

---

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin



# **Jahresbericht 1992**

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Vorbemerkung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Das ZIB – Aufgaben und Ziele</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Forschung und Entwicklung</b>	<b>8</b>
3.1	<b>Zusammenfassung</b> . . . . .	8
3.2	<b>Grundlagenprojekte</b> . . . . .	11
	Adaptive Lösung skalarer Erhaltungssätze in einer Raumdimension . . . . .	11
	Analysis optimaler Vorkonditionierungen elliptischer Randwertprobleme . . . . .	14
	Numerische Pfadverfolgung bei stationären Problemen . . . . .	15
	Numerische Simulation periodischer Prozesse . . . . .	16
	Transparente Randbedingungen für die Schrödingergleichung . . . . .	18
	Adaptive Multilevel–Finite–Elemente–Methoden in drei Raumdimensionen . . . . .	20
	Adaptive Multilevel–Methoden zur Lösung freier Randwertprobleme . . . . .	22
	Glättende Integrationsalgorithmen für Evolutionsprobleme der Quantenchemie . . . . .	24
	Adaptive gewichtete Galerkin–Methoden für Licht–Molekül–Wechselwirkung . . . . .	26
	Entwicklung adaptiver Multilevel–Verfahren zur Berechnung von Reaktions– Diffusionsgleichungen . . . . .	28
	Software–Implementierung adaptiver Multilevel FE–Methoden . . . . .	29
	Extrapolationsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen und differentiell–algebraische Systeme . . . . .	30
	Entwicklung eines Simulationspaketes für makromolekulare Reaktionen einschließ lich chemischer Reaktionskinetik . . . . .	32
	Affin–invariante Newton–Codes für nichtlineare partielle DG . . . . .	33
	Adaptive Linienmethoden für parabolische Systeme in einer Raumdimension . . . . .	34
	Iterative Lösung sehr großer linearer Gleichungssysteme . . . . .	35

Polyedertheoretische Methoden in der kombinatorischen Optimierung . . . . .	36
Verallgemeinerte Zuordnungsprobleme: Untersuchung einiger Spezialfälle . . . . .	39
Polyedertheoretische Untersuchungen zu Set-Partitioning-Problemen . . . . .	40
Mehrfach-Partitionierungsprobleme in Graphen und Hypergraphen . . . . .	41
Ein Multicommodity-Flow-Ansatz für Schedulingprobleme . .	43
Neue Ansätze zur Lösung quadratischer 0/1-Optimierungsprobleme . . . . .	44
Steinerbaumpackungs-Polyeder und Schnittebenen . . . . .	45
Arrangements und Konfigurationen: kombinatorische Analyse topologischer Daten . . . . .	47
Konstruktion und Analyse von Polytopen und Komplexen . .	49
Methoden zur Entwicklung paralleler Programme . . . . .	51
Entwicklung eines parallelen Branch-and-Cut-Frameworks zur Lösung großer kombinatorischer Optimierungsprobleme	52
Weiterentwicklung von REDUCE . . . . .	54
Symbolische Modellierung großer chemischer Reaktionssysteme	55
Symbolische Lösung algebraischer Gleichungssysteme . . . . .	57
Automatische Entwicklung von Funktionen in Taylor- und Laurentreihen . . . . .	58
Gemischt symbolisch-numerische Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme mit Symmetrie . . . . .	59
Symmetriebrechung bei 2-parametrischen Gleichungssystemen .	60
Kalkülsystem für Probleme der Optimalen Steuerung . . . . .	62
Formale Entwicklung analytischer Funktionen in unendliche Laurent-, Puiseux- und Potenzreihen . . . . .	64
Symbolische definite Integration analytischer Funktionen, auch mit unendlichem Integrationsintervall . . . . .	65
<b>3.3 Anwendungsprojekte . . . . .</b>	<b>66</b>
Effiziente numerische Simulation von Verbrennungsprozessen .	66
Numerische Simulation von Relaxationsoszillationen bei Laserprozessen . . . . .	68
Wellenausbreitung in Komponenten der Integrierten Optik . .	70
Simulation von Aufheizprozessen in Hochleistungstransistoren	71

Hyperthermie-Planung . . . . .	72
Adaptive Finite-Elemente-Methoden zur Berechnung von Eigenwerten der Schrödinger-Gleichung in der Quantenchemie . . . . .	74
Lösung von Wärmeleitungsproblemen in der Bauphysik . . . . .	75
Diskrete Galerkin-Methode in der Anwendung . . . . .	76
Simulation und Optimierung von flexiblen Fertigungssystemen	77
Travelling Salesman Probleme mit Nebenbedingungen . . . . .	78
Telebus-Projekt . . . . .	80
Das Clusteringproblem . . . . .	82
Das Verdrahtungsproblem im VLSI-Design . . . . .	83
On-line Optimierung . . . . .	85
Ausfallsichere Telekommunikationsnetzwerke mit hohen Zusammenhangsanforderungen . . . . .	86
Das Platzierungsproblem im VLSI-Design . . . . .	88
MULTISUN – Optimale Kapazitätserweiterung in ausfallsicheren Netzwerken . . . . .	89
SU(3)-Gittereichtheorie-Simulation auf massiv-parallelem Rechnersystem . . . . .	90
Anwendungen der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) . . . . .	92
Entwicklung informationstechnischer Grundlagen für die Museumsdokumentation . . . . .	94
<b>4 Wissenschaftliche Dienstleistungen</b>	<b>95</b>
Berliner Software-Entwicklungs- und Testumgebung BERSET	95
Verteilte Anwendungen im heterogenen Rechnernetz und auf Parallelrechnern . . . . .	97
Zugangssystem RJE Tool für die Berliner Supercomputer . . . . .	98
Verteilte Systeme auf Größtrechnern . . . . .	99
Elektronische Bibliothek eLib für mathematische Software . . . . .	101
Das elektronische Diskussionsforum Opt-Net . . . . .	103
Animation vom Simulationsmodellen . . . . .	104
Paralleles und verteiltes Rechnen . . . . .	105
Visualisierung . . . . .	106
Europäische Normung von LISP . . . . .	109

Technische Basis für symbolisches Rechnen im Hochleistungs-	
bereich . . . . .	109
Numerische Auswertungen in symbolischer Systemumgebung .	110
Einsatz der Informationstechnik im Museum . . . . .	111
<b>5 Rechenzentrum</b>	<b>112</b>
5.1 Aufgaben und Organisation . . . . .	112
5.2 Beteiligung des ZIB an der DV-Landesplanung . . . . .	112
5.3 Ausbau des Landeshöchstleistungsrechners . . . . .	113
5.3.1 Hardware . . . . .	113
5.3.2 Software . . . . .	115
5.4 Nutzung des Landeshöchstleistungsrechners . . . . .	115
5.4.1 Norddeutscher Vektorrechnerverbund (NVV), wechselseitige Rechnernutzung . . . . .	115
5.4.2 Aufschlüsselung nach Partnern . . . . .	117
5.4.3 Projekte mit großem Rechenzeitverbrauch . . . . .	118
5.5 Interne Dienstleistungen des Rechenzentrums . . . . .	121
<b>6 Publikationen</b>	<b>124</b>
6.1 Preprints . . . . .	124
6.2 Technical Reports . . . . .	134
6.3 Beiträge in Zeitschriften . . . . .	137
6.4 Monographien . . . . .	139
Numerische Mathematik I. Eine algorithmisch orientierte Einführung. 2. überarbeitete Auflage. . . . .	139
Numerische Mathematik II. Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen . . . . .	140
Design of Survivable Networks . . . . .	142
6.5 Dissertationen . . . . .	142
6.6 Habilitationen . . . . .	143
6.7 Auszeichnungen . . . . .	143
6.8 Herausgabe von Zeitschriften . . . . .	144
<b>7 Produkte</b>	<b>145</b>
7.1 Fachinformation und Dokumentation . . . . .	145
DMV-Projekt "Fachinformation" . . . . .	145
7.2 Verfügbare Produkte . . . . .	147

7.2.1	CODELIB . . . . .	147
7.2.2	REDUCE/PSL . . . . .	149
7.2.3	GOS . . . . .	149
<b>8</b>	<b>Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern</b>	<b>150</b>
8.1	Vorträge und Gastaufenthalte . . . . .	150
8.2	Vorlesungen und Seminare . . . . .	161
8.3	Mitveranstalter von auswärtigen Tagungen . . . . .	161
<b>9</b>	<b>Gäste am ZIB</b>	<b>163</b>
9.1	Gastvorträge . . . . .	163
9.2	Gastaufenthalte . . . . .	165
9.3	Tagungen und Veranstaltungen im ZIB . . . . .	166
<b>10</b>	<b>Organisatorisches</b>	<b>168</b>
10.1	Organe . . . . .	168
10.2	Satzung . . . . .	169
10.3	Wissenschaftlicher Beirat . . . . .	169
10.4	Mitgliedschaften . . . . .	169
10.5	ZIB-Fellows . . . . .	170
10.6	Selbstverwaltung . . . . .	170
10.7	Wirtschaftliche Situation . . . . .	171
10.8	Personelle Entwicklung . . . . .	171
<b>11</b>	<b>Ansprechpartner</b>	<b>172</b>

# Kapitel 1

## Vorbemerkung

Im Berichtsjahr 1992 arbeitete das Konrad-Zuse-Zentrum zum ersten Mal in seiner jungen Geschichte mit nun stabilisierter Organisationsstruktur. Im Bereich **Forschung und Entwicklung** hat sich wiederum das seit Jahren erfolgreiche Konzept bewährt: anwendungsorientierte mathematische Grundlagenforschung, Entwicklung leistungsfähiger Software, Aufbau schneller Netze für bequemen Zugriff sowie als Ziel die Kooperation mit Anwendern der Natur- und Ingenieurwissenschaften in Hochschule und Industrie gehen dabei eine Synthese ein. Sichtbares Zeichen der Anerkennung von außen war die Auszeichnung von zwei Dissertationen (Herr F. Bornemann, Abteilung *Numerik*; Frau M. Stoer, Abteilung *Kombinatorische Optimierung*). Darüber hinaus haben sich erfreulicherweise im vergangenen Jahr gerade die *Industriekontakte* zügig entwickelt. Da jedoch auch in wichtigen Industriezweigen derzeit an Forschungsfördermitteln gespart wird, können Industriekontakte alleine die Verknappung von Mitteln des Landes Berlin und von staatlichen Drittmitteln keineswegs auffangen – wodurch die Manövrierfähigkeit des ZIB erheblich eingeschränkt ist. Weitere (absehbare) Reduzierungen werden in den kommenden Jahren an die Substanz gehen. Die Einsicht, daß das ZIB dieses Schicksal mit etablierteren Forschungseinrichtungen teilt, tröstet die Mitglieder eines noch im Aufbau befindlichen Institutes nicht ausreichend.

Im Bereich **Rechenzentrum** wurde (endlich) eine abgestimmte Gesamtplanung des Landes für die “Ausstattung der Hochschulen mit Geräten der Informations- und Kommunikationstechnik” erstellt (und im April 1993 vom Senat von Berlin beschlossen). Diese Planung legt fest, daß der Landeshochleistungsrechner für Berlin vom ZIB zu betreiben ist – womit die Rolle des ZIB nun auch in diesem Sektor geklärt ist. Darüber hinaus hat der Verwaltungsrat des ZIB beschlossen, daß künftig ein Gremium von wissenschaftlichen Gutachtern über die Vergabe von Rechenzeit für größere Projekte entscheiden soll – auch dies nach Meinung des ZIB ein im nationalen und internationalen Vergleich längst überfälliger Schritt.

Der Erfolg des ZIB als Ganzem beruht natürlich auf der Aktivität und Originalität aller einzelnen Mitarbeiter und Mitarbeiterinnen des Hauses sowie auf der möglichst reibungsfreien Abstimmung innerhalb der Entscheidungsgremien. Es besteht aller Grund, den eingeschlagenen Weg mit Energie und

Augenmaß fortzusetzen.

Berlin, im Mai 1993

Prof. Dr. Peter Deuffhard  
Präsident

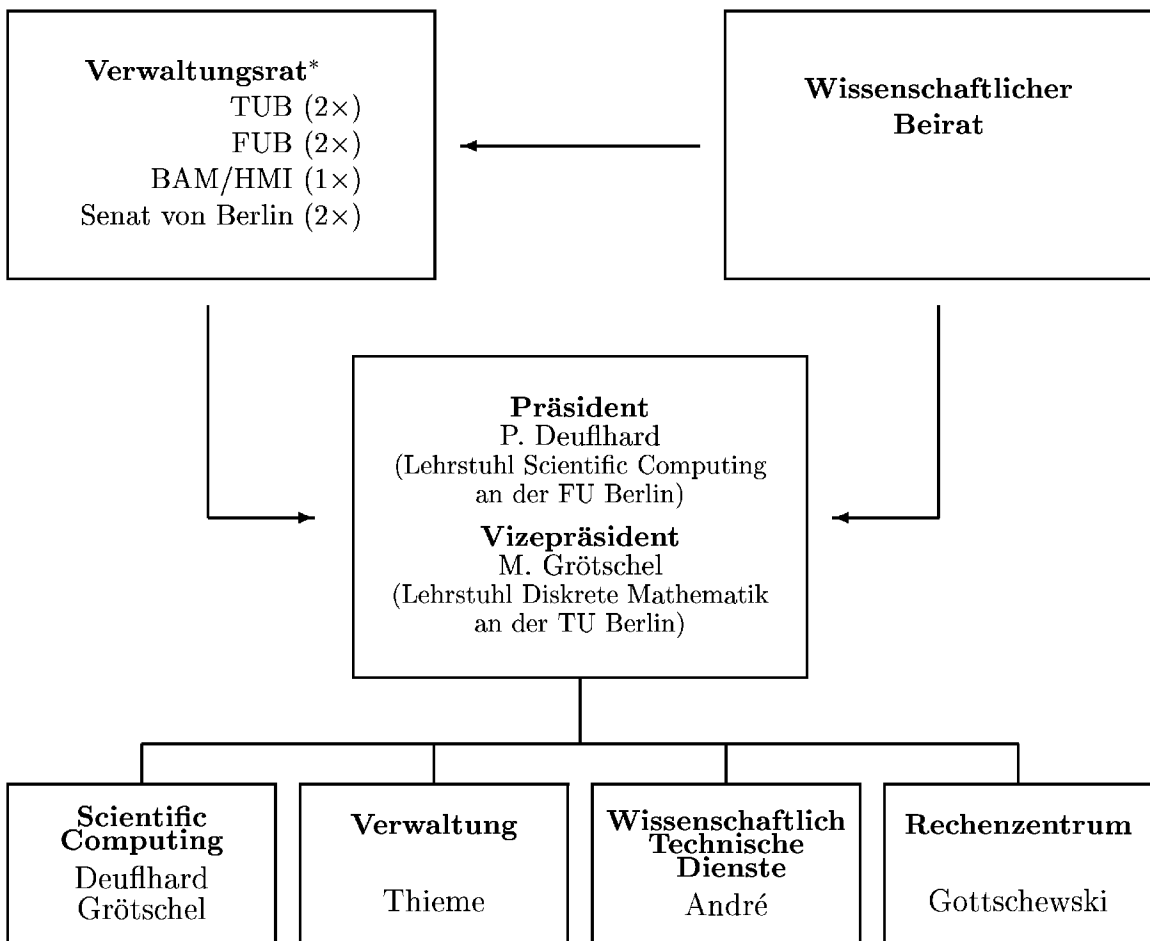


## Kapitel 2

### Das ZIB – Aufgaben und Ziele

Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin ist eine außer-universitäre 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 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.

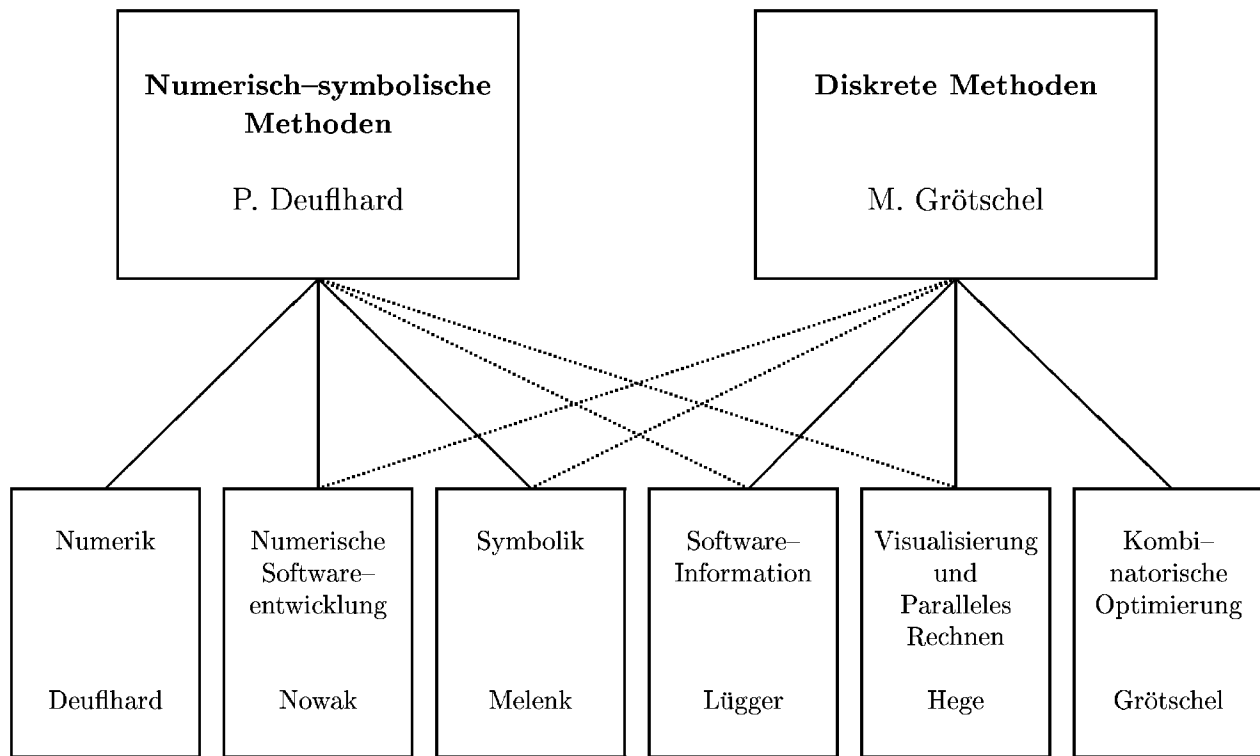
### **Diskrete Methoden**

*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.

