prof. Dr. Michael Deza (LIENS – Ecole Normale Supérieure, Paris, Frankreich)

23.01.93 — 29.01.93

(Gast des ZIB)

Prof. Dr. Michael Deza (LIENS – Ecole Normale Supérieure, Paris, Frankreich)

26.06.93 — 02.07.93

(DFG-Förderung)

Prof. Dr. Michael Deza (LIENS – Ecole Normale Supérieure, Paris, Frankreich)

04.12.93 — 10.12.93

(DFG-Förderung)

Carlos Ferreira (Universität São Paulo, São Paulo, Brasilien)

01.08.91 — 30.06.93 — 20.02.94

(DAAD-Stipendiat)

Dr. Monique Laurent (LIENS – Ecole Normale Supérieure, Paris, Frankreich)

23.01.93 — 29.01.93

(Gast des ZIB)

Dr. Monique Laurent (LIENS – Ecole Normale Supérieure, Paris, Frankreich)

25.04. — 30.04.93

(DFG-Förderung)

Dr. Monique Laurent (LIENS – Ecole Normale Supérieure, Paris, Frankreich)

27.06. — 02.07.93

(DFG-Förderung)

Dr. Monique Laurent (LIENS – Ecole Normale Supérieure, Paris, Frankreich)

05.12. — 10.12.93

(DFG-Förderung)

Wladimir Nogueira dos Santos (Universität São Paulo, São Paulo, Brasilien)

01.10.93 — 31.12.93

(IAESTE-Stipendiat, Gast des ZIB)

Prof. Dr. Shmuel Onn (Faculty of Industrial Engineering, Technion, Haifa/Israel)

28.11.93 — 01.12.93

(Gast des ZIB)

Marc-Oliver Padberg (New York University, New York/USA)

01.06.93 — 31.08.93

(Praktikant)

Dr. Dr. Richter-Gebert (Roßdorf)

24.01.93 — 20.02.93

(Gast des ZIB, DFG-Förderung)

Franziska Schöbel (Universität Leipzig)

vom 13.01.93 — 27.01.93

(Preisträgerin, 2. Studenten-Konferenz in Mathematik)

Carsten Schöbel (Universität Leipzig)

vom 13.01.93 — 27.01.93

(Preisträger, 2. Studenten-Konferenz in Mathematik)

Prof. Dr. Adolf Schreiner (Universität Karlsruhe)

vom 23.03.93 — 24.03.93

(Gast des ZIB)

Dr. Cid de Souza (Université Catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgien)

03.04.93 — 08.04.93

(EG-Twinning-Projekt)

Dr. Cid de Souza (Université Catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgien)

22.11.93 — 25.11.93

(EG-Twinning-Projekt)

Prof. Dr. Bernd Sturmfels (Cornell University, Ithaca/USA)

vom 05.06.93 — 03.07.93

(Gast des ZIB, DFG-Förderung)

Dennis Sullivan, Ph.D. (University of Idaho, USA)

21.06.93 — 11.08.93

(DFG-Hyperthermie-Projekt)

Prof. Dr. Laurence Wolsey (Université Catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgien)

03.04.93 — 08.04.93

(EG-Twinning-Projekt)

Prof. Dr. Laurence Wolsey (Université Catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgien)

22.11.93 — 25.11.93

(EG-Twinning-Projekt)

Dr. Alexey Zharkov (Saratov University, Russia)

vom 19.10.93 — 26.10.93

(Gast des ZIB)

9.3 Tagungen und Veranstaltungen des ZIB

15./17.06.93 3. Workshop des aus Mitteln des BMFT geförderten DMV-Projekts "Fachinformation", ZIB-Berlin