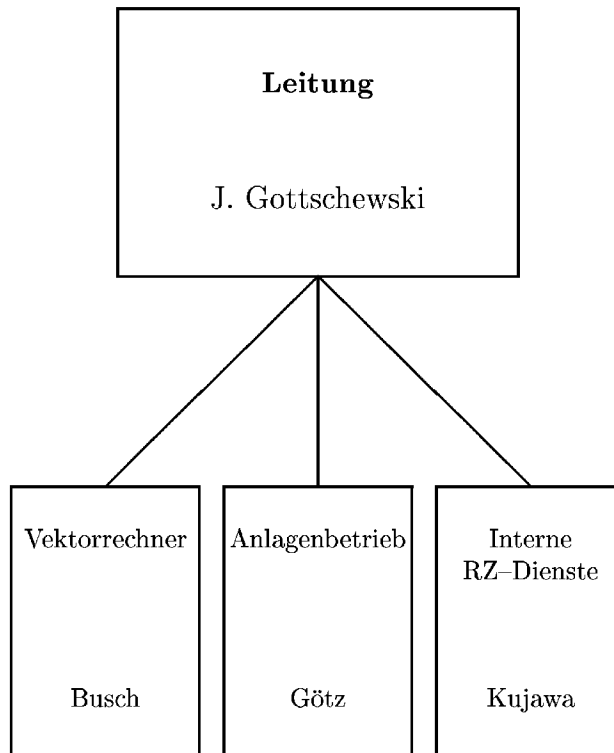
*Abteilung Visualisierung und Paralleles Rechnen.* Aufgabe der Gruppe Visualisierung ist die Entwicklung und Implementierung von Darstellungsmethoden der wissenschaftlichen Visualisierung, die Bereitstellung geeigneter Visualisierungs-Hardware und -Software sowie die Unterstützung hausinterner Anwender. 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



## Kapitel 3

### Forschung und Entwicklung

Wie bereits im vorigen Kapitel ausgeführt, beschäftigt sich der Bereich Forschung und Entwicklung schwerpunktmäßig mit Scientific Computing und zwar in den Richtungen *Numerisch-symbolische Methoden* und *Diskrete Methoden*. Leistungen von ZIB-Mitarbeitern innerhalb der Kooperation mit GMD-FOKUS, die von dort wissenschaftlich zu verantworten sind, werden in den entsprechenden Publikationen der GMD mit dargestellt und bleiben deshalb hier unerwähnt. Im folgenden werden einzelne Projekte dargestellt, die im Jahre 1992 bearbeitet wurden, und zwar getrennt nach Grundlagen- und Anwendungsprojekten — mit naturgemäß fließenden Übergängen. Bei einigen Forschungs- und Entwicklungsprojekten ergeben sich zudem Überschneidungen zu Projekten des Bereiches Rechenzentrum (siehe Kapitel 5).

#### 3.1 Zusammenfassung

Zur Orientierung innerhalb der zahlreichen Einzelprojekte seien hier vorab einige Schwerpunkte gesetzt.

Im Bereich **Numerisch-symbolische Methoden** – mit den Abteilungen *Numerik*, *Numerische Softwareentwicklung* und *Symbolik* – hat sich das übergeordnete Großprojekt “Adaptive Multilevel Finite-Elemente-Methoden für partielle Differentialgleichungen” auch den räumlich dreidimensionalen Fall voll erschlossen. Komplizierte 3D-Geometrien bei elliptischen Differentialgleichungen und bei Hindernisproblemen sind in nicht dagewesener Effizienz beherrschbar geworden. Als Konsequenz dieser Entwicklung haben sich *Initiativen zur Gründung von zwei Sonderforschungsbereichen* ergeben (“Mathematik und Simulation technologischer Modelle”, “Hyperthermie”). Die entwickelten Methoden wurden bereits von der Industrie (Elektrotechnik, Chemie) nachgefragt und haben 1992 zu gemeinsamen Projekten geführt. Auch im Gebiet der technischen Verbrennung sollen Methoden dieser Bauart eingesetzt werden; dazu waren jedoch im Berichtszeitraum zunächst umfangreiche Software-Anpassungen erforderlich. Das zweite Großprojekt “Adaptive diskrete Galerkin-Methoden für makromolekulare Prozesse” hat zu einer für uns neuartigen Konsequenz geführt: ein Mitarbeiter hat das ZIB verlassen und selbst eine Firma gegründet, die auf dem entsprechenden Know-how aufbaut. Die im Jahre 1991 gegründete interne Arbeitsgruppe “Numerik dynamischer Systeme” hat im Berichtszeitraum schöne Erfolge bei der schnellen Berechnung periodischer Lösungen von dynamischen Systemen, der Behand-

lung von Symmetriebrechung bei Zwei-Parameter-Systemen sowie der Entwicklung von neuartigen Glättungsmethoden für Probleme der Quantenchemie erringen können. Mit dem Neuaufbau einer Programmbibliothek in C++ für die Vielfalt der entsprechenden Fragestellungen wurde begonnen.

Im Lauf der letzten Jahre wuchs zunehmend die Einsicht, daß *Lehrbücher* modernen Zuschnitts mit Ausprägung Scientific Computing zur wissenschaftlichen Nachwuchsförderung dringend nötig sind. Erfreulicherweise hat bereits der erst Band zur Numerischen Mathematik derart Anklang gefunden, daß 1992 mit einem Nachfolgebund begonnen wurde. Auf diese Weise wurde zugleich die enge Verflechtung von Forschung am ZIB und universitärer Lehre dokumentiert.

Der erwünschte Wissensfluß von innovativer Forschung über Softwareentwicklung zu Industrie-Kooperation ist im Jahr 1992 besonders augenfällig geworden. So sind etwa die aus dem ZIB kommenden adaptiven Linienmethoden für partielle Differentialgleichungen inzwischen in der *Verfahrenstechnik* ein begehrtes Simulationswerkzeug geworden. Adaptive Multilevel-Methoden in der *Integrierten Optik* haben eine Rolle gespielt bei der Konkretisierung eines technologischen Patentes. Glättungsalgorithmen spielen eine wichtige Rolle bei der quantenchemischen Beeinflussung von Reaktionen zur Herstellung von Materialien, deren Synthese bisher schwierig oder unmöglich war. Im Entwurf von *Hochleistungstransistoren* sowie von *Miniaturlasern* wurden wichtige Erkenntnisse durch die Hinzuziehung von Simulationen des ZIB gewonnen.

Der im Herbst 1991 neu gegründete Bereich **Diskrete Methoden** – bestehend aus den Abteilungen *Kombinatorische Optimierung*, *Software-Information*, *Visualisierung und Paralleles Rechnen* – hat durch die im Berichtszeitraum erfolgte Besetzung aller vorhandenen Stellen seine Arbeit in vollem Umfang aufnehmen können. Drittmittel der DFG, des BMFT, des Landes Berlin und insbesondere von industriellen Partnern (u.a. Cray, Siemens, SNI, Bell Communication Research, Norwegian Telecom) haben die Aufnahme weiterer Forschungsprojekte und die Beschäftigung zusätzlicher wissenschaftlicher Mitarbeiter ermöglicht. Durch Doktoranden mit DAAD-Promotionsstipendien konnte das Mitarbeiterspektrum ergänzt werden.

Der Bereich ist national aktiv im Rahmen des DFG-Schwerpunktes “Anwendungsorientierte Optimierung und Steuerung”, der für weitere zwei Jahre genehmigt wurde, durch die Leitung des BMFT-Projektes “Fachinformation in der Mathematik”, das 1992 unter Beteiligung von 51 deutschen Mathematik-Fachbereichen anließ, in Berlin durch Beteiligung am Graduiertenkolleg “Algorithmische Diskrete Mathematik” in Zusammenarbeit mit FU, HU und TU und auf europäischer Ebene durch die Beteiligung an einem Twinning-Projekt mit sechs Partnern im SCIENCE-Programm der EG.

Ein wesentlicher Teil der Forschungsanstrengungen im Bereich *Diskrete Methoden* ist auf die Lösung schwerer, praxisrelevanter kombinatorischer Optimierungsprobleme gerichtet. Dabei stehen algorithmische Methoden wie Schnittebenenverfahren, Branch-and-Cut und LP-basierte Heuristiken im Vordergrund, die auf polyedertheoretischen Untersuchungen zugehöriger Polytope beruhen. An der Entwicklung allgemeiner Methodiken und Werkzeuge dieser Art ist ein Großteil der Mitarbeiter beteiligt, die dann in forschungsintensiven Spezialuntersuchungen die Umsetzung der allgemeinen Methodik zur Lösung konkreter Anwendungsprobleme vorantreiben. Hier sind insbesondere Erfolge bei der Untersuchung der Facettialstruktur von Polyedern zu berichten, die durch verschiedene Versionen von Clustering-, Partitions-, Zuordnungs-, Zusammenhangs- und Steinerbaum-Packungsproblemen definiert sind. Die Theorie ist bereits z.T. durch die Entwicklung von Separierungsverfahren algorithmisch umgesetzt worden. U.a. konnten mit den neu entwickelten Verfahren verschiedene konkrete Anwendungsprobleme zum ersten Mal optimal gelöst werden – und dies in akzeptablen Rechenzeiten auf Standard-Workstations. Besonders zu erwähnen sind hier Erfolge im Bereich des Entwurfs ausfallsicherer Telekommunikationsnetzwerke mit hohen Zusammenhangsforderungen, des Verdrahtens im VLSI-Design und bei verschiedenen Optimierungsproblemen in der Fertigung und Produktionssteuerung.

Neben diesen anwendungsorientierten Forschungen werden weitere mathematische Grundlagenprojekte betrieben, die – aus der Sicht der Anwender – eher prospektiven Charakter haben und Möglichkeiten ausloten, einige Entwicklungen in der reinen Mathematik für die oben genannten Zielsetzungen zu erschließen. Hierzu zählen insbesondere Untersuchungen im Gebiet der algebraischen Topologie, zur Theorie orientierter Matroide und zur kombinatorischen Analyse von Polyedern und Komplexen. In diesem Bereich sind einige bahnbrechende Ergebnisse erzielt worden, u.a. durch die Entwicklung einer neuen Diagramm-Technik und die Ableitung neuer Homologie- und Homotopieformeln. Aus diesen Ergebnissen konnten bereits komplexitätstheoretische Resultate abgeleitet werden wie z.B. die Bestimmung unterer Schranken für den Mindestaufwand bestimmter Berechnungsprobleme.

Das ZIB verfügt z.Z. noch nicht über einen eigenen Parallelrechner. Dennoch wurde “in Vorbereitung auf eine zu erwartende Anschaffung” bereits ein Forschungsprojekt begonnen, das zum Ziel hat, geeignete Werkzeuge zur Lösung kombinatorischer Optimierungsprobleme auf Parallelrechnern bereitzustellen, die weitgehend architekturunabhängig sind. Konkret wird an der Entwicklung eines Rahmens für ein vielfältig einsetzbares paralleles Branch-and-Cut-Verfahren gearbeitet und an der Implementierung verschiedener dabei notwendiger Algorithmen aus der linearen Algebra und der linearen Optimierung.



## 3.2 Grundlagenprojekte

### Adaptive Lösung skalarer Erhaltungssätze in einer Raumdimension

**Bearbeiter:** F. Bornemann

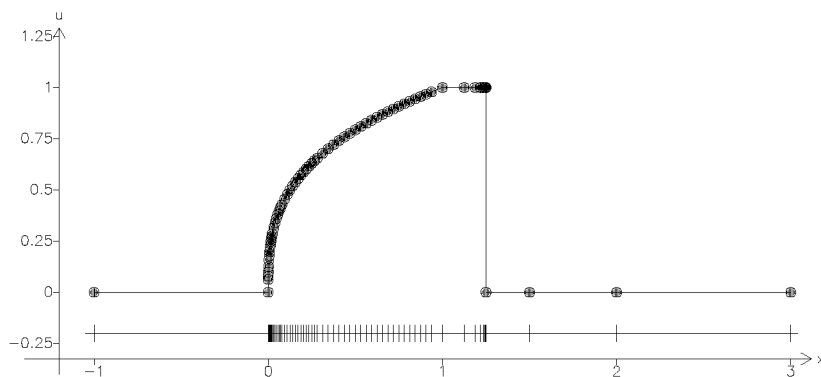
**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die Lösungsstruktur hyperbolischer Erhaltungssätze mit Schock- und Verdünnungswellen und ihrer Interaktion läßt den Einsatz adaptiver Methoden besonders attraktiv erscheinen. Dem steht aber eine spezifische Problematik entgegen: Explizite Zeitdiskretisierungen koppeln den Zeitschritt an die *kleinste* Maschenweite der Ortsdiskretisierung (CFL-Bedingung), was im Falle einer adaptiven Auflösung eines Schocks zu ineffizient kleinen Schrittweiten in der Zeit führt. Implizite Zeitdiskretisierungen modellieren die im Problem endliche Ausbreitungsgeschwindigkeit von Information durch eine instantane globale algebraische Kopplung, was gleichbedeutend mit einer parabolischen Regularisierung numerische Dissipation zum Effekt hat, d.h. scharfe Schockfronten werden verschmiert.

Demgegenüber erlaubt die direkte Behandlung des Evolutionsoperators in der Zeit durch Approximation des Transportverhaltens, sich von der CFL-Restriktion zu befreien. In diese Methodenklasse fallen die “large time-step Godunov” Verfahren von LeVeque und Verfahren, die die klassische Charakteristikenmethode modifizieren. Die typische Schwierigkeit des Charakteristikenverfahrens ist neben der Lösung der anfallenden nichtlinearen Gleichungssysteme, daß diese eindeutig lösbar nur sind, solange eine klassische Lösung existiert. Ein Schock, in dem sich Charakteristiken schneiden, führt sodann zu einer mehrdeutigen Lösungsstruktur.

Das in [1] neu vorgeschlagene Verfahren löst diese Probleme für konvexen Fluß durch die Verwendung einer problemangepaßten, stückweise monotonen Interpolation der Anfangsdaten. Diese ist so gewählt, daß der charakteristische Transport, d.h. das Lösen der nichtlinearen Gleichungen, auf eine zentrische Streckung der Interpolationsabschnitte führt, die sich effizient in baryzentrischen Koordinaten realisieren läßt. Nachdem auf diese Weise die *exakte mehrwertige* Lösung des charakteristischen Transportes der modifizierten Anfangsdaten berechnet ist, erlaubt die Lax-Hopf Formel die Auswahl der eindeutigen, rechtsseitig stetigen Entropielösung. Die Lax-Hopf Formel ist für die vorgeschlagene Interpolation effizient auswertbar, sobald die Legendre-Transformierte der Flußfunktion zur Verfügung steht. Hierzu können symbolische Methoden oder die schnelle diskrete Legendre-Transformation von Y. Brennier [2] genutzt werden.

Durch die exakte Realisierung des Transportes der modifizierten Daten ist jeder Zeitschritt möglich; wegen der Kontraktivität der Halbgruppe, gibt es

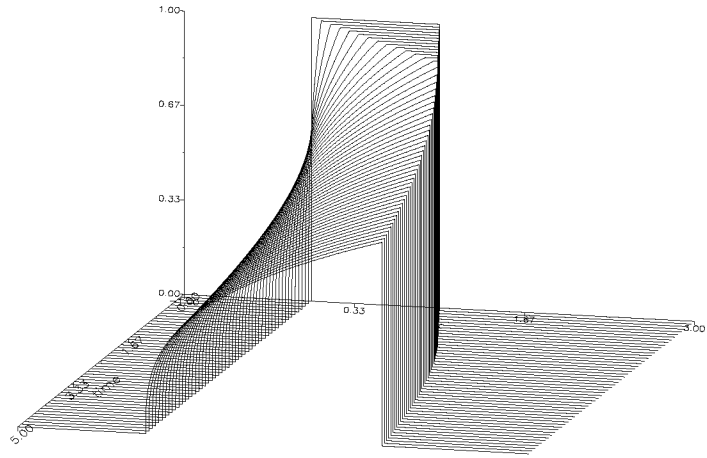
keinen Fehlerbestandteil in der Zeit. Im Ort finden übliche Techniken der adaptiven Interpolation Verwendung. Abbildung 1 zeigt die berechnete Lösung einer Interaktion von Verdünnungswelle mit einem Schock für den Fluß  $u^4/4$ . Zur Darstellung der Lösung ist eine adaptive stückweise lineare Interpolation gewählt worden. Abbildungen 2 und 3 zeigen die Evolution der berechneten Lösung und der Gitterpunkte der problemangepaßten monotonen Interpolation. Die konstanten Zeitschritte dienen einzig der Darstellung und sind nicht Bestandteil des Algorithmus.



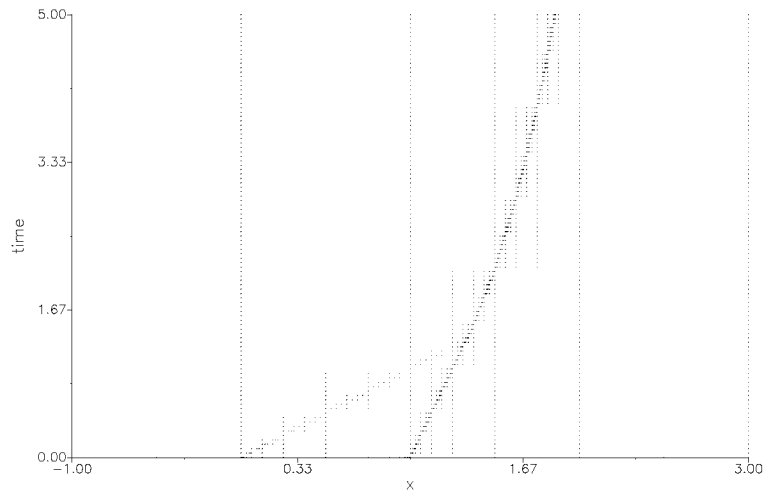
Lösung für  $t = 1.0$

## Literatur

- [1] F. Bornemann: *Adaptive Solution of One-Dimensional Scalar Conservation Laws with Convex Flux*. ZIB, Preprint SC 92-18 (1992)
- [2] Y. Brennier: *Un Algorithme Rapide pour le Calcul de Transformées de Legendre-Fenchel Discrètes*. C.R. Acad. Sci. Paris, 308 Série I, pp. 587-589, (1989)



Evolution der berechneten Lösung



Evolution der Gitterpunkte der speziellen Interpolation

## **Analysis optimaler Vorkonditionierungen elliptischer Randwertprobleme**

**Bearbeiter:** F. Bornemann

**Kooperation:** H. Yserentant (Universität Tübingen), P. Oswald (Universität Jena), A. Kunoth (FU Berlin), W. Dahmen (RWTH Aachen)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die schnelle iterative Lösung von Finite-Elemente Gleichungen durch Multilevel-Vorkonditionierungen war im Berichtszeitraum weiterhin Gegenstand intensiver Forschung. Bei den BPX-Typ Vorkonditionierungen [1], die sich durch Unterraum-Zerlegungen mittels  $L_2$ -orthogonaler Projektionen beschreiben lassen, wurde die Frage, ob sich die Konditionszahl unabhängig von der Verfeinerungstiefe beschränken läßt, von P. Oswald [2] mittels tiefliegender Methoden der Funktionenraumtheorie für den Fall äquidistanter Gitter positiv beantwortet. A. Kunoth und W. Dahmen [3] behandelten mittels lokaler Whitney-Typ Abschätzungen den Fall nichtäquidistanter Gitter. Der Beweis dieses Resultates konnte von F. Bornemann und H. Yserentant durch Verwendung elementarer Eigenschaften des sogenannten  $K$ -Funktional wesentlich vereinfacht werden. Zudem wurde der für Anwendungen wichtige Fall gemischter Randbedingungen miteinbezogen und die Analysis auf Mehrgitterverfahren mit lokalem Glätter übertragen [4].

### **Literatur**

- [1] Bramble, J.H., Pasciak, J.E., Xu, J.: *Parallel Multilevel Preconditioners*. Math. Comp. **55**, pp. 1–22 (1990)
- [2] Oswald, P.: *On Discrete Norm Estimates Related to Multilevel Preconditioners in the Finite Element Method*. In: Proc. Int. Conf. Constr. Theory of Functions, Varna/Bulgaria (1991)
- [3] Dahmen, W., Kunoth, A.: *Multilevel Preconditioning*. Numer. Math. **63**, pp. 315–344 (1992)
- [4] Bornemann, F., Yserentant, H.: *A Basic Norm Equivalence for the Theory of Multilevel Methods*. ZIB, Preprint SC 92–1 (1992), erscheint in Numer. Math. 1993.

## Numerische Pfadverfolgung bei stationären Problemen

**Bearbeiter:** A. Hohmann, P. Deuffhard, C. Klein–Robbenhaar

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Ziel dieses Grundlagenprojektes ist die Analyse stationärer Lösungen parameterabhängiger Differentialgleichungen hoher Dimension. Schwerpunkt im Berichtszeitraum 1992 waren dabei hochdimensionale Systeme, typischerweise aus der Elektrotechnik, deren Größe die Behandlung mit den bisher in dem Programmpaket ALCON benutzten Methoden (z.B. QR–Zerlegung zur Berechnung der Pseudoinverse) unmöglich macht. Bei der Lösung der auftretenden unterbestimmten linearen Gleichungssysteme können jedoch Spezialstrukturen mit Hilfe von Lösern für dünnbesetzte Matrizen ausgenutzt werden. Für die Berechnung von Verzweigungspunkten gilt es dabei auch Systeme mit Rangdefekt größer 1 zu behandeln. Dazu wurde von Klein–Robbenhaar ein einheitlicher Zugang entwickelt, der die Berechnung der Pseudoinversen einer Matrix für beliebige Zerlegungen zuläßt und alle (uns bekannten) Verfahren einschließt. Dieser Ansatz wurde in einem aufwendigen Programmpaket softwaretechnisch realisiert. Beim Einsatz von Sparse–Lösern sind allerdings Zusatzfunktionen nötig, die in den Standardpaketen nicht enthalten sind. Am Beispiel eines der gängigsten Programme aus diesem Bereich (MA28 von I. Duff, Harwell) konnte diese Erweiterung erfolgreich demonstriert werden.

Der jetzige Stand der Entwicklung läßt trotz der äußerst umfangreichen Implementierungsarbeiten einen Abschluß im kommenden Jahr erwarten.

### Literatur

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

## Numerische Simulation periodischer Prozesse

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

**Kooperation:** B. Fiedler (Mathematisches Institut, Universität Stuttgart)

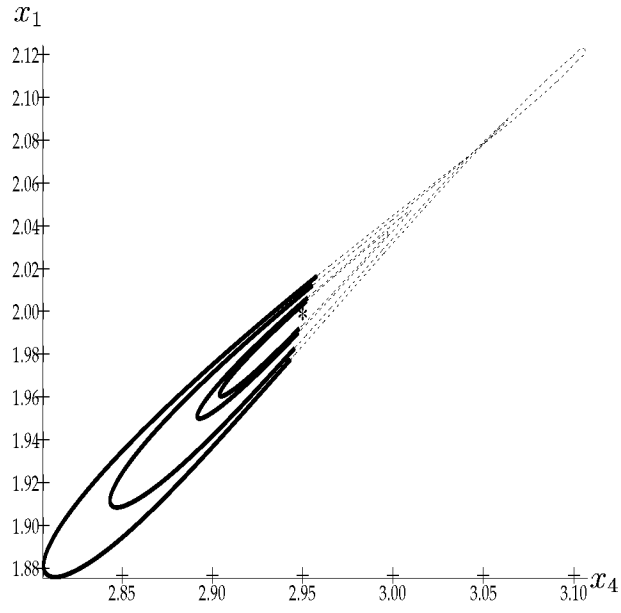
**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die numerische Simulation periodischer Prozesse gewinnt zunehmend Bedeutung in technologisch wichtigen Bereichen, insbesondere der chemischen Verfahrenstechnik und der Elektronik. Das Grundlagenprojekt hat sich zum Ziel gesetzt, derartige Probleme mit neuen numerischen Methoden schnell und verlässlich zu lösen. Ausgangspunkte sind dabei zum einen leistungsfähige Integratoren für die (zumeist steifen) Differentialgleichungen und zum anderen (inexakte) Newton-Techniken, mit denen die bei der mathematischen Beschreibung entstehenden nichtlinearen Gleichungen gelöst werden.

Im Berichtszeitraum ist es gelungen, ein Programmpaket zur Berechnung periodischer Lösungen autonomer gewöhnlicher Differentialgleichungen zu entwickeln. Dabei kommen sowohl globale Newtonverfahren wie auch Fortsetzungsmethoden für periodische Lösungen parameterabhängiger Systeme zum Einsatz. Insbesondere hat sich in diesem Zusammenhang die Technik der impliziten Reparametrisierung bewährt, die es auch zulässt, Umkehrpunkte eines Pfades periodischer Lösungen bezüglich des gegebenen Parameters zu berechnen.

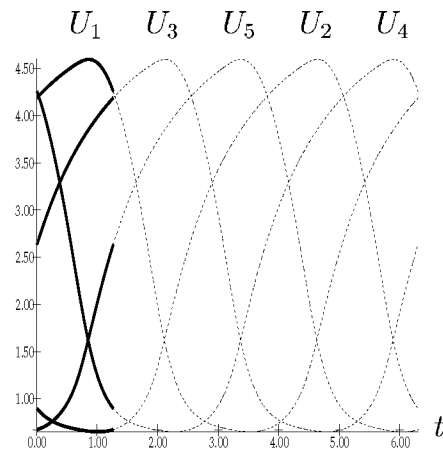
C. Wulff ist es ferner in ihrer Diplomarbeit gelungen, die Konzepte der Symmetrienausnutzung bei stationären Lösungen (siehe Grundlagenprojekt "Gemischt symbolisch-numerische Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme mit Symmetrie") auf den periodischen Fall zu übertragen. Dadurch konnte die Effektivität der Methode erheblich gesteigert werden, z.B. bei der Simulation von elektronischen Ringoszillatoren. Abbildung 2 veranschaulicht den numerischen Symmetrieanatz für 5 Inverter ( $n = 5$  nur zur Illustration; der realistische Fall liegt bei  $n \approx 2000$ ). Tatsächlich lassen sich mit dem Verfahren Schwingkreise mit tausenden von MOSFET-Invertern, wie sie in der Praxis auftreten, mit einem Rechenaufwand von  $O(n)$  statt  $O(n^3)$  simulieren. Ferner ermöglicht dieser Zugang auch die Berechnung symmetriebrechender Verzweigungen periodischer Lösungen. Abbildung 1 zeigt einen  $S_4$ -äquivarianten Hopfpunkt beim 4-Zellen-Brusselator.

## Literatur

- [1] C. Wulff: *Numerische Pfadverfolgung von periodischen Lösungen mit Symmetrie*, Diplomarbeit FU Berlin, in Vorbereitung.



$S_4$ -äquivarianter Hopfpunkt beim 4-Zellen-Brusselator



Schwingkreis mit 5 MOSFET-Invertern ( $n = 5$  nur zur Illustration)

## **Transparente Randbedingungen für die Schrödingergleichung**

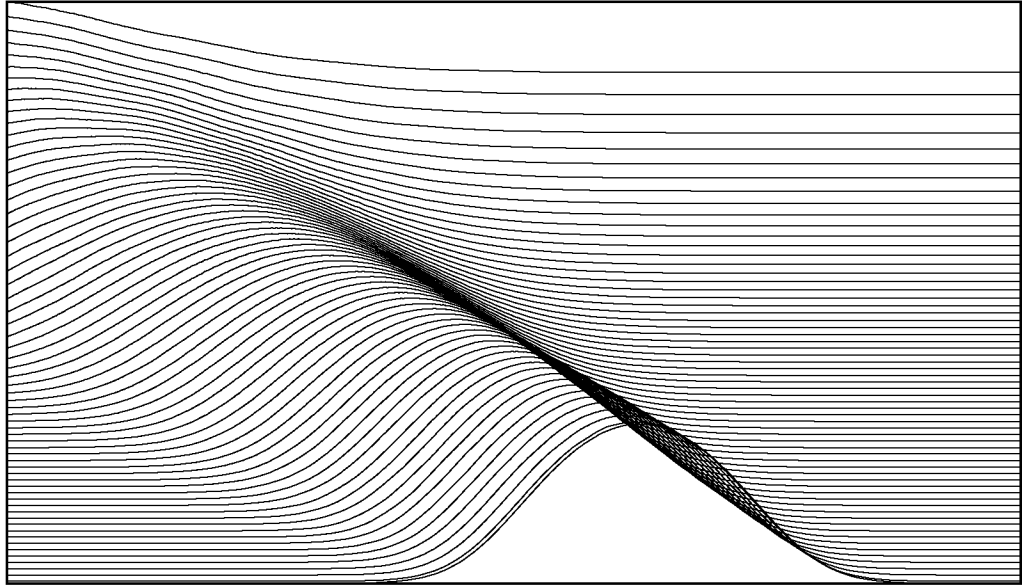
**Bearbeiter:** F. Schmidt, F.A. Bornemann, P. Deuffhard

Das Projekt wurde durch die Deutsche Bundespost TELEKOM gefördert.

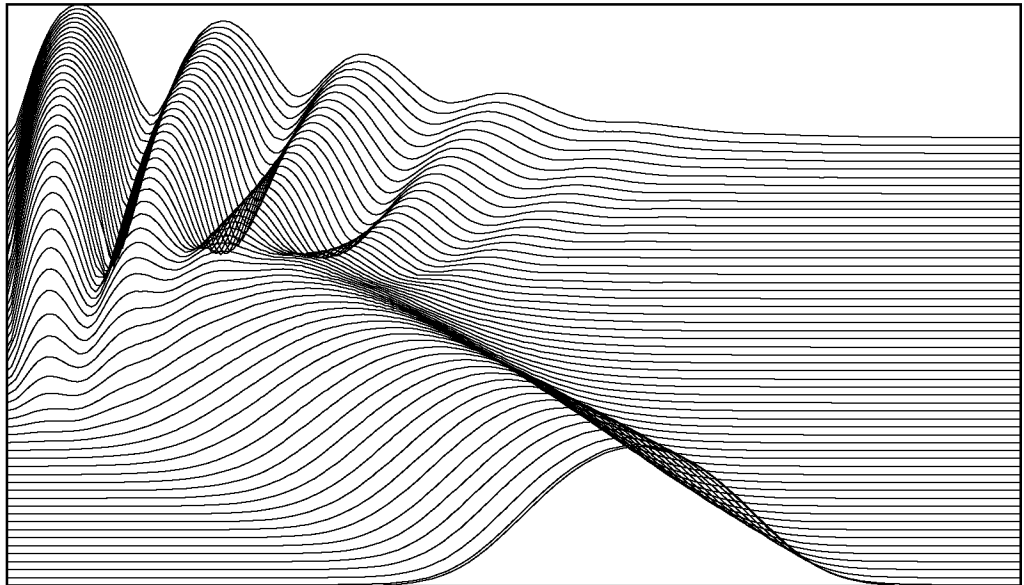
**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Viele Probleme in der Festkörperphysik, der Akustik oder der integrierten Optik, bei denen eine Wellenausbreitung auftritt, lassen sich durch Gleichungen vom Schrödinger-Typ beschreiben. Der numerischen Berechnung der Wellenphänomene wird in der Regel ein reduziertes Simulationsgebiet zugrunde gelegt, von dem a priori nicht bekannt ist, ob es während des betrachteten Zeitraumes von z.B. gestreuten Wellenanteilen verlassen wird oder nicht. Verlassen aber im ursprünglichen Problem solche Wellen das festgelegte Gebiet, so sollte das durch die Simulation nachgebildet werden können. Damit kann man die Randbedingungen aber nicht mehr für die gesamte Simulation fest vorschreiben, sondern sie müssen für jeden Ausbreitungsschritt neu berechnet werden. Neben dieser Fragestellung, die die richtige Modellierung des Ausgangsproblems betrifft, zeigte sich bei den Berechnungen zur Wellenausbreitung in Komponenten der integrierten Optik innerhalb des gleichnamigen Anwendungsprojektes, daß durch die Verwendung der transparenten Randbedingungen in vielen Fällen auch eine erhebliche Beschleunigung der Rechnung erreicht werden kann. Reflektieren nämlich die Ränder künstlich Wellenanteile zurück in das Simulationsgebiet, wird dort in der Regel eine komplizierte Welleninterferenz erzeugt, die zu berechnen einen höheren numerischen Aufwand erfordert.

Es wurde ein Prinzip formuliert, mit dessen Hilfe geeignete nichtlokale Randbedingungen für die Schrödingergleichung konstruiert werden können. Die Ergebnisse sollen im kommenden Berichtsjahr publiziert werden. Vorab seien die Resultate anhand zweier Abbildungen illustriert. Sie zeigen die Intensitätsverteilung eines Lichtstrahls, der auf den linken Rand des Simulationsgebietes trifft. Bei Anwendung der transparenten Randbedingungen wird dieser passiert, als ob er nicht vorhanden wäre. Wendet man dagegen homogene Dirichlet-Randbedingungen an und fixiert die Randintensität zu Null, erfolgt eine vollständige Reflexion des Lichts. Im ersten Beispiel betrug die Rechenzeit nur etwa 1% von der im zweiten Fall benötigten.





Simulation mit transparenten Randbedingungen: keine Reflexion



Simulation mit Nullrandbedingungen: Reflexion

## **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 (Institut für angewandte Mathematik, Universität Heidelberg)

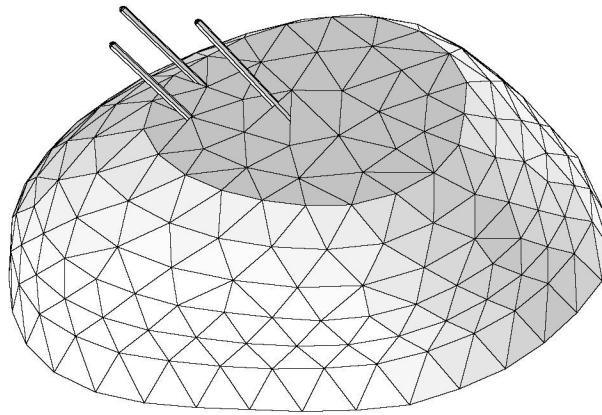
H. Yserentant, J. Bey, P. Leinen (Mathematische Fakultät, Universität Tübingen)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Das Projekt ist die Fortsetzung des gleichnamigen Vorhabens aus dem Berichtsjahr 1991. Grundbausteine jedes adaptiven Multilevel–Verfahrens sind Verfeinerungsalgorithmus, schneller Löser und a–posteriori Fehlerschätzung. Wie schon im Jahresbericht 1991 beschrieben wurde, ist die stabile Verfeinerung von Tetraedern ein nicht-triviales Problem. Mit der Arbeit von J. BEY (1991) steht inzwischen ein theoretisch abgesicherter, effizienter Algorithmus zur Verfügung, welcher in das Programmsystem KASKADE Eingang gefunden hat. Die Interpretation des verwendeten BPX–Vorkonditionierers als ein additives Schwarzsches Verfahren hat Folgen für die Implementierung: Die Anwendung des Residuums auf die aufspannenden Grobgitterbasisfunktionen erfolgt wie bei den hierarchischen Basen durch die kanonische Restriktion vom Feingitterraum. Die einzelnen Beiträge werden zwischengespeichert und nach Diagonalskalierung auf die Feingitterpunkte interpoliert und aufsummiert [1]. Zusammen mit einer geeigneten Abschätzung der Anzahl der Beiträge ist damit die Effizienz der Implementierung gesichert (linearer Aufwand in der Anzahl der Unbekannten).

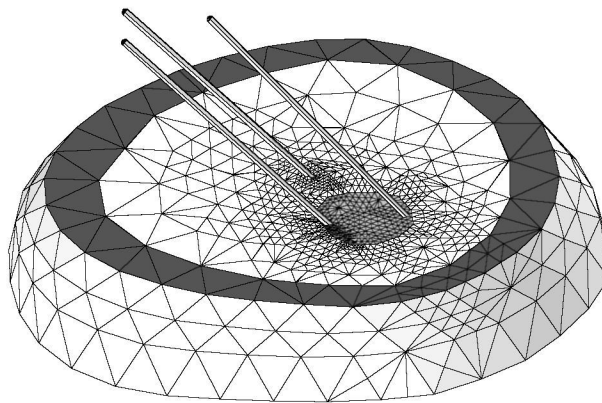
Die auf DEUFLHARD/LEINEN/YSERENTANT zurückgehende, kantenorientierte Fehlerschätzung zur adaptiven Gittersteuerung hat sich in einer Reihe von Anwendungsbeispielen bewährt (siehe Abbildungen). Um einen Vergleich mit anderen elementorientierte Fehlerschätzern im Sinne von BABUŠKA/RHEINOLDT oder BANK/WEISER zu ermöglichen, sollen entsprechende Untersuchungen im nächsten Berichtsjahr in Angriff genommen werden.

### **Literatur**

- [1] F. Bornemann, B. Erdmann, R. Kornhuber: *Adaptive Multilevel–Methods in Three Space Dimensions*. Preprint SC 92–14, Konrad–Zuse–Zentrum Berlin (1992)



Oberfläche der Anfangstriangulierung eines Schädels mit Hirn und Tumor



Schnitt durch das adaptiv verfeinerte Gitter von Knochen (schwarz), Hirn (weiß) und Tumor (grau)

## **Adaptive Multilevel–Methoden zur Lösung freier Randwertprobleme**

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

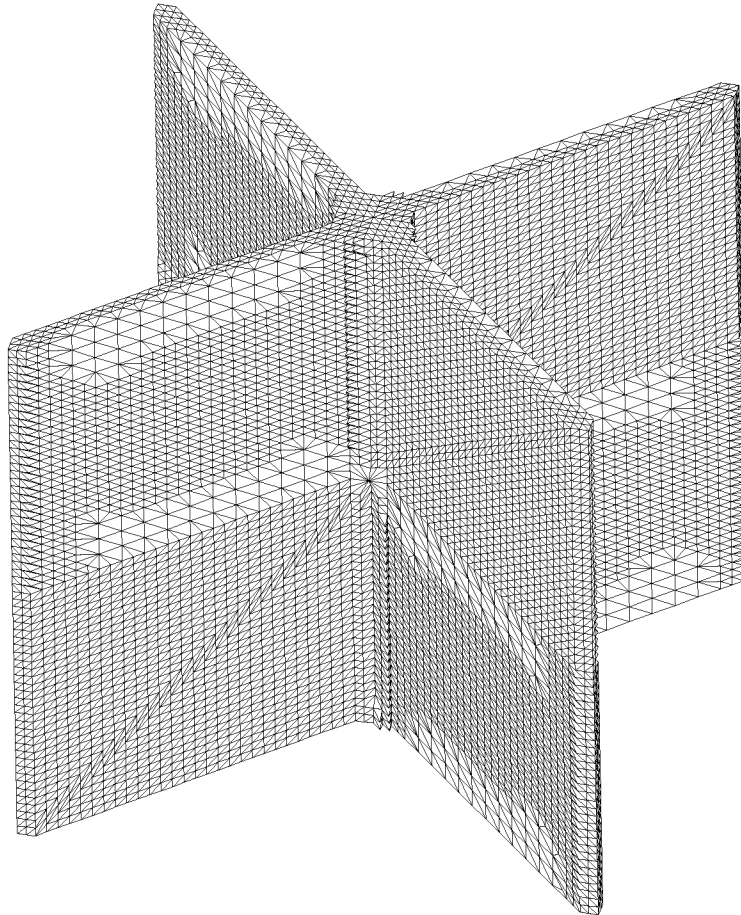
**Kooperation:** R.H.W. Hoppe (Mathematisches Institut, TU München),  
H. Yserentant (Mathematische Fakultät, Universität Tübingen)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Das Projekt ist die Fortsetzung des gleichnamigen Vorhabens aus dem Berichtsjahr 1991. Ausgehend von den Ergebnissen des Grundlagenprojektes *Adaptive Multilevel–Finite–Elemente–Methoden in drei Raumdimensionen* [1] wurde der im Jahresbericht 1991 beschriebene Zugang zu adaptiven Multilevel–Methoden für Hindernisprobleme auf drei Raumdimensionen erweitert [2].