Den inhaltlichen Kern des Workshops bildeten die Analyse und die Diskussion des Stands des Projekts "Fachinformation" der Deutschen Mathematiker-Vereinigung. Es konnte eine erste positive Bilanz gezogen werden: In den ersten 6 Monaten des Projekts wurden in allen Fachbereichen die technischen Voraussetzungen (Geräte und Netzanschlüsse zum Retrieval in den STN-Datenbanken des FIZ Karlsruhe und in der CD-ROM des CompactMath des Springer-Verlages) geschaffen. Der Umfang der Nutzung der Datenbanken durch die am DMV-Projekt teilnehmenden Fachbereiche ist signifikant angestiegen. Folgende Themen standen im Mittelpunkt des Workshops: Der Stand der Nutzung der Datenbanken MATH und CompactMATH, die konzeptionelle Neuorientierung der CD-ROM sowie nutzerfreundliche Konzepte für den Zugang zu Online-Datenbanken. Darüber hinaus wurden seitens des ZIB Internet-Dienste vorgestellt und erste konzeptionelle Ansätze für die weiteren Perspektiven elektronischer Fachinformation in der Mathematik erörtert. Den Workshop rundete eine Schulung des FIZ Karlsruhe zum Retrieval in STN-Datenbanken ab.

10./11.11.93 2. Workshop "Introduction to UniChem" im Konrad-Zuse-Zentrum

13./15.12.93 Die Zukunft elektronischer Fachinformation insbesondere in der Mathematik, 4. Workshop des aus Mitteln des BMFT geförderten DMV-Projekts "Fachinformation", ZIB-Berlin und Rathaus Schöneberg

Der 4. Workshop des Projekts war thematisch ausschließlich den möglichen Perspektiven und Konzeptionen der elektronischen Fachinformation in der Mathematik gewidmet. Im Mittelpunkt des Workshops stand die Vorstellung des Konzepts eines "Verteilten Informationssystems in der Mathematik". Ausgangspunkt für dieses von der Deutschen Mathematiker-Vereinigung geplante Vorhaben ist die

Tatsache, daß elektronische Fachinformation wesentlich mehr umfaßt als die Suche nach Referaten und nach bibliographischen Referenzen. Zum einen sind in den bisherigen Datenbanken der Mathematik keine Volltexte erhältlich, zum anderen gibt es eine Informationslücke: Preprints, Vorlesungsskripte u.a. werden im bisherigen System kaum erfaßt. Das verteilte Informationssystem soll einen Beitrag dazu leisten, mathematische Informationen umfassender und schneller verfügbar zu machen: Fachspezifische Informationen wie z.B. Volltexte, Software und Datensammlungen, sollen in den Fachbereichen elektronisch aufbereitet und der mathematischen Gemeinschaft über Internet zur Verfügung gestellt werden. Mit der Entwicklung neuer Informationssysteme im Internet (z.B. Gopher, WAIS und WWW) und dem Ausbau der Netze sind die technischen Voraussetzungen für ein verteiltes Informationssystem gegeben. Auf dem Workshop wurden neben inhaltlichen Aspekten auch die Rahmenbedingungen für ein solches verteiltes Informationssystem diskutiert, insbesondere

- die Entwicklung schneller Datennetze
- die Internet-Tools Gopher, WAIS und WWW
- Datenaustauschformate (TeX, LaTeX und SGML)
- Urheberrechtsschutz und Copyright.

Der Workshop fand mit über 100 Teilnehmern weit über das DMV-Projekt "Fachinformation" hinaus eine große Resonanz. Insbesondere waren neben dem BMFT auch die Informationsversorger der Mathematik (Bibliotheken, Verlage, FIZ Karlsruhe) und die Repräsentanten der Fachinformation anderer Wissenschaftsdisziplinen (Physik, Informatik und Chemie) vertreten.

WS 93/94 Oberseminar: "Nichtlineare Dynamik"

organisiert von Bernold Fiedler (FU Berlin), Klaus Schneider (IAAS), Karin Gattermann, (ZIB). Im WS 93/94 fand das Kolloquium im ZIB statt.

10 Organisatorisches

Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) wurde durch Gesetz über das Zentrum für Informationstechnik (ZInfG) vom 17. Juli 1984 gegründet. Das ZIB ist eine rechtsfähige Anstalt des öffentlichen Rechts mit kaufmännischer Buchführung. Zur Erfüllung seiner Aufgaben erhält das ZIB einen Zuschuß des Landes Berlin, das auch Dienstherr und Arbeitgeber für die Beschäftigten des ZIB ist.