Nach wie vor erfolgt dabei die Linearisierung des durch FE–Diskretisierung entstandenen, endlichdimensionalen, konvexen Optimierungsproblems durch eine aktive Mengenstrategie. Bei der Vorkonditionierung der resultierenden linearen Subprobleme versagen allerdings die in zwei Raumdimensionen verwendeten hierarchischen Basen, was auf die Instabilität des Interpolationsoperators im  $\mathbb{R}^3$  und damit letztlich auf den Sobolevschen Einbettungssatz zurückgeht. Demgegenüber ist die Stabilität der  $L^2$ –Projektion dimensionsunabhängig, was die Effizienz des resultierenden BPX–Vorkonditionierers in 3 Raumdimensionen nach sich zieht. Im Falle der hier betrachteten linearen Subprobleme kommt allerdings die Schwierigkeit hinzu, daß im allgemeinen das entsprechende reduzierte Rechengebiet auf dem Grobgitter nicht ausreichend reproduziert wird, eine Situation, die durchaus auch bei anderen Gelegenheiten, etwa bei inexakter Grobgittertriangulierung von Rechengebieten mit komplexer Randgeometrie auftreten kann. Dies erfordert eine Modifikation des BPX–Vorkonditionierers in der Umgebung des freien Randes: Nur Grobgitterbasisfunktionen, deren Träger ganz im reduzierten Rechengebiet liegen, dürfen zur Vorkonditionierung beitragen. Bei der Analyse dieser Störung zeigt sich, daß die notwendige Stabilität der  $L^2$ –Projektion nur unter gewissen Regularitätsforderungen an den freien Rand gesichert ist: Treten null– oder eindimensionale Komponenten des freien Randes auf, muß man mit einer Verschlechterung der Vorkonditionierung rechnen.

Die wesentlichen Resultate aus [2] zum semi–lokalen und lokalen Fehlerschätzer sind dimensionsunabhängig. Praktisch gestaltet sich die Lösung der semi–lokalen Defektprobleme in drei Raumdimensionen allerdings zu aufwendig. Ausgehend vom lokalen Fehlerschätzer als Startwert wird der Defekt jeweils nur durch einen Iterationsschritt der aktiven Mengenstrategie approximiert.

Die nachfolgende Abbildung zeigt den verbleibenden elastischen Bereich bei der elasto-plastischen Torsion eines Stabes mit quadratischem Querschnitt.



Die Ergebnisse werden im Jahre 1993 publiziert [3].

#### **Literatur:**

- [1] F. Bornemann, B. Erdmann, R. Kornhuber: *Adaptive Multilevel-Methods in Three Space Dimensions*. Preprint SC 92-14, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (1992)
- [2] R.H.W. Hoppe, R. Kornhuber: *Adaptive Multilevel-Methods for Obstacle Problems*. Preprint SC 91-16, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, erscheint in SIAM Journal on Numerical Analysis (1993)
- [3] B. Erdmann, R.H.W. Hoppe, R. Kornhuber: *Adaptive Multilevel-Methods for Obstacle Problems in 3-D*. Erscheint 1993

## Glättende Integrationsalgorithmen für Evolutionsprobleme der Quantenchemie

**Bearbeiter:** Ch. Schütte, P. Deuffhard

**Kooperation:** J. Manz, B. Just (Freie Universität Berlin)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die numerische Simulation quantenchemischer Vorgänge werden in dem mit dem Schlagwort "Molecular Modelling" benannten Technologiebereich zunehmend wichtiger.

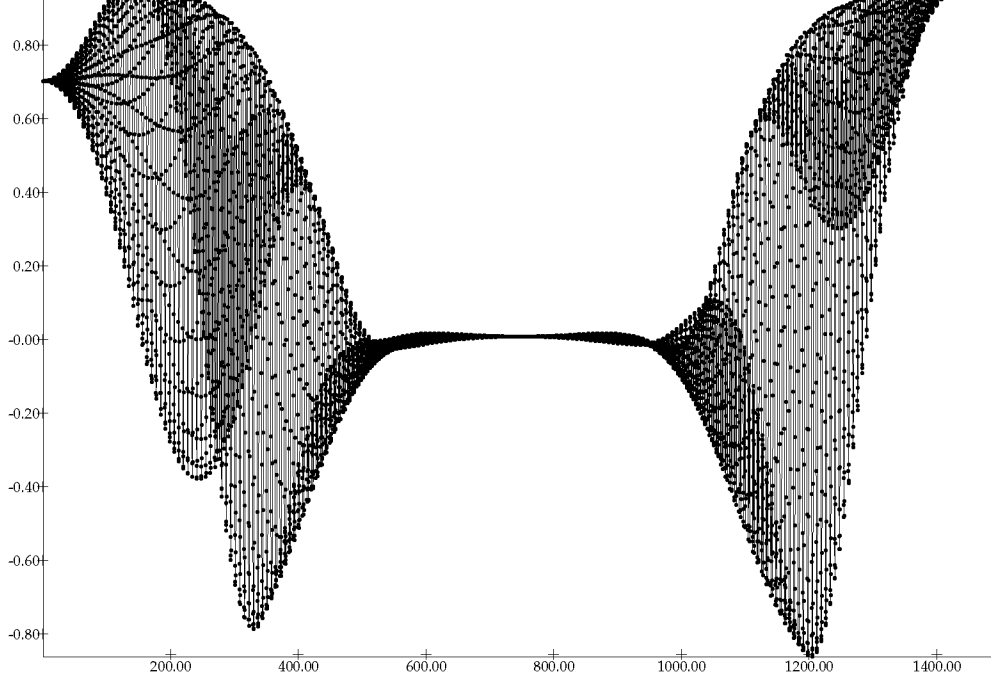
Der Arbeitsgruppe um J. Manz an der FU Berlin ist es in den letzten Jahren gelungen zu zeigen, wie man mittels kurzer Laserpulse eine selektive Anregung einzelner Bindungen in einem Molekül erreichen kann. Simulationen der ablaufenden Prozesse (durch Lösen der zeitabhängigen Schrödingergleichung) erreichen hohe Komplexität, weil die Vorgänge auf sensiblem Zusammenspiel eines hochoszillierenden Systems beruhen. Der Aufwand liegt heute schon bei kleinsten Molekülen am Rande des Rechenbaren.

Signifikante Rechenzeitgewinne in diesem Gebiet der Computational Physics können nur erzielt werden, wenn alle für den global ablaufenden Prozess irrelevanten, aber hochfrequenten Prozesskomponenten im algorithmischen Ablauf geglättet werden, um dem eingesetzten Integrationsalgorithmus maximale Zeitschritte zu ermöglichen. Für eine solche adaptive Elimination durch Glättung sollen Algorithmen entwickelt und in moderne Integratoren integriert werden.

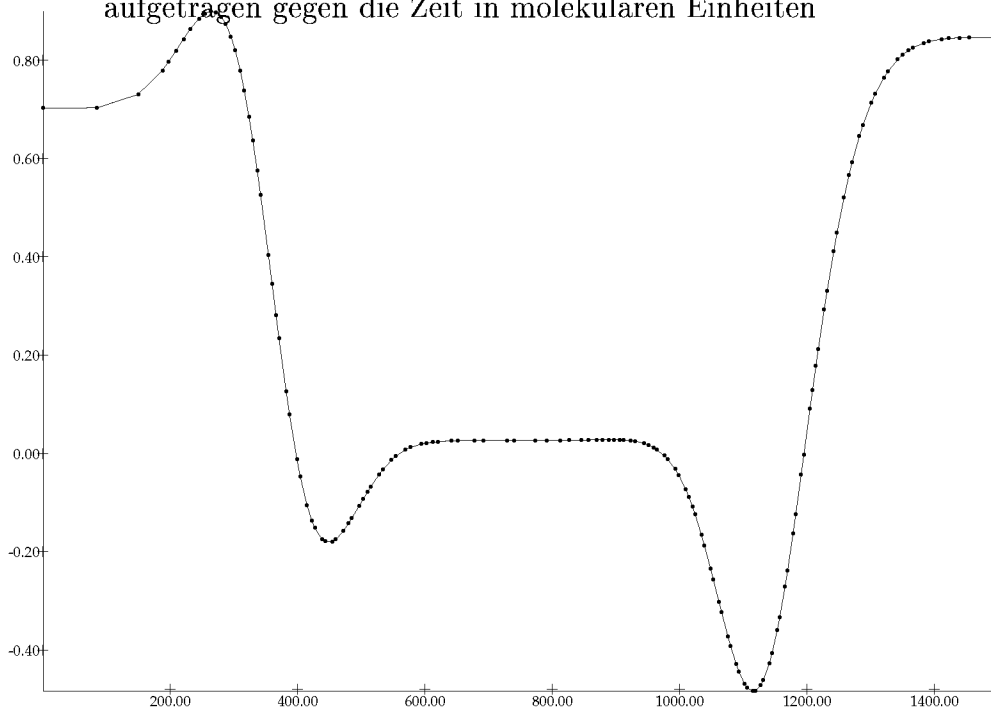
In Modellversuchen mit einer ersten algorithmischen Grundidee konnten gute Erfolge mit Zeitgewinnen um einen Faktor 100 erreicht werden. In den folgenden Abbildungen sind eine ursprüngliche und die zugehörige geglättete Trajektorie aufgetragen.

### Literatur:

- [1] Ch. Schütte: *A quasi-resonant smoothing algorithm for a fast analysis of selective vibrational excitations*. Erscheint 1993



Realteil eines Besetzungskoeffizienten eines Schwingungszustandes  
aufgetragen gegen die Zeit in molekularen Einheiten



Mit glättendem Integrator bestimmter Verlauf des Besetzungskoeffizienten  
aus obiger Abbildung

## **Adaptive gewichtete Galerkin–Methoden für Licht–Molekül–Wechselwirkung**

**Bearbeiter:** Ch. Schütte, M. Wulkow

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Bei zeitabhängigen Problemen der Quantenphysik muß die Schrödingergleichung gelöst werden. Wenn der Energieoperator des Problems ein diskretes Spektrum hat, so ist diese Aufgabe äquivalent zur Lösung eines Anfangwertproblems für ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen sehr hoher (eventuell unendlicher) Dimension.

In den letzten Jahren konnten P. Deuffhard und M. Wulkow zeigen, daß man zu äußerst effektiven Lösungsverfahren für solche Differentialgleichungssysteme kommt, wenn man ihre diskrete Natur durch Anwendung diskreter gewichteter Galerkin–Verfahren ausnutzt.

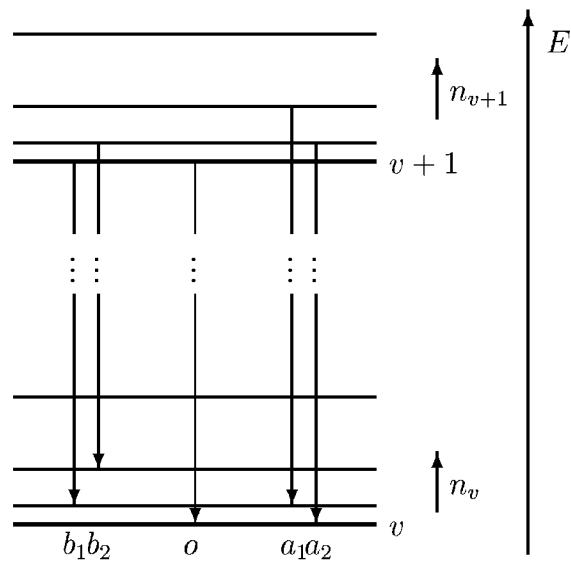
Im Rahmen dieses Grundlagenprojektes wurde die Strukturverwandschaft der algorithmischen Idee und der physikalischen Modellierung an einem Beispiel aus dem Bereich Licht–Molekül–Wechselwirkung demonstriert: Beschreibung des Zeitverhaltens der Anregung von Rotationsspektren von Molekülen.

Unter Verwendung des genannten Algorithmus gelang es, die Zeitentwicklung des Infrarot–Emissionsspektrums bis in den experimentell wohlbekannten stationären Zustand hinein zu simulieren.

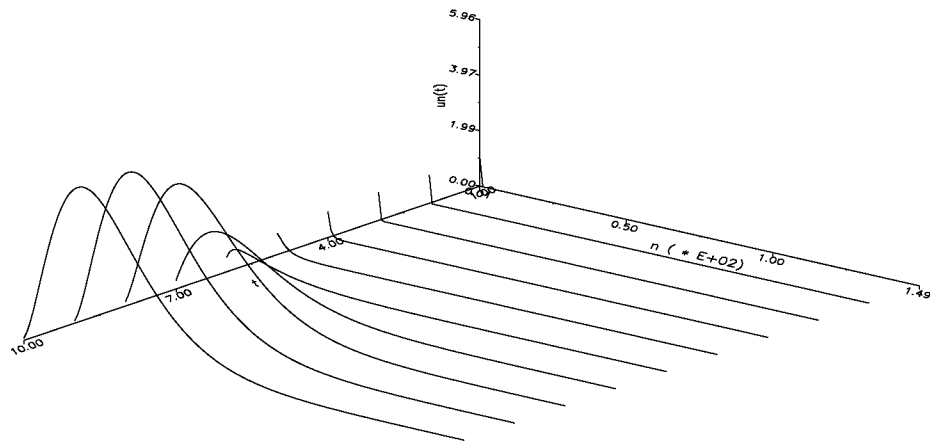
### **Literatur:**

- [1] Ch. Schütte, M. Wulkow: *Quantum Theory with Descrete Spectra and Countable Systems of Differential Equations – A Numerical Treatment of Infrared Spectroscopy*. Konrad–Zuse–Zentrum Berlin, Preprint SC 92–7 (1992)





Beispiele für Übergänge in Rotations-Schwingungs-Spektren



Zeitentwicklung des Emissionsspektrums eines starren Rotators

## Entwicklung adaptiver Multilevel–Verfahren zur Berechnung von Reaktions– Diffusionsgleichungen

**Bearbeiter:** P. Deuffhard, J. Lang, A. Walter,

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

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Das im vorigem Jahr entwickelte raum– und zeitadaptive Finite–Elemente–Verfahren zur Lösung von nicht–linearen Systemen von Reaktions–Diffusionsgleichungen wurde in Hinsicht auf Robustheit und Anwendbarkeit auf mehrere Spezies weiterentwickelt. Dabei wurden zunächst mehrere zweistufige semi–implizite Runge–Kutta–Verfahren anhand von zahlreichen Modellproblemen für zwei Spezies mit unterschiedlichen Schwierigkeitsgraden getestet. Besonderes Augenmerk lag auf der vollen Adaptivität des Algorithmus, die sich vor allem bei der Auflösung von sehr sensiblen nichtlinearen Effekten gegenüber vergleichbaren Methoden bewährt hat. Die Ergebnisse wurden in einer Publikation zusammengefaßt [1]. Ein zweiter Schritt bestand in der tiefgreifenden Verbesserung der zugrundeliegenden Datenstrukturen, die die Flexibilität des gesamten Programmpakets wesentlich erhöhte. Das von R. Roitzsch [2] erarbeitete, neue Knotenkonzept konnte unmittelbar dazu genutzt werden, einen effizienten Löser für elliptische partielle Differentialgleichungssysteme in einer Raumdimension bereitzustellen. Das so entstandene SYSKASK1 beinhaltet große Teile des von ihm entwickelten SYSKASK2 für zweidimensionale Aufgabenstellungen. Damit ist eine solide software–technische Ausgangsbasis für die robuste Implementierung von adaptiven Zeitintegrationsverfahren geschaffen worden. An einem weiterführenden Ausbau für die Zeitkomponente wird im Moment gearbeitet.

### Literatur

- [1] J. Lang, A. Walter: *A Finite Element Method Adaptive in Space and Time for Nonlinear Reaction–Diffusion Systems*. IMPACT Comp. Sci. Eng. **4**, pp. 269–314 (1992)
- [2] R. Roitzsch: KASKADE – Programmer’s Manual Version 2.0 (in Vorbereitung)

## **Software-Implementierung adaptiver Multilevel FE-Methoden**

**Bearbeiter:** R. Roitzsch, B. Erdmann, F. Bornemann, J. Lang

**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. Wichtigste Erweiterungen des Programmierbaukastens sind die Module zur Verwaltung von Systemen und der Nutzung höherer Ansatzelemente. Dazu haben wir eine neue Abstraktionsschicht (Knoten) eingefügt, um die Lösungsverfahren von der Darstellung der Geometrie zu trennen. Die Knoteninformation kann an den geometrischen Objekten (Punkte, Kanten, Dreiecke) gespeichert werden. Der Zugriff erfolgt mit der bisher verwendeten Schnittstellentechnik, also durch Anwendung von Funktionen auf Knotenelemente. Mit diesen neuen Datenstrukturen sind die vorhandenen linearen Gleichungslöser auch auf Systeme von Differentialgleichungen oder höheren Ansatzfunktionen anwendbar, falls die entsprechenden Voraussetzungen erfüllt sind.

Für die Benutzerschnittstelle ist ein Anschluß an die tel-Kommandosprache eingearbeitet. Die Graphikmodule verwenden jetzt als Grundlage die Mini-Graphik. Damit steht ein X11-Treiber zur Verfügung, der sich bereits bei der Portierung auf andere Unix-Systeme (Iris, HP) bewährt hat.

Nach der 3D-Version wurde parallel die Entwicklung einer 1D-Systemversion begonnen. Ebenso begann die Umstellung der zeitabhängigen KASKADE-Variante (KASTIO) und der Hindernisproblem-Variante (OKASK).

Ein neues Handbuch ist in Arbeit.

## Extrapolationsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen und differentiell–algebraische Systeme

**Bearbeiter:** U. Nowak, U. Pöhle, A. Hohmann, C. Wulff, P. Deuffhard

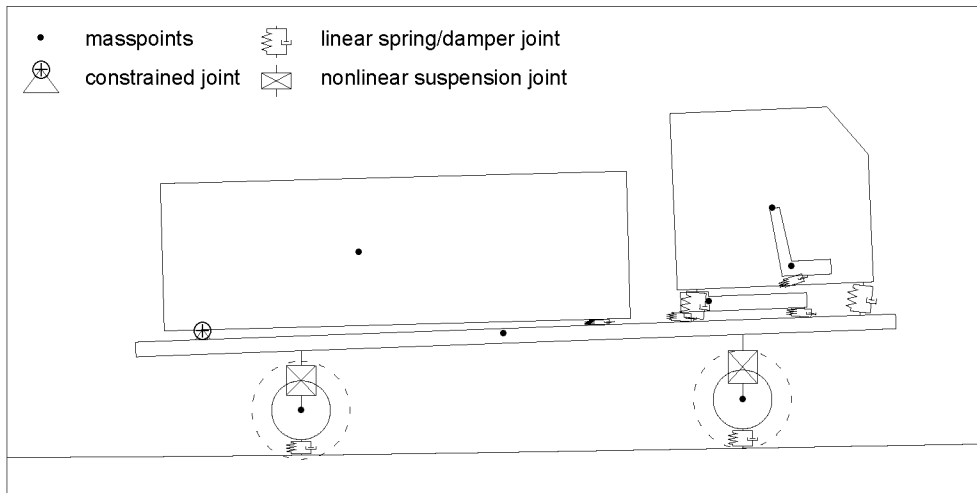
**Kooperation:** Ch. Lubich (Institut für Angewandte Mathematik und Statistik, Universität Würzburg), Ch. Engstler (Institut für Mathematik und Geometrie, Universität Innsbruck)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Rahmen der Zusammenarbeit mit Ch. Lubich und Ch. Engstler wurden die Arbeiten am Code MEXX21, einem Verfahren zur Lösung von differentiell–algebraischen Problemen aus der Mehrkörperdynamik, zu einem vorläufigen Abschluß gebracht [1]. Das eigentliche Integrationsverfahren wurde um einen Algorithmus zur Bestimmung von lösungsabhängigen Schaltpunkten erweitert. Außerdem wurde die Darstellung einer zeitlich kontinuierlichen Lösung (“dense output”) implementiert, was z.B. ein einfaches und effizientes graphisches Postprocessing erlaubt. Mit dem entwickelten Softwarepaket konnten kritische Probleme aus den Anwendungen erfolgreich gelöst werden, so etwa die Simulation des Schwingungsverhaltens eines Lastwagens beim Fahren über eine unebene Straße.

Neben diesem Arbeitsschwerpunkt wurden die über die Codelib bereits seit einigen Jahren zugänglichen FORTRAN–Codes zur Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen und von linear–impliziten differentiell–algebraischen System mit  $\text{index} \leq 1$  gepflegt und softwaretechnisch weiterentwickelt.

Ein zweiter Schwerpunkt der Arbeit war die völlige Neuimplementierung von Extrapolationsverfahren in C [2]. Im Rahmen des Grundlagenprojektes *Numerische Simulation periodischer Prozesse* ergab sich die Notwendigkeit, die bisher getrennt implementierten Extrapolationsverfahren zur Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen zu vereinheitlichen, um sie dann als austauschbare Bausteine in den übergeordneten Verfahren einsetzen zu können. Dazu wurde der Kern dieser Verfahren, die Ordnungs– und Schrittweitensteuerung bei Extrapolationsverfahren unter Ausnutzung eines informationstheoretischen Vergleichsmodells, herausgearbeitet und als für sich stehendes Modul realisiert. Analog wurden die für Anfangswertprobleme notwendigen Prozeduren, einschließlich Skalierung und Lösen der Variationsgleichung, in einem weiteren Modul zusammengestellt. Die verschiedenen Integratoren entstehen nun, indem die unterschiedlichen Diskretisierungsschemata (expliziter Euler, semi–impliziter Euler, Trapezregel) an diese Module gekoppelt werden. Verbesserungen der Schrittweitensteuerung kommen so automatisch allen darauf aufbauenden Programmen zugute. Die so entstandenen Programme wurden (abgesehen von der Anwendung in oben genanntem Grundlagen-

projekt) bereits für die Simulation schwieriger Probleme aus der Laserphysik und der Moleküldynamik erfolgreich eingesetzt [3].



Planares Lastwagenmodell

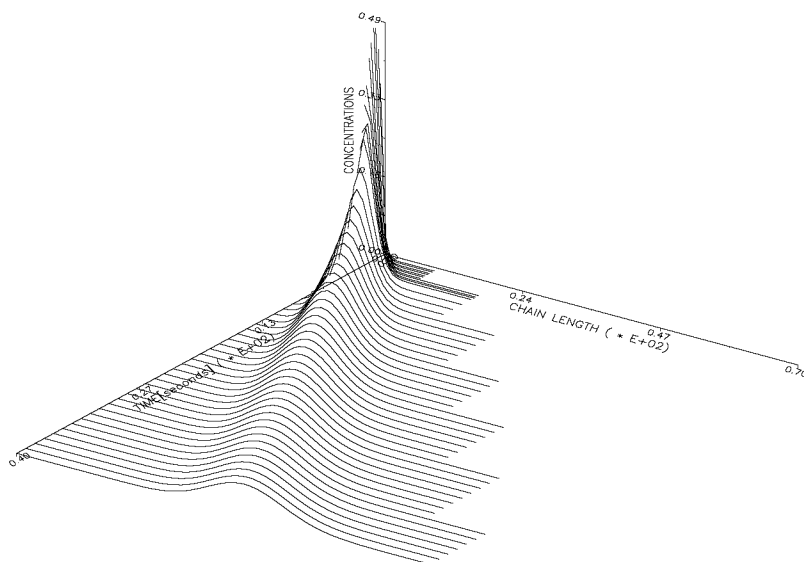
## Literatur

- [1] Ch. Lubich, U. Nowak, U. Pöhle, Ch. Engstler: *MEXX-Numerical Software for the Integration of Constrained Mechanical Multibody Systems*. Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Preprint SC 92-12 (1992)
- [2] A. Hohmann, C. Wulff, *Modular Design of Extrapolation Codes*. Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Technical Report TR 92-5 (1992)
- [3] M. Dinand, Ch. Schütte, R. Brinkmann, W. Sohler, H. Suche, *Relaxation Oscillations in Er-diffused Ti:LiNbO<sub>3</sub>-Waveguide Lasers*, erscheint 1993

## Entwicklung eines Simulationspaketes für makromolekulare Reaktionen einschließlich chemischer Reaktionskinetik

**Bearbeiter:** J. Ackermann, M. Martin, U. Nowak

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Berichtszeitraum wurde das Programmpaket MACRON (Version 2) weiterentwickelt. Dabei wurde das numerische Verhalten des Programms für die Anfangsphase verbessert, in der die diskrete Galerkin Methode Approximationsprobleme haben kann. In der Anfangsphase wird das Problem nun durch eine direkte Integration gelöst. Die Konzentration eines Polymeres der Länge  $i$  entspricht dabei jeweils einer Komponente des Differentialgleichungssystems. Im Sinne der adaptiven Rothe-Methode wird nach jedem Schritt geprüft, ob die gewählte maximale Kettenlänge ausreichend ist und der Zeitschritt wird falls notwendig mit erhöhter maximaler Kettenlänge wiederholt (siehe Bild). Die Steuerung der maximalen Kettenlängen ist für jede Polymerspezies unabhängig von den Kettenlängen anderer Polymerspezies. Wird die Dimension des Problems in einer solchen direkten Formulierung mit anwachsenden Kettenlängen zu groß, ist ein automatisches Umschalten auf die diskrete Galerkin Methode möglich. Außerdem wurde die Klasse der behandelbaren Reaktionstypen erweitert und die Maximalanzahl der Reaktionen ist nun lediglich durch den Speicher des jeweiligen Rechners beschränkt. Für das Programm wurde eine auf Xview und den Ztools basierende Oberfläche entwickelt, die einen intuitiven Umgang mit dem Programm ermöglichen soll. Erste Testrechnungen wurden für Anwendungen aus dem Bereich der Technischen Chemie durchgeführt.



Zeitentwicklung einer Polymerverteilung in der Anfangsphase

## Affin-invariante Newton-Codes für nichtlineare partielle DG

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Schwerpunkt der Arbeit war die Weiterentwicklung des Programmpaketes GIANT [1] (mnemotechnisch für: **G**lobal **I**nexact **A**ffine invariant **N**ewton **T**echniques), einem Verfahren zur Lösung sehr großer nichtlinearer Gleichungssysteme. Derartige Systeme entstehen z.B. nach Ortsdiskretisierung stationärer partielle Differentialgleichungen in 2 Raumdimensionen. Dabei werden die auftretenden linearen Gleichungssysteme mit Hilfe von iterativen Lösern nur bis auf eine gewisse Genauigkeit (inexakt) gelöst. Die von den iterativen linearen Lösern gelieferte Genauigkeit entspricht jedoch oft nicht der geforderten, was dann zu Konvergenzproblemen im Newtonverfahren führen kann.

Es wurden daher verschiedene Ansätze zur a posteriori Genauigkeitsschätzung dieser, vom linearen Löser gelieferten, Lösungen innerhalb des Newtonverfahrens entwickelt, implementiert und getestet. Dabei hat sich allerdings gezeigt, daß verlässliche Schätzungen einen i.a. zu hohen Aufwand erfordern, so daß eine darauf aufbauende adaptive Steuerung der tatsächlich erreichten Genauigkeit (und nicht nur der geforderten) nur für sehr kritische Systeme lohnenswert ist.

Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeit lag in der Anbindung des Softwarepakets NSPCG [2] an GIANT. Damit stehen nun neben den bisher alternativ verwendbaren iterativen Lösern (der SLAP-Löser GMRES und der ZIB-Code GBIT1) eine Vielzahl von weiteren iterativen Lösern und Vorkonditionierern innerhalb von GIANT zur Verfügung.

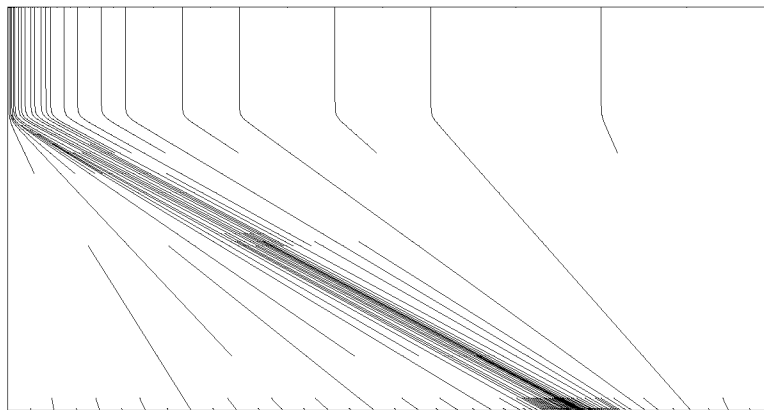
### Literatur

- [1] U. Nowak, L. Weimann: *GIANT – A Software Package for the Numerical Solution of Very Large Systems of Highly Nonlinear Equations*. ZIB Technical Report TR 90-11 (1991)
- [2] Thomas C. Oppe, Wayne D. Joubert, David R. Kincaid: *NSPCG – A Package for Solving Large Sparse Linear Systems by Various Iterative Methods*. The University of Texas at Austin (1988)
- [3] P. Deuffhard: *Global inexact Newton Methods for Very Large Scale Nonlinear Problems*. IMPACT Comut. Sci. Eng. **3**, No. 4, p. 366-393 (1991)

## Adaptive Linienmethoden für parabolische Systeme in einer Raumdimension

**Bearbeiter:** U. Nowak, P. Deuffhard

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Es wurde mit den abschließenden Entwicklungsarbeiten an dem im Anwendungsprojekt “Effiziente numerische Simulation von Verbrennungsprozessen” erwähnten Experimentalcode PDEX1 begonnen. Der algorithmische Hintergrund dieses Verfahrens ist eine klassische Linienmethode, bei der jedoch nach jedem Integrationsschritt das Ortsdiskretisierungsgitter lokal angepaßt wird. Zur Zeitintegration wird ein Extrapolationsverfahren (Code LIMEX) verwendet. Die Adaptierung des für einen Zeitschritt dann festen Gitters geschieht auf der Basis von, ebenfalls durch Extrapolation gewonnenen, Schätzungen des Ortsdiskretisierungsfehlers. Da in vielen Anwendungen eine im Ort rasch wandernde Front auftritt, bietet das Verfahren die Möglichkeit, durch eine sog. “Moving Grid”-Technik dieser Front auch innerhalb eines Zeitschrittes mit den Gitterlinien zu folgen. Dadurch können dann oft sehr viel größere Schrittweiten verwendet werden, als bei völlig festem oder nur statisch angepasstem Gitter. Im Berichtszeitraum wurden, neben der Weiterentwicklung der Software, insbesondere einige spezielle Gitterankopplungstechniken untersucht und getestet. Für den oft problematischen Fall, daß eine wandernde Front an den Rand des betrachteten Gebietes trifft, wurde eine Variante gefunden, die, insbesondere im Zusammenspiel mit dem statischen Regriding, eine deutlich erhöhte Robustheit besitzt. In der Abbildung ist der Verlauf der Gitterlinien für ein derartiges Problem dargestellt. Eine Publikation der gesamten Methode ist für den nächsten Berichtszeitraum vorgesehen. Die Algorithmen werden bereits in der chemischen Industrie und in der Autoindustrie höchst erfolgreich eingesetzt.



Knotenfluß in einer  $x-t$ -Ebene



## Iterative Lösung sehr großer linearer Gleichungssysteme

**Bearbeiter:** P. Deuffhard, M. Engel, A. Hohmann, R. Kornhuber

**Kooperation:** A. Louis (Mathematisches Institut, Universität Saarbrücken)  
R. Hoppe (Mathematisches Institut, TU München)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Berichtszeitraum konzentrierte sich das Interesse auf die Entwicklung iterativer Löser für *symmetrisch indefinite* lineare Gleichungen hoher Dimension. Dabei wurde speziell auf die Verwendbarkeit innerhalb eines adaptiven Multilevel-FE-Konzeptes für partielle Differentialgleichungen geachtet. Innerhalb des ZIB sind unmittelbare Anwendungen bei Eigenwertproblemen für die Schrödingergleichung (Diplomarbeit T. Grande), bei FE-Diskretisierung der Helmholtz-Gleichung und bei Sattelpunktproblemen (wie etwa Stokes-Gleichung oder Hindernisprobleme). Eine neuerliche eingehende Untersuchung bekannter alter Konzepte förderte neue Resultate zutage, die zumindest einen bisher ungewohnten Blickwinkel ergaben: so wurde das  $n$ -dimensionale Problem der Lanczos-Iteration zurückgespielt auf die Betrachtung einer adjungierten skalaren Drei-Term-Rekursion. Auf dieser Basis scheinen sich auch neue algorithmische Möglichkeiten aufzutun. Erste Resultate, die Anfang 1993 publiziert werden sollen, sind vielversprechend.

### Literatur

- [1] P. Deuffhard: *A Study of Lanczos-Type Iterations for Symmetric Indefinite Linear Systems*. (Erscheint 1993)

## Polyedertheoretische Methoden in der kombinatorischen Optimierung

**Bearbeiter:** N. Ascheuer, R. Borndörfer, C.E. Ferreira, M. Grötschel, A. Löbel, A. Martin, M. Stoer, R. Weismantel

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Viele kombinatorische Optimierungsprobleme lassen sich als lineare Programme (LP) mit ganzzahligen Variablen beschreiben. Zwar lassen sich lineare Programme effizient lösen, aber die Forderung der Ganzzahligkeit führt im allgemeinen zu NP-schweren Problemen, für die keine sehr effizienten Lösungsmethoden zur Verfügung stehen. Als brauchbar zur Lösung von Problemen in praxisrelevanten Größenordnungen hat sich jedoch der polyedrische Ansatz herausgestellt. In ihm werden die Ganzzahligkeitsbedingungen durch lineare Ungleichungen ersetzt, die für alle ganzzahligen Lösungen des Problems gültig sind. Das heißt, man studiert das Polyeder, dessen Ecken die ganzzahligen Lösungen sind. Allerdings kennt man in den wenigsten Fällen alle Ungleichungen dieses Polyeders. Der polyedrische Ansatz beginnt damit, für ein gegebenes kombinatorisches Problem möglichst viele Klassen gültiger linearer Ungleichungen zu bestimmen. Eine wesentliche Fragestellung bei der praktischen Umsetzung des polyedrischen Ansatzes besteht darin, sogenannte **Separationsalgorithmen** (exakte Verfahren und Heuristiken) zu finden, die Ungleichungen aus diesen Klassen generieren. Diese Separationsalgorithmen bilden den “problemspezifischen Kern” im folgenden Lösungsverfahren:

1. Bestimme eine Auswahl von gültigen Ungleichungen.
2. Löse das zugehörige LP. Ist die LP-Lösung zulässig, dann ist man fertig, ansonsten:
3. Generiere Ungleichungen, die durch die LP-Lösung verletzt sind, füge sie dem LP hinzu, löse es, usw.

Dieses Lösungsschema (das sogenannte **Schnittebenenverfahren**) hat folgende Vorteile:

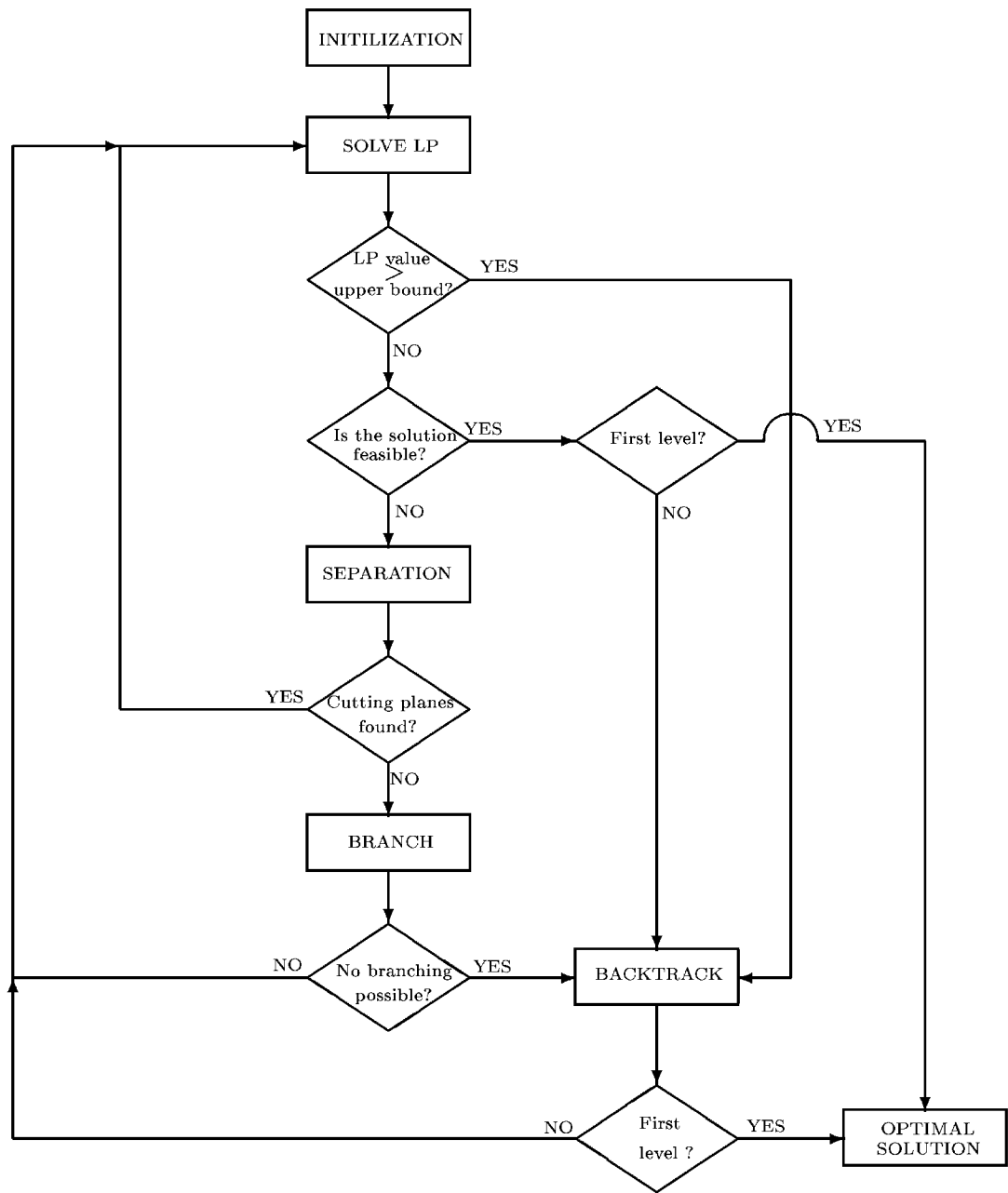
- Man kann theoretisch, falls eine “effektive” Generierung verletzter Ungleichungen möglich ist, das Gesamtproblem “effektiv” lösen, siehe [1].
- Der Wert der optimalen Lösung des kombinatorischen Problems liegt stets zwischen dem Wert der gegenwärtigen LP-Lösung und dem Wert einer guten (durch Heuristiken gefundenen) ganzzahligen Lösung, und dieses Intervall kann in jedem Schritt nur verkleinert werden. Man kann also, wenn die gewünschte Approximationsgüte erreicht ist, aufhören. Dieses Vorgehen erzeugt also Näherungslösungen mit Qualitätsgarantie.