10.1 Organe

Organe des ZIB sind der Verwaltungsrat und der Präsident.

Der Verwaltungsrat setzte sich im Jahre 1993 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Kurt Kutzler, TUB, Vorsitzender -- bis 24.08.1993
Prof. Dr. Dieter Schumann, TUB, Vorsitzender -- ab 25.08.1993
- Prof. Dr. Konrad Seppelt, FUB
- StS Prof. Dr. Erich Thies, Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung
- Reiner Jäck, Senatsverwaltung für Wirtschaft und Technologie
- Prof. Dr. Horst Czichos, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
- Prof. Dr. Erich te Kaat, Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH

Im Jahre 1993 tagte der Verwaltungsrat am 10. Dezember 1993.

Präsident des ZIB ist Prof. Dr. Peter Deuffhard.

Als Vizepräsident amtiert Prof. Dr. Martin Grötschel.

10.2 Satzung

Die vom Verwaltungsrat am 23. Oktober 1992 beschlossene Satzung legt Funktionen und Verfahrensweisen der einzelnen Organe des ZIB fest, definiert die Aufgaben in Forschung und Entwicklung, beschreibt die Dienstleistungsfunktion des Rechenzentrums und regelt die Zusammensetzung und die Aufgabenstellung des Wissenschaftlichen Beirates.

10.3 Wissenschaftlicher Beirat

Aufgabe des Wissenschaftlichen Beirates ist die Beratung des ZIB in wissenschaftlichen und technischen Fragen sowie die Unterstützung und Förderung der

Arbeit des ZIB, insbesondere bei der Herstellung und Aufrechterhaltung von Kooperationen mit Universitäten, Forschungseinrichtungen und der Industrie.

Der Verwaltungsrat hat in seiner Sitzung am 10. Dezember 1993 als Mitglieder des Wissenschaftlichen Beirates bestellt:

Prof. Dr. Thomas Liebling	–	Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne–Ecublens
Prof. Dr. Werner C. Rheinboldt	–	University of Pittsburgh, Pittsburgh
Dr. Joachim Römel	–	Bayer AG, Leverkusen
Manfred Schneider	–	Krone AG, Berlin
Prof. Dr. Dieter Schütt	–	Siemens AG, München
Prof. Dr.–Ing. Konrad Zuse	–	Hünfeld

Der Wissenschaftliche Beirat wird seine Arbeit im Laufe des ersten Halbjahres 1994 aufnehmen.

10.4 Mitgliedschaften

Das ZIB ist Mitglied folgender Organisationen:

1. Berliner Wissenschaftliche Gesellschaft (bis Ende 1993)
2. CRAY User Group
3. DFN
4. DMV
5. Forum für Zukunftsenergien
6. NAG Users Association
7. SIAM

10.5 ZIB–Fellows

Präsident und Vizepräsident vergeben an wenige ausgewählte Wissenschaftler das Konrad–Zuse–Fellowship, in dessen Rahmen im Jahre 1993 die folgenden Projekte bearbeitet wurden:

- Prof. Dr. B. Fiedler (vormals Universität Stuttgart)
Dynamische Systeme

Die Mitgliedschaft als ZIB–Fellow endete zum 01.03.1993 aufgrund des Wechsels von Herrn Fiedler auf eine C4–Professur am Fachbereich Mathematik der Freien Universität Berlin.

- Prof. Dr. R. Hoppe (TU München)
Numerische Lösung freier Randwertprobleme
- Prof. Dr. Chr. Lubich (Universität Würzburg)
Mehrkörpersysteme
- Dr. E. Schrüfer (GMD Bonn)
I. Symbolisch-numerische Algorithmen
II. Parallele Symbolik
Die Mitgliedschaft wurde zum 31.12.1993 beendet.
- Prof. Dr. J. Weyer (Universität zu Köln)
AIDS-Ausbreitungsmodelle
Mit der Gründung der Firma Risk endete die Mitgliedschaft im Laufe des Jahres 1993.
- Prof. Dr. G. Wittum (Universität Heidelberg)
Unvollständige LU-Zerlegung auf irregulären Gittern
Durch die Übernahme einer C4-Professur am Institut für Computeranwendungen der Universität Stuttgart endete die Mitgliedschaft mit Ablauf des Jahres 1993.