- Man kann das Verfahren mit einem Enumerationsschema (“Branching-Methode”) verbinden, um garantiert optimale Lösungen zu erhalten. Unsere Abbildung zeigt den (stark vereinfachten) Ablaufplan eines kombinierten “Branch&Cut-Verfahrens”.
- Durch Verbesserung der LP-Löser [2], der Separationsroutinen und der Branching-Strategien ist es möglich, das Gesamtverfahren praktisch effizient zu gestalten, und so in vielen Fällen große reale Anwendungsfälle optimal zu lösen.

Schnittebenenverfahren sind für jedes kombinatorische Optimierungsproblem anwendbar und wurden auch in vielen unserer Praxisprojekte mit Erfolg verwendet.

## Literatur

- [1] M. Grötschel, L. Lovász, A. Schrijver: *Geometric Algorithms and Combinatorial Optimization*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1988; zweite Auflage erscheint 1993.
- [2] R. E. Bixby: *Das Implementieren des Simplex-Verfahrens: Die Startbasis*. Preprint SC 92-11, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin 1992.



## Verallgemeinerte Zuordnungsprobleme: Untersuchung einiger Spezialfälle

**Bearbeiter:** A. Abdel–Hamid, M. Grötschel

**Kooperation:** Siemens Nixdorf Informationssysteme, Augsburg

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Zuordnungsprobleme und ihre Verallgemeinerungen treten in verschiedensten mathematischen und anwendungsbezogenen Zusammenhängen auf. Zum Beispiel stellte sich in einem Projekt zur Simulation und Optimierung der PC–Fertigung bei SNI (Siemens Nixdorf Informationssysteme) in Augsburg das folgende Problem: Gegeben ist eine Menge von Behältern und eine Menge von Lagerplätzen. Jeder Behälter hat eine gewisse Größe, jeder Lagerplatz hat eine bestimmte Kapazität. Bekannt ist auch der Zeitverbrauch für die Einlagerung bestimmter Behälter in die verschiedenen Lagerplätze. Im Rahmen der Optimierung des PC–Hochregallagers ist nun eine effektive (d.h., möglichst schnell erreichbare) Zuordnung von Behältern zu Lagerplätzen gefragt, so daß jedem Behälter genau ein Lagerplatz zugewiesen wird. Dabei müssen natürlich die “physikalischen Bedingungen” erfüllt werden: die Behälter müssen auch auf die ihnen zugeordneten Lagerplätze passen. Mathematisch gesehen ist dieses praktische Problem ein Spezialfall des “verallgemeinerten Zuordnungsproblems”. Es läßt sich zeigen, daß auch der Spezialfall schwierig (im Sinne der Komplexitätstheorie “NP–schwer”) ist. Um es mit einem Schnittebenen–Ansatz (siehe Projekt “Polyedertheoretische Methoden in der kombinatorischen Optimierung”) behandeln zu können, wurde im Rahmen dieses Projekts ein Polytop studiert, dessen Ecken den zulässigen Zuordnungen der Behälter zu Lagerplätzen entsprechen. Es gelang, die Dimension zu bestimmen und auch Klassen von facetten–definierender Ungleichungen und anderer “scharfer” Ungleichungen zu finden. Dabei sind die Ergebnisse teilweise auch für andere “verallgemeinerte Zuordnungsprobleme” anwendbar. Auf Basis der theoretischen Untersuchungen haben wir ein Schnittebenen–Verfahren zur Lösung dieses Problem implementiert. Die (noch) vorläufige Version dieses Verfahrens ist in der Lage, alle bei SNI auftretenden praktischen Probleme in kurzer Zeit optimal zu lösen. Die theoretischen und praktischen Ergebnisse und die Implementation des Algorithmus werden in [1] dargestellt.

### Literatur

- [1] A. Abdel–Hamid: *Optimization Aspects of Automatic Storage Systems*. Dissertation, Technische Universität Berlin, in Vorbereitung.

## Polyedertheoretische Untersuchungen zu Set-Partitioning-Problemen

**Bearbeiter:** R. Borndörfer, M. Grötschel

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Viele in der Praxis auftretende “Dispositionsprobleme”, insbesondere der Personal- und Fahrzeugeinsatzplanung, lassen sich wie folgt formulieren. Gegeben seien  $m$  Anforderungen und eine (gewöhnlich extrem große) Anzahl  $n$  von Handlungsalternativen, von denen jede einige der Anforderungen erfüllt und deren Durchführung gewisse Kosten verursacht. Gesucht ist diejenige Kombination von Handlungsalternativen, die alle Anforderungen genau einmal und unter geringstmöglichen Gesamtkosten erfüllt. Beim Telebus-Projekt (vgl. den entsprechenden Beitrag) etwa sind die Anforderungen die Fahrtwünsche der Behinderten, die Handlungsalternativen sind mögliche Einsatzpläne für einzelne Fahrzeuge, die dann jeweils gewisse Fahrtwünsche befriedigen und dabei entsprechende Betriebs- und Personalkosten verursachen. Der Name “Set-Partitioning-Problem” für diese Fragestellung rührt daher, daß die Mengen der von den Handlungsalternativen einer Lösung des Problems überdeckten Anforderungen eine Partition der Gesamtmenge der Anforderungen bilden.

Mathematisch läßt sich das Problem als

$$\begin{aligned} \min \quad & c_1 x_1 + c_2 x_2 + \cdots + c_n x_n \\ & \mathbf{a}_1 x_1 + \mathbf{a}_2 x_2 + \cdots + \mathbf{a}_n x_n = \mathbf{1} \\ & x_j \in \{0, 1\} \quad \forall j \end{aligned} \tag{SP}$$

beschreiben, wobei die  $\mathbf{a}_j$  Vektoren aus  $\{0, 1\}^m$  und die  $c_j$  nichtnegative Zahlen sind, die jeweils die  $j$ -te Handlungsalternative und ihre Kosten beschreiben;  $a_{ij} = 0$  bzw. 1 bedeutet, daß die  $i$ -te Anforderung von Alternative  $j$  erfüllt wird.

Wir studieren das Set-Partitioning-Polytop, dessen Ecken genau die Lösungen von (SP) sind, sowie die zugehörigen Set-Packing- und Set-Covering-Relaxierungen; diese erhält man, wenn man in (SP) das Gleichheitszeichen durch kleiner- bzw. größergleich ersetzt. Ziel ist das Auffinden von Klassen facettendefinierender Ungleichungen und die Untersuchung der Komplexität der zugehörigen Separierungsprobleme. Von besonderem Interesse sind auch die Einflüsse sogenannter Base Constraints auf die Struktur der Polyeder, welche bei Flight-Scheduling Problemen mit den Heimatstandorten der Crews verbunden sind.

Weiterhin betrachten wir Klassen von Matrizen, für die die LP-Relaxierungen von (SP) sowie der genannten Packing- und Covering-Probleme ganzzahlig sind.

Diese Untersuchungen sind die Grundlage für die Entwicklung eines Branch&Cut-Algorithmus zur Lösung von Set-Partitioning-Problemen.

## Mehrfach-Partitionierungsprobleme in Graphen und Hypergraphen

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

**Kooperation:** Cid De Souza, Laurence Wolsey, CORE, Universität Louvain-la-Neuve, Belgien

Dieses Projekt wird von der Europäischen Gemeinschaft im Rahmen des TWINNING-Projekts "Algorithmic Approaches to Large and Complex Combinatorial Optimization Problems" gefördert.

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Mehrfach-Schnittprobleme treten überall dort auf, wo eine (kombinatorisch gegebene, d.h. endliche) Struktur in Teile zerlegt werden soll. Dabei treten viele verschiedene wichtige Varianten auf: je nachdem, ob in zwei oder mehrere Teile aufgeteilt werden soll, wie die Anzahl der Teile beschränkt ist, ob die Aufteilung in genau oder ungefähr gleich große Teile erfolgen soll, etc. Damit erhält man als Spezialfälle das Maximalschnittproblem (siehe auch das Projekt "Schnitte und Metriken"), das balancierte Schnittproblem und das mehrdimensionale Schnittproblem. Die Motivation für unsere Untersuchungen kommt aus den folgenden zwei Anwendungen: der Platzierung von Zellen im VLSI-Design und dem Entwurf von Prozessoren für Mainframe-Computer (siehe die unten angegebene Literatur sowie das Projekt "Das Platzierungsproblem im VLSI-Design").

Im Rahmen dieses Projekts beschäftigen wir uns mit der Entwicklung eines polyedrischen Ansatzes zur Lösung von **allgemeinen Mehrfach-Schnitt-Problemen**. Diese lassen sich folgendermaßen modellieren: Gegeben sei ein Graph (oder Hypergraph)  $G = (V, E)$ , eine Zahl  $m \in \mathbb{N}$ , Kostenfunktionen  $c \in \mathbb{R}^{V \times \{1, \dots, m\}}$  und  $d \in \mathbb{R}^E$ . Gesucht ist eine Aufteilung der Knotenmenge von  $G$ , d.h., eine Partition  $\mathcal{P} = (V_1, \dots, V_m)$  von  $V$ , so daß der "Schnittwert"

$$\sum_{k=1}^m \sum_{i \in V_k} c_{ik} + \sum_{e \in \delta(\mathcal{P})} d_e$$

minimal ist und gewisse Nebenbedingungen erfüllt werden. Hierbei bezeichnet  $\delta(\mathcal{P})$  die Menge aller Kanten, deren Endknoten in verschiedenen Teilen von  $\mathcal{P}$  liegen.

Grundlage unserer Untersuchungen ist das Polyeder, welches als konvexe Hülle aller Inzidenzvektoren von zulässigen Mehrfachpartitionen in dem gegebenen Graphen oder Hypergraphen definiert ist. Dieses Polyeder haben wir durch Ungleichungen partiell beschrieben. Die dabei gewonnenen Erkenntnisse gaben uns insbesondere ein besseres Verständnis von balancierten Schnittproblemen und den zugehörigen Polyedern. Darüber hinaus zeigte sich, daß Konzepte, welche für Graphen funktionieren, sehr schön auf Hypergraphen verallgemeinert werden können.

## Literatur

- [1] C.E. Ferreira, M. Grötschel, S. Kiefl, C. Krispenz, A. Martin, R. Weismantel: *Some integer programs arising in the design of mainframe computers*. Preprint SC 92–25, ZIB–Berlin 1992.
- [2] M. Jünger, A. Martin, G. Reinelt, R. Weismantel: *Quadratic 0/1 Optimization and a Decomposition Approach for the Placement of Electronic Circuits*. Preprint SC 92–10, ZIB–Berlin 1992; erscheint in *Mathematical Programming*.
- [3] R. Weismantel: *Plazieren von Zellen: Analyse und Lösung eines quadratischen 0/1-Optimierungsproblems*. Dissertation, Technische Universität Berlin, 1992; Technical Report TR 92–3, ZIB–Berlin 1992.



## Ein Multicommodity–Flow–Ansatz für Schedulingprobleme

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

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Eine Zeitungsschlagzeile: “*Die BVG in der Krise: Zu viele (!) Fahrgäste, zu wenig Bahnen – Die BVG müßte neue Busse und Bahnen kaufen*” (Berliner Morgenpost vom 10. Januar 1993)

Wie dieser Zeitungsartikel zeigt, ist wohl in den meisten großen Städten die Planung des öffentlichen Nahverkehrs unzureichend organisiert; Einsatzpläne werden meistens nur per Hand erstellt und bieten damit auch nur unzufriedenstellende Lösungen an. Die Mathematik kann hier helfen! In diesem Projekt werden Probleme der Fahrzeug–Einsatzplanung (“Schedulingprobleme”) theoretisch untersucht und praktische Lösungsmethoden entwickelt. Komplexitätstheoretisch ist das Problem, zu einem gegebenen Fahrplan die Betriebsmitteleinheiten kostenminimal zuzuweisen, bereits ab zwei Betriebsmittelklassen NP–schwer, falls alle Betriebsmittel wieder zu ihren ursprünglichen Standorten zurückkehren müssen und verschiedene Betriebsmittelklassen ein und derselben Fahrt eines Fahrplans zugewiesen werden können. Im öffentlichen Nahverkehr beispielsweise bestimmen sich die einzelnen Betriebsmittelklassen durch die einzelnen Depotstandorte und die einzelnen Bustypen. Als mathematisches Modell wird von uns eine LP–Formulierung für ein spezielles Multicommodity–Flow–Problem verwendet, wobei jeder Betriebsmittelklasse eine Commodity zugeordnet wird. Die Nebenbedingungen der LP–Relaxierung dieser Problemklasse zerfallen nun in  $K$  unabhängige ‘Single–Commodity–Flow–Probleme’ und in einige gemeinsame Nebenbedingungen. Dabei ist  $K$  die Anzahl der verschiedenen eingesetzten Betriebsmittelklassen. Mit Spezialalgorithmen der Graphentheorie können diese unabhängigen Unterprobleme in Bruchteilen der benötigten Zeit und des Speicherplatzbedarf von LP–Solvem gelöst werden. Ziel dieses Projektes ist es nun, ein effizientes Gesamtverfahren zur Lösung dieser Problemklasse mit Hilfe von Dekompositionsmethoden und eines Branch&Cut–Ansatzes zu entwickeln. Dabei sollen außerdem Möglichkeiten der Parallelisierbarkeit von Teilen des Gesamtverfahrens ausgearbeitet werden. In der ersten Phase des Projekts wurden einerseits geeignete Dekompositionsverfahren zur Lösung der LP–Relaxierungen untersucht und andererseits eine schnelle Unteroutine zur Lösung der einzelnen Single–Commodity–Flow–Probleme entwickelt.

## Neue Ansätze zur Lösung quadratischer 0/1-Optimierungsprobleme

**Bearbeiter:** A. Martin, R. Weismantel

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Rahmen dieses Projekts beschäftigen wir uns mit dem folgenden Problem ( $P$ ): Gegeben seien Zahlen  $n$  und  $m$  sowie eine Matrix  $Q \in \mathbb{R}^{nm \times nm}$ . Gesucht ist eine Lösung des Programms:

$$\begin{aligned} & \min x^T Q x \quad , \\ \text{so daß} \quad & \sum_{k=1}^m x_{ik} = 1, \quad \text{für alle } i = 1, \dots, n, \\ & x_{ik} \in \{0, 1\}, \quad \text{für alle } i = 1, \dots, n, k = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

Darüber hinaus betrachten wir Varianten dieses Problems ( $P_m$ ), mit Konstanten  $m \geq 2$ . Falls zusätzlich die Eigenschaft erfüllt ist, daß alle Matrixeinträge nicht-negative oder nicht-positive sind, so sprechen wir von ( $P^+$ ), ( $P_m^+$ ) bzw. ( $P^-$ ) und ( $P_m^-$ ). Alle oben aufgeführten Varianten dieses quadratischen Optimierungsproblems sind NP-schwer. Ferner läßt sich zeigen, daß es für  $m \geq 3$  keine polynomialen Algorithmen gibt, welche für alle Inputdaten des Problems ( $P_m^+$ ) eine beweisbar gute Lösung liefern, sofern "P $\neq$ NP" vorausgesetzt wird. Dieses Resultat impliziert, daß es für ( $P^+$ ), ( $P_m$ ) und ( $P$ ) ebenfalls keine solchen Algorithmen gibt. Dagegen existieren Algorithmen, welche für alle Inputdaten der Probleme ( $P_m^-$ ),  $m \geq 2$  in polynomialer Laufzeit eine Lösung finden, die höchstens um den Faktor  $1 - \frac{1}{m^2}$  von der Optimallösung abweicht. Ein weiterer Schwerpunkt im Rahmen dieses Projekts betraf die Entwicklung oberer und unterer Schranken zur Lösung der Probleme ( $P_m^+$ ),  $m \geq 2$ . Um untere Schranken zu erhalten, entwickelten wir einen Lagrange-Relaxierungsansatz. Dieser Ansatz basiert auf einer Modellierung des Problems ( $P_m^+$ ) als lineares ganzzahliges Programm und der Untersuchung des zugehörigen Polyeders. Durch heuristisch gewonnene Lösungen können wir obere Schranken ableiten. Empirisch hat sich dabei gezeigt, daß die von uns entwickelten Heuristiken für Problembeispiele aus dem VLSI-Design gute bis sehr gute Lösung liefern. Für weitere Details sei auf die folgende Literatur verwiesen.

### Literatur

- [1] M. Jünger, A. Martin, G. Reinelt, R. Weismantel: *Quadratic 0/1 Optimization and a Decomposition Approach for the Placement Problem of Electronic Circuits*. Preprint SC 92-10, ZIB-Berlin 1992.
- [2] R. Weismantel: *Plazieren von Zellen: Theorie und Lösung eines Quadratischen 0/1-Optimierungsproblems*. Dissertation, Technische Universität Berlin 1992; Technical Report TR 92-4, ZIB-Berlin 1992.

## Steinerbaumpackungs–Polyeder und Schnittebenen

**Bearbeiter:** A. Martin, R. Weismantel

**Kooperation:** Siemens AG, München–Neuperlach

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Mittelpunkt dieses Projekts steht die Untersuchung des sogenannten Steinerbaumpackungs–Polyeders. Dieses ist wie folgt definiert. Gegeben ist ein Graph  $G = (V, E)$  mit Kantenkapazitäten  $c_e, e \in E$ , sowie eine Liste von Knotenmengen  $\mathcal{N} = \{T_1, \dots, T_N\}$ ,  $N \geq 1$ . Eine Steinerbaumpackung ist eine Liste von Bäumen, dargestellt als 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. Das Steinerbaumpackungs–Polyeder (in Zeichen:  $\text{STP}(G, \mathcal{N}, c)$ ) ist definiert als die konvexe Hülle aller Inzidenzvektoren von Steinerbaumpackungen in  $G$ . Das Ziel dieses Projekts ist, das Steinerbaumpackungs–Polyeder durch “gute” beziehungsweise facetten–definierende Ungleichungen zu beschreiben. Diese Ungleichungen dienen als Basis zur Entwicklung eines Schnittebenenverfahrens, das zur Lösung praktischer Problembeispiele verwendet werden kann (siehe Projekt “Das Verdrahtungsproblem im VLSI–Design”). Die Bestimmung solcher (facetten–definierender) Ungleichungen erweist sich jedoch als nichttriviale Aufgabe, insbesondere, da bereits das Problem, die Dimension des Steinerbaumpackungs–Polyeders zu bestimmen, NP–vollständig ist. Eines unserer wesentlichen Resultate sagt aus, daß unter gewissen (schwachen) Voraussetzungen jede Ungleichung, die eine Facette für eines der einzelnen Steinerbaumpackungs–Polyeder  $\text{STP}(G, \{T_k\}, c), k \in \{1, \dots, N\}$ , definiert, zu einer facetten–definierenden Ungleichung für das Steinerbaumpackungs–Polyeder des Gesamtproblems erweitert werden kann. Dies impliziert, daß alle einzelnen Steinerbaumpolyeder vollständig verstanden sein müssen, um eine vollständige Beschreibung für das Steinerbaumpackungs–Polyeder zu erhalten. Von besonderem theoretischen Interesse sind darüber hinaus Ungleichungen, die mehrere der gegebenen Knotenmengen aus  $\mathcal{N}$  miteinander kombinieren. Hier ist es uns gelungen, eine Vielzahl an Klassen von Ungleichungen anzugeben, die unter bestimmten Voraussetzungen auch Facetten für das Steinerbaumpackungs–Polyeder definieren.

## Literatur

- [1] M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel: *Packing Steiner trees: polyhedral investigations*. Preprint SC 92–8, Konrad–Zuse–Zentrum Berlin 1992.
- [2] M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel: *Packing Steiner trees: further facets*. In Vorbereitung.
- [3] A. Martin: *Packen von Steinerbäumen: Polyedrische Studien und Anwendung*. Dissertation, Technische Universität Berlin 1992; Technical Report TR 92–4, Konrad–Zuse–Zentrum Berlin 1992.

## Arrangements und Konfigurationen: kombinatorische Analyse topologischer Daten

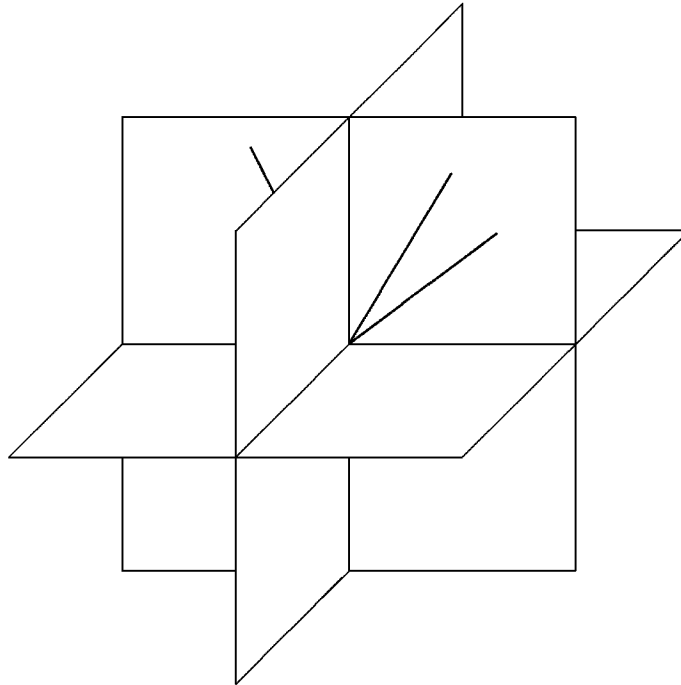
**Bearbeiter:** G. M. Ziegler

**Kooperation:** A. Björner, KTH Stockholm

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Arrangements von (linearen, affinen, projektiven oder sphärischen) Unterräumen sind grundlegende mathematische Objekte, und ergeben sich in verschiedensten Situationen der reinen und angewandten Mathematik. Als interessante Beispiele seien hier genannt:

- Hyperebenenarrangements, wie sie zum Beispiel durch die Ungleichungen von linearen Programmen definiert werden,
- Geraden-Konfigurationen im dreidimensionalen Raum,
- die Symmetrieebenen einer Spiegelungsgruppe, und deren Komplexifizierungen, und
- die Menge aller Punkte im  $\mathbb{R}^n$  mit  $k$  gleichen Koordinaten.

Dabei interessiert man sich einerseits für die kombinatorischen Invarianten solcher Arrangements (wie die Halbordnung der Durchschnitte, Matroide, Zell-Zerlegungen, etc.), andererseits für topologische Invarianten (wie den Homotopietyp der Arrangements, und die Kohomologie des Komplements). Die kombinatorische Beschreibung und Analyse von *reellen Hyperebenen-Arrangements* wird durch die Theorie der “orientierten Matroide” geleistet, die wir in [1] ausführlich entwickelt und dargestellt haben. Völlig neue Methoden zur Analyse von *komplexen Hyperebenen-Arrangements* und von *allgemeinen Unterraum-Arrangements* haben wir in [2,3] entwickelt: dort wird gezeigt, daß auch diese mit Methoden aus der Theorie der orientierten Matroide erfolgreich behandelt werden können. Insbesondere können damit Zell-Zerlegungen konstruiert werden, die dann von Apparaten der Homologietheorie, der Komplexitätstheorie wie der Computational Geometry verwendet werden. Für den Fall, daß nur (sehr grobe) Daten über das Schnittverhalten der Unterräume vorhanden sind, kann man immer noch mit Methoden der Homotopietheorie arbeiten. Für affine Hyperebenen-Arrangements wurde die zugehörige Theorie in [2,4] entwickelt. Im Fall von allgemeinen Unterraum-Arrangements konnten wir mit überraschendem Erfolg eine *Diagramm-Technik* nutzbar machen [2,5]. Mit dieser elementar-geometrischen Methode erhielten wir kombinatorische Formeln für den Homotopietyp der Vereinigung eines Arrangements. Aus diesen Homotopieformeln folgen insbesondere auch die berühmten Homologie-Formeln, die Goresky & MacPherson aus ihrer *stratifizierten Morse-Theorie* abgeleitet haben. Interessanterweise können Homologie- und Homotopieformeln genutzt werden, um untere Schranken für die Komplexität von bestimmten Rechnungsproblemen zu erhalten. So wurde in [6] damit die Anzahl der Vergleiche scharf abgeschätzt, die nötig ist, um zu entscheiden, ob unter  $n$  Zahlen  $k$  gleiche vorhanden sind.



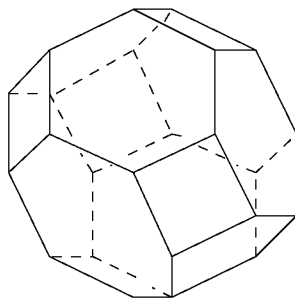
## Literatur

- [1] A. Björner, M. Las Vergnas, B. Sturmfels, N. White, G. M. Ziegler: *Oriented Matroids*. Encyclopedia of Mathematics, Vol. **46**, Cambridge University Press, Cambridge 1993.
- [2] G. M. Ziegler: *Combinatorial Models for Subspace Arrangements*. Habilitationsschrift, Technische Universität Berlin, April 1992.
- [3] A. Björner, G. M. Ziegler: *Combinatorial stratification of complex arrangements*. *J. Amer. Math. Society* **5**, pp. 105–149 (1992).
- [4] G. M. Ziegler: *Matroid shellability,  $\beta$ -systems, and affine hyperplane arrangements*. *Journal of Algebraic Combinatorics* **1**, pp. 283–300 (1992).
- [5] G. M. Ziegler, R. T. Živaljević: *Homotopy types of subspace arrangements via diagrams of spaces*. Preprint SC 91–15, ZIB–Berlin, Dezember 1991; *Mathematische Annalen*, im Druck.
- [6] A. Björner, L. Lovász, A. Yao: *Linear decision trees: volume estimates and topological bounds*. In: “Proc. 24th Annual ACM Symp. on the Theory of Computing (STOC)”, Assoc. of Comp. Machinery, New York, pp. 170–177 (1992).

## Konstruktion und Analyse von Polytopen und Komplexen

**Bearbeiter:** G. M. Ziegler

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die Theorie der konvexen Polytope hat in den letzten Jahren enorme und teilweise sehr überraschende Fortschritte gemacht (die wir teilweise in [1] darstellen). In diesem 1992 begonnenen Projekt wird an drei innovativen Schwerpunkten gearbeitet. Zum einen wird die kombinatorische **Analyse** von Polytopen studiert. Wir konzentrieren uns auf Durchmesser-Fragen, die für die lineare Optimierung von Bedeutung sind, und im Zusammenhang mit der berühmten “Hirsch-Vermutung” von 1957 stehen [1, Kapitel 3]. Hierbei fällt auf, daß viele der in der kombinatorischen Optimierung studierten Polyeder (siehe die Projekte “Polyedrischer Ansatz für kombinatorische Optimierungsprobleme” und “Schnitte und Metriken”) typischerweise sehr kleinen Durchmesser haben. Dies kann teilweise direkt gezeigt werden, teilweise durch Schälbarkeits- und Zerlegungstechniken (siehe [2] für den Fall von bipartiten Matching-Komplexen). Zweiter Schwerpunkt ist die **Konstruktion** von Polytopen mit spezifizierter Kombinatorik. Dabei ist das *Permutaeder*  $PA_{n-1}$  ein klassisches Gebilde, dessen Ecken den Permutationen einer Folge von  $n$  Objekten  $a_1, \dots, a_n$  entsprechen.



Neue Methoden ermöglichten die Konstruktion der *Assoziaeder*  $K_{n-2}$ , deren Ecken den vollständigen Klammerungen eines Produkts  $a_1 \cdot \dots \cdot a_n$  entsprechen, und schließlich der *Permuto-Assoziaeder*  $KPA_{n-1}$  in [3], deren Ecken den geklammerten Permutationen entsprechen. Das Hauptaugenmerk liegt bei dieser Arbeit auf allgemein einsetzbaren Methoden und Konstruktionen, insbesondere der Analyse der “Faser-Polytope” im Sinne von Billera & Sturmfels [1, Kapitel 9]. Dritter Schwerpunkt unserer Arbeit ist **Universalität** im Sinne von Mnëv [1, Kapitel 6]: hier werden die mögliche Struktur von Konfigurations- und Realisierungs-Räumen analysiert und Aussagen

über deren mögliche Komplexität getroffen.

### Literatur

- [1] G. M. Ziegler: *Lectures on Polytopes*. Ausarbeitung einer Vorlesung an der Technischen Universität Berlin 1992/93. In Vorbereitung.
- [2] G. M. Ziegler: *Shellability of chessboard complexes*. Preprint SC 92–19, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin 1992.
- [3] V. Reiner, G. M. Ziegler: *Coxeter-associahedra*. In Vorbereitung.



## Methoden zur Entwicklung paralleler Programme

**Bearbeiter:** M. Grammel, H.C. Hege

**Kooperation:** T. Ninh (Institut für Technische Informatik, TU Berlin),  
H. Ehrig (Institut für Theoretische Informatik, TU Berlin)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die 1991 begonnenen Arbeiten zur Untersuchung von Entwurfs- und Spezifikationsmethoden wurden abgeschlossen.

*Spezifikation paralleler Programme:* Formale Methoden der Spezifikation und des Entwurfes sind für die Entwicklung paralleler Programme vielfach besser geeignet und sicherer als die im sequentiellen Fall übliche informelle Darstellung von Algorithmen. In einer Studienarbeit wurde die Eignung von UNITY, einem einfachen imperativen Programmiermodell mit zugehörigem Beweissystem, das auf temporaler Logik basiert, untersucht. UNITY erlaubt eine formale Darstellung von Programmen bezüglich Spezifikation, Entwicklung, Verifikation und Transformation und unterstützt Nichtdeterminismus und Parallelität. Zur Beurteilung dieses Modells wurden Algorithmenklassen zur Lösung des Maximalflußproblems spezifiziert und deren Korrektheit bewiesen. Wie sich zeigte, können Korrektheitsbeweise bei verfeinerten Spezifikationen auf Entwurfsebene sehr umfangreich werden.

*Entwurf paralleler Programme:* Sogenannte systolische Felder und Farmen stellen spezifische Formen paralleler Berechnung dar und können als Paradigmen für den Entwurf paralleler Programme herangezogen werden. Als systolische Felder werden synchron getaktete, mehrdimensionale Pipelinestrukturen mit regulärer Kommunikationstopographie bezeichnet. Farmen hingegen führen zu einem Master-Slave-Ansatz, basierend auf einer Zerlegung des Datenraumes. Diese einfachen Modelle können verschieden variiert und verfeinert werden. Es wurde näher untersucht, welche Eigenschaften diese "Standardmodelle" auszeichnen, wie sie auf einen Lösungsansatz angewendet und wie sie effizient auf parallelen Rechnerarchitekturen, insbesondere Transputersystemen implementiert werden können.

### Literatur

- [1] M. Grammel: *Spezifikation des Maximalfluß-Problems und seiner Lösungsstrategien im UNITY-Modell*. Studienarbeit, Institut für Theoretische Informatik, TU Berlin, 1992.
- [2] M. Grammel: *Implementierung systolischer Felder und Farmen auf Transputerarchitekturen*. Diplomarbeit, Institut für Technische Informatik, TU Berlin, 1992.

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

**Bearbeiter:** M. Grammel, H.C. Hege, R. Wunderling

**Kooperation:** Cray Research Inc. (Eagan, Minneapolis), Prof. Dr. R.E. Bixby (Rice University, Houston, Texas)

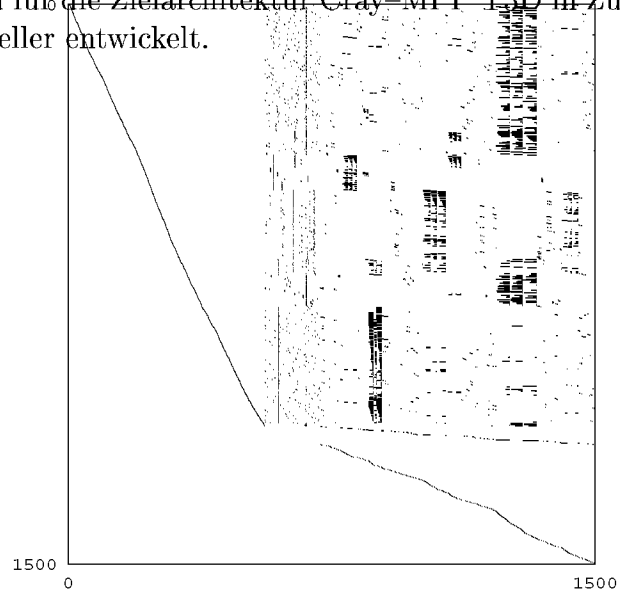
**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Rahmen dieses Projektes wird ein paralleles Branch-and-Cut-Framework entwickelt, welches die Lösung großer kombinatorischer Optimierungsprobleme auf parallelen Rechnersystemen ermöglicht. Um die oberste Leistungsklasse von Parallelrechnern für diesen Anwendungsbereich zu erschließen, wird die Entwicklung auf massiv-parallele MIMD-Rechner mit verteiltem Speicher ausgerichtet.

Branch-and-Cut-Verfahren (B&C) stellen eine aussichtsreiche Integration verschiedener Lösungsansätze für kombinatorische Optimierungsprobleme dar: Im Rahmen eines Branch-and-Bound-Ansatzes (B&B) wird ein Schnittebenenverfahren eingesetzt. Letzteres besteht in der wiederholten Lösung linearer Programme, die anschließend in einer Separierungsphase so erweitert werden, daß ihre Lösung einer Lösung des kombinatorischen Optimierungsproblems immer näher kommt. Kann dabei kein signifikanter Fortschritt mehr erzielt werden, so wird ein Branching-Schritt erforderlich. Dazu teilt man das Problem in mehrere Teilprobleme auf, die wieder mit dem Schnittebenenverfahren behandelt werden. Hat man andererseits zu einem Teilproblem eine Lösung gefunden, so können alle anderen Teilprobleme verworfen werden, die die bereits erlangte Güte nicht mehr erreichen können. Auf allen Ebenen der dargestellten B&C-Grobstruktur bestehen Parallelisierungsmöglichkeiten. An den Softwareentwurf der B&B-Ebene ergeben sich besondere Anforderungen durch das dynamische Erzeugen und Verwerfen von Teilproblemen. Dies erfordert angemessene Lastausgleichs-Mechanismen sowie eine Begrenzung des Kommunikationsaufkommens. Weiterhin ist das Problem sogenannter Anomalien im Beschleunigungsverhalten zu berücksichtigen.

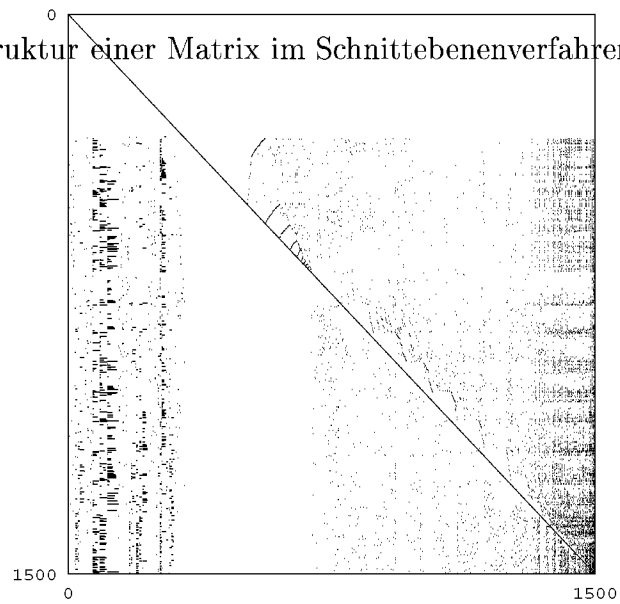
Von zentraler Bedeutung und Schwerpunkt der bisherigen Arbeit ist die effiziente Parallelisierung des Simplex-Algorithmus, als Kern des Schnittebenenverfahrens. Er basiert auf der Lösung von Gleichungssystemen mit typischerweise  $10^3 - 10^5$  Unbekannten und dünn sowie unregelmäßig besetzter Koeffizientenmatrizen. Eine erste Implementierung einer parallelen LU-Zerlegung für MIMD-Rechner mit verteiltem Speicher zeigte einen großen Einfluß der zugrundeliegenden Hardware- und Systemsoftware-Charakteristika auf die Effizienz.

Für die Realisierung des gesamten B&C-Verfahrens sind die Parallelisierungsansätze der verschiedenen Ebenen in einem einheitlichen Softwareent-

wurf zu vereinigen. Dazu bedarf es eines geeigneten parallelen Programmiermodells, das insbesondere der dynamischen Struktur des Problems gerecht wird. Ein solches wird für die Zielarchitektur Cray-MPP T3D in Zusammenarbeit mit dem Hersteller entwickelt.



Besetzungsstruktur einer Matrix im Schnittebenenverfahren



LU-Zerlegung der Matrix

## Weiterentwicklung von REDUCE

**Bearbeiter:** H. Melenk, W. Neun

**Kooperation:** Anthony C. Hearn (Leitung des Projekts, RAND, Santa Monica, Californien) 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. Die Entwicklung von REDUCE wurde Ende der sechziger Jahre von A.C. Hearn begonnen, und zwar zunächst für den Einsatz in der Physik (vor allem Hochenergiephysik). REDUCE entwickelte sich bald zu einem universellen Werkzeug für die verschiedensten Ingenieur- und Naturwissenschaften. Heute bietet REDUCE neben der klassischen Computeralgebra Hilfsmittel für zahlreiche mathematische Teilbereiche und für eine wachsende Zahl von Anwendungsbereichen.

Schon seit einigen Jahren hat A.C. Hearn aufgrund langjähriger Zusammenarbeit auswärtige Gruppen an der Entwicklung von REDUCE beteiligt. Eine dieser Gruppen ist die Abt. Symbolik des ZIB. Neben regelmäßigen persönlichen Kontakten bei Besuchen und Tagungen wird die Kommunikation in diesem Projekt primär über electronic Mail abgewickelt (gemeinsame Quelldatenbank mit wöchentlichem weltweiten Update).

Herausragendes Ereignis im Berichtsjahr war die Fertigstellung einer neuen Version REDUCE 3.4.1, die primär eine Abrundung der im Vorjahr erstellten "großen" Version darstellt, darüber hinaus aber auch substantielle mathematische Erweiterungen enthält, so den ersten Teil der im ZIB entwickelten Ausweitung des Löser für algebraische Gleichungssysteme.

Die weitere Entwicklung von REDUCE wurde in einem Treffen der REDUCE-Entwickler abgestimmt.

Die Beiträge des ZIB zu der Weiterentwicklung von REDUCE werden in erster Linie durch die Projekte getrieben; in vielen Fällen haben die Anforderungen jedoch auch massive Konsequenzen für das Kernsystem, insbesondere im Bereich der symbolisch-numerischen Verfahren, und ein erheblicher Vorzug von REDUCE ist hier die Offenheit des Systems und die Flexibilität der Entwicklergruppe.

## Symbolische Modellierung großer chemischer Reaktionssysteme

**Bearbeiter:** H. Melenk

**Kooperation:** J. Warnatz, F. Behrendt (Institut für Technische Verbrennung der Universität Stuttgart)

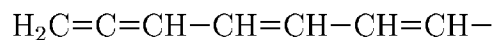
**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Bei der numerischen Simulation technischer Verbrennungsvorgänge zwecks Optimierung treten mit wachsender Verfeinerung der zugrunde gelegten Modelle immer mehr mathematisch zu berücksichtigende Komponenten auf, so daß es zunehmend schwieriger wird, die Modellgleichungen fehlerfrei von Hand aufzustellen. Andererseits ist es mit den im ZIB gepflegten symbolischen Methoden gut möglich, diesen Vorgang zu automatisieren und damit den Bereich der für die Simulation zugänglichen Reaktionssysteme deutlich zu erweitern.