10.6 Selbstverwaltung

Der Personalrat setzte sich im Jahre 1993 wie folgt zusammen:

Peter Ertmann – Vorsitzender
Detlef Bayer
Dr. Karin Gatermann
Gabriele Kempf
Dr. Robert Weismantel

Vertrauensmann der Schwerbehinderten ist Wolfgang Maibauer.
Frauenvertreterin ist Barbara Märtschütz.

10.7 Wirtschaftliche Situation

Die wirtschaftliche Situation des ZIB zeichnete sich nach wie vor durch eine – in Anbetracht der finanziellen Schwierigkeiten der öffentlichen Hand und der industriellen Kooperationspartner – erfreuliche Kontinuität aus. Reduzierungen des Zuschusses durch den Senat von Berlin konnten durch sparsame Wirtschaftsführung aufgefangen werden. Für die entscheidungsreifen investiven Vorhaben standen die erforderlichen Finanzmittel zur Verfügung. Ohne die Gehälter und Dienstbezüge der planmäßigen Mitarbeiter beliefen sich die Ausgaben im Jahre 1993 auf insgesamt 12.322,4 TDM; davon entfielen auf den konsumtiven Bereich 10.158 TDM und auf Investitionen 2.164,4 TDM.

Das Land Berlin leistete einen Zuschuß von 10.514,4 TDM. Die eigenen Erträge aus Kooperationen und Drittmittelprojekten betrugen im Berichtsjahr 1.808 TDM.

10.8 Personelle Entwicklung

Für die planmäßigen Mitarbeiter (88,5 Stellen, davon 7 Beamten- und 81,5 Angestelltenstellen) waren im Haushaltsplan des Landes Berlin nach Durchschnittssätzen 7.170 TDM ausgewiesen.

Die Zahl der Beschäftigten entwickelte sich – unabhängig von ihrer Finanzierung – wie folgt:

	31.12.92	31.12.93
Leitung	5	5
Wissenschaftliches Personal	48	58
Datenverarbeitung/Technik	30	33
Verwaltung/Bibliothek	16	15
Studentische Hilfskräfte	15	19
Insgesamt	114	130

11 Ansprechpartner

Präsident: Prof. Dr. Peter Deuffhard
Inhaber des Lehrstuhls
Scientific Computing am Fachbereich
Mathematik der Freien Universität Berlin
Tel. (030) 896 04 – 101

Vizepräsident: Prof. Dr. Martin Grötschel
Inhaber des Lehrstuhls
Diskrete Mathematik am Fachbereich
Mathematik der Technischen Universität Berlin
Tel. (030) 896 04 – 210

Numerik:	Peter J. Deuffhard/ Ralf Kornhuber	896 04 – 101 896 04 – 174
Numerische Software- Entwicklung:	Ulrich Nowak	896 04 – 175
Symbolik:	Herbert Melenk	896 04 – 195
Kombinatorische Optimierung:	Martin Grötschel/ Günter M. Ziegler	896 04 – 210 896 04 – 211
Visualisierung und Paralleles Rechnen:	Hans-Christian Hege	896 04 – 141
Software- Information:	Joachim Lügger	896 04 – 173
Rechenzentrum:	Jürgen Gottschewski	896 04 – 130
Vektorrechner:	Hubert Busch	896 04 – 135
Wissenschaftlich- Technische Dienste:	Klaus André	896 04 – 180
Verwaltung:	Henry Thieme	896 04 – 100

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB)

Heilbronner Straße 10, D-10711 Berlin-Wilmersdorf

Telefon: (0 30) 896 04 – 0

Telefax: (0 30) 896 04 – 125

e-mail: Nachname@zib-berlin.de