Ausgehend von den molekularen Graphen der an der Verbrennung beteiligten chemischen Substanzen werden aus den chemischen Grundregeln Reaktionsprodukte ermittelt und die entsprechenden Reaktionsgleichungen mit ihren kinetischen Parametern ausgewiesen. Die "erzeugten" Substanzen werden dann in einem rekursiven Prozeß der Deduktion erneut zugeführt, so daß die Gesamtheit der aus der "Eingabemischung" entstehenden Reaktionsketten errechnet wird. Die Bearbeitung der Moleküle basiert auf Mustererkennung: Die für eine Reaktion "interessanten" Partien eines Moleküls werden mit Hilfe eines Musters beschrieben, das Konstanten und Variablen enthält und über den Graphen des Moleküls geschoben wird. Zur Steuerung wird eine Sprache in Form von wenn-dann-Regeln benutzt (ähnlich einem Expertensystem), in der die Graphen als 2-dimensionale Grafiken mit ASCII-Zeichen codiert sind.

Nachdem schon im Vorjahr mit der Bearbeitung zyklische Moleküle für die Pyrolyse von Kohlenwasserstoffen begonnen worden war, bildete dieser Bereich den Schwerpunkt der Entwicklungen. Die Revision der ersten generierten Reaktionsketten für die Pyrolyse durch die Chemiker führte zu einer erheblichen Ausweitung der Regeltypen und Prädikate.

Insbesondere wurden Reaktionen für die Konstruktion und den Zerfall von einfachen und mehrfachen Ringen mit häufigen Doppelbindungen aufgenommen, die eine Erweiterung des graphentheoretischen Instrumentariums und der Mustererkennung erfordern.

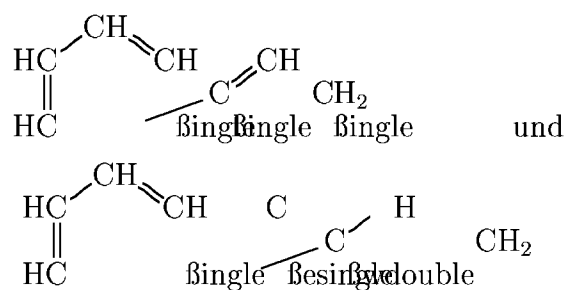
**Beispiel:** Aus dem durch Zerfall eines Ringes entstandenen Molekül



entsteht durch "temporäre Öffnung" der Doppelbindungen



woraus durch Ringschluß formal die Moleküle



zustände kommen. Diese Moleküle sind zwar chemisch äquivalent, jedoch sind ihre Graphen nicht isomorph, so daß für die Erkennung der Identität hier zusätzliche Transformationen zur Erzeugung einer kanonischen Form erforderlich sind.

## Symbolische Lösung algebraischer Gleichungssysteme

**Bearbeiter:** H. Melenk

**Kooperation:** H.M. Möller (Fernuniversität Hagen)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Ein wichtiger Schwerpunkt der Arbeiten an symbolischen Algorithmen im ZIB ist das Entwickeln von Methoden zur symbolischen Lösung nicht linearer algebraischer Gleichungssysteme. Nach dem derzeitigen Wissensstand ist der Buchberger-Algorithmus die beste algorithmische Grundlage für die polynomialen Systeme und die im ZIB im Laufe der letzten Jahre entwickelten Bausteine GROEBNER (Berechnen von Gröbner Basen für Polynomideale und verwandte Algorithmen) und SOLVEALG (automatisches Lösen algebraischer Systeme basierend auf GROEBNER) in REDUCE gestatten die vollautomatische Lösung polynomialer Systeme erweitert um trigonometrische Funktionen und Wurzelausdrücke. Aufgrund intensiver Diskussionen mit Anwendern des Paketes wurden weitere praxisorientierte Verfeinerungen vorgenommen, z.B. das automatische Erkennen und Eliminieren redundanter Lösungsteile mit dem Ziel eines möglichst kompakten Resultats. Daneben wurde die Weiterentwicklung auch massiv von dem Projekt "OCCAL" getrieben, das den Löser als Modul im Stil einer "Black Box" benutzt und besonders attraktive Einsatzfälle generiert. Das Echo der Anwender belegt, daß diese Bausteine nach wie vor zu den leistungsfähigsten allgemein zugänglichen symbolischen Lösern gehören.

## Automatische Entwicklung von Funktionen in Taylor- und Laurentreihen

**Bearbeiter:** R. Schöpf

**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 dies auch sehr einfach möglich durch fortgesetzte Differentiation und Einsetzen des Entwicklungspunktes. 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.

Ein Problem bei der genannten Methode ist das Auftreten nichtanalytischer Teilausdrücke in ansonsten analytischen Funktionen, wie zum Beispiel in der Funktion

$$\frac{x^{5/2}}{\ln(x+1) \times \tan x^{3/2}} .$$

Es sollen Methoden entwickelt werden, solche Fälle automatisch zu erkennen und entsprechend zu behandeln. Dies schließt insbesondere die symbolische Untersuchung isolierter Singularitäten ein. Falls möglich, sollen die dabei entwickelten Methoden auf die Behandlung von Funktionen mehrerer Variablen erweitert werden.

Im Berichtszeitraum wurde die Bestimmung der Reihe einer Funktion aus der Reihe ihrer Umkehrfunktion implementiert. Ferner wurde das Taylor-Paket in den Standardlieferumfang des Computeralgebrasystems REDUCE aufgenommen.

Mit Hilfe dieses Pakets konnten außerdem die notwendigen Bedingungen für die Koeffizienten eines Runge-Kutta-Verfahrens beliebiger Ordnung und Stufe allgemein abgeleitet werden, ohne daß es der sonst üblichen graphentheoretischen Methode bedarf.



## Gemischt symbolisch–numerische Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme mit Symmetrie

**Bearbeiter:** Karin Gatermann

**Kooperation:** B. Werner (Institut für Angewandte Mathematik, Universität Hamburg), B. Fiedler (Math. Inst. Universität Stuttgart)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** In Naturwissenschaft und Technik treten Symmetrien durch natürliche geometrische Gegebenheiten auf und gehen deshalb in die Modellierung von Problemen als parameterabhängige nichtlineare Gleichungssysteme bzw. Differentialgleichungssysteme ein. Die Symmetrienausnutzung bedeutet für die numerische Behandlung solcher equivarianter Systeme wesentliche Vorteile bzgl. Effizienz, Sicherheit und Zuverlässigkeit. Das Ziel dieses Projektes ist die Automation und Organisation der numerischen Ausnutzung dieser Eigenschaft für beliebige Symmetrien.

Dieses Projekt ist eine Fortsetzung eines Projektes von 1991, in dem Andreas Hohmann wesentlich zur Implementation beigetragen hat. Ausgehend von dem bestehenden gemischt symbolisch–numerischen Code SYMCON wurde der symbolische Teil komplett neu gestaltet, erweitert und in zwei Teile zerlegt. Der erste Teil ist der Gruppentheorie gewidmet, die nicht vom Problem abhängt. Hier wurden wesentliche Fortschritte hinsichtlich der Automation gemacht. Im problemabhängigen REDUCE–Teil ist es gelungen, die Eigenschaft der Quasi–Permutationseigenschaft auszunutzen, was Effizienzsteigerung für den numerischen Teil bedeutet und den Engpaß des Compilationschrittes erweitert. Die Ausnutzung der Permutationseigenschaft zeigt die Überlegenheit der Computer Algebra, die hier Aufgaben eines Mathematikers übernimmt. Auch der numerische Teil wurde um einige Berechnungen erweitert. Die komfortablere Benutzeroberfläche wurde auf das X–Window System umgestellt.

Die neue Version von SYMCON steht seit Oktober 1992 der Allgemeinheit unter anonymous ftp zur Verfügung und fand weltweit Beachtung.

### Literatur

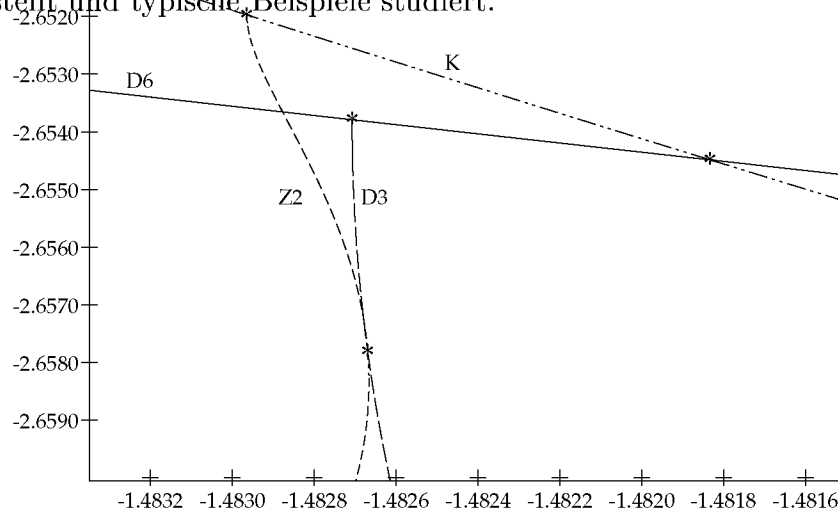
- [1] K. Gatermann: *Computation of Bifurcation Graphs*. Konrad–Zuse–Zentrum für Informationstechnik Berlin, Preprint SC 92–13 (1992), submitted to *Exploiting Symmetry in Applied and Numerical Analysis*. E. Allgower, K. Georg, R. Miranda (Eds.), 1993.

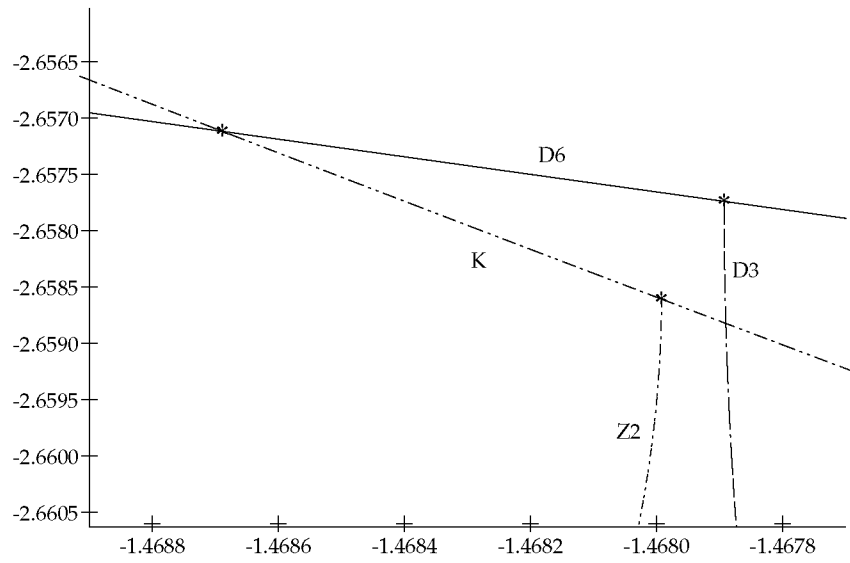
## Symmetriebrechung bei 2-parametrischen Gleichungssystemen

**Bearbeiter:** Karin Gatermann

**Kooperation:** B. Werner (Institut für Angewandte Mathematik, Universität Hamburg)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Gegensatz zum Projekt “Gemischt symbolisch-numerische Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme mit Symmetrie” werden hier Gleichungssysteme betrachtet, die von 2 Parametern abhängen. Interaktionen von symmetriebrechenden Verzweigungspunkten sind in 2-Parameter Systemen generisch. Die entscheidende Aussage ist, daß durch die Interaktion auf den abgehenden sekundären Zweigen sekundäre Verzweigungspunkte entstehen. Dieses allgemein gültige Phänomen wurde für verschiedene Symmetrien in unterschiedlichen Ausprägungen studiert. Die Existenz von sekundären Verzweigungspunkten hängt von einer Interaktionsbedingung ab. Hinreichende und notwendige Bedingungen wurden dafür aufgestellt und typische Beispiele studiert.





Symmetrische Interaktion beim hexagonalen Stabwerksproblem –  
 Verzweigungsdiagramm für  $x_9$  versus  $\lambda$  für Werte des zweiten Parameters  
 $\alpha = 0.665$  und  $\alpha = 0.650$

## Kalkülsystem für Probleme der Optimalen Steuerung

**Bearbeiter:** R. Schöpf, P. Deuffhard

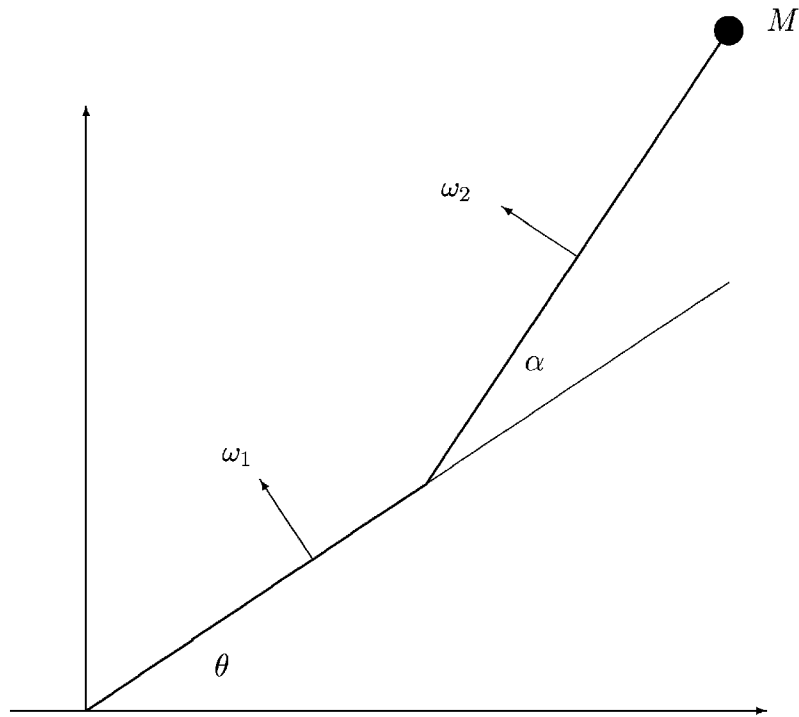
**Kooperation:** H. Oberle (Institut für Angewandte Mathematik, Universität Hamburg)

**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. 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.

Daher wurden an verschiedenen Orten Ansätze unternommen, einen Teil der Aufgabe automatisch lösen zu lassen. Im Gegensatz dazu soll ein Kalkülsystem nicht einfach nur bekannte Lösungsschritte der Reihe nach vollziehen, sondern eine Analyse der Problemstellung durchführen, ohne daß von vornherein der Gang der Rechnung bekannt wäre. Insbesondere sollen dabei auch für die anschließende numerische Behandlung wesentliche Informationen gewonnen werden, so zum Beispiel über die Art der optimalen Steuerung, die sich wiederum in einer automatischen Wahl der Schaltstruktur für die indirekten Methoden niederschlagen könnte. Im Berichtszeitraum wurde der vorliegende Prototyp des Kalkülsystems OCCAL im Hinblick auf singuläre Steuerungen weiterentwickelt, so daß jetzt auch bei Problemen solcher Art die Steuerung vollautomatisch bestimmt werden kann. Vorträge und sich daraus ergebende Diskussionen lieferten Anregungen Impulse für die zukünftige Entwicklung. Um die Zusammenarbeit mit Anwendern zu erleichtern, wurde außerdem eine Systemversion erstellt, die in Verbindung mit dem Computeralgebrasystem REDUCE überall lauffähig und von den Autoren erhältlich ist. Wie auch im vergangenen Jahr flossen die dabei gewonnenen Erfahrungen auch in die Weiterentwicklung des Systems REDUCE selbst ein.

- [1] R. Schöpf, P. Deuffhard: OCCAL – a mixed symbolic–numeric Optimal Control CALCulator. Zur Publikation eingereicht bei: Computer Algebra Applications in Science, R. Liska and S. Steinberg, Editors

**Beispiel:** Singuläre Steuerung eines zweiarmigen Roboters (Bryson, Weinreb, Oberle)



## Formale Entwicklung analytischer Funktionen in unendliche Laurent-, Puisieux- und Potenzreihen

**Bearbeiter:** W. Neun

**Kooperation:** Wolfram Koepf (FU Berlin)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Der von W. Koepf entwickelte Algorithmus liefert eine Zuordnung zwischen analytischen Funktionen und unendlichen Reihen. Also im einfachsten Falle:

$$e^x \iff \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}$$

Das Neuartige dieses Algorithmus ist, daß auf Heuristiken verzichtet werden kann und keinerlei Tabellensuche stattfindet. Im Berichtszeitraum wurde an der Implementierung des Algorithmus in REDUCE begonnen; eine erste Version soll im Frühjahr 1993 einsetzbar sein, anschließend sollen Erweiterungen bzgl. der Menge der zu bearbeitenden Funktionen durchgeführt werden.

Die Implementierung in REDUCE ist aufwendig, da einige Basisoperationen, wie etwa das Lösen verschiedener Typen von Differenzgleichungen zunächst zur Verfügung gestellt werden müssen. Die symbolische Berechnung von Grenzwerten in REDUCE bedarf ebenfalls einiger Verbesserungen.

- [1] W. Koepf: *Power Series in Computer Algebra*. J. Symb. Comp **13** (1992)

## Symbolische definite Integration analytischer Funktionen, auch mit unendlichem Integrationsintervall

**Bearbeiter:** W. Neun

**Kooperation:** V. Adamchik (Wolfram Research Inc.), S. Kameny (RAND)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die symbolische definite Integration ist im allgemeinen schwierig, wenn das Integrationsintervall unendlich ist oder wenn die Funktion im Integrationsintervall Pole aufweist. Zur Zeit gibt es noch keinen algorithmischen Ansatz, der für alle möglichen Fälle die Existenz des Integrals und dessen Wert liefert. Der im Rahmen dieses Projektes verfolgte Ansatz erlaubt es, eine große Anzahl von Integralen zu bestimmen. Es werden behandelt Integrale des Typs

$$\int_0^{\infty} (x^{\alpha} \times f_1(x) \times f_2(x)) dx$$

wobei  $f_1$  oder  $f_2$  eine Heaviside Funktion sein darf und somit ein endliches Integral berechnet werden kann. Falls für  $f_1$  und  $f_2$  eine Mellin Transformation (Meijer's G Funktion) bekannt ist, kann das obige Integral berechnet werden. Das Resultat ist seinerseits eine G Funktion und muß rücktransformiert werden.

Aus diesem Projekt sind zahlreiche Teilaufgaben bereits erfolgreich abgeschlossen worden:

- Simplifizierung häufig auftretender spezieller Funktionen als Teil des Projektes "Numerische Auswertungen in symbolischer Systemumgebung"
- Simplifizierung von Verallgemeinerten Hypergeometrischen Funktionen
- Simplifizierung von Meijer's G Funktionen

Weiterhin zu bearbeiten ist die Automatisierung der Mellin Transformation einer gegebenen Funktion; das wird zur Zeit in nicht befriedigender Weise erledigt. Außerdem muß noch ein Algorithmus gefunden werden, der die Existenz des Integrals sicherstellt.

### 3.3 Anwendungsprojekte

#### Effiziente numerische Simulation von Verbrennungsprozessen

**Bearbeiter:** P. Deuffhard, J. Lang, U. Nowak, A. Walter

**Kooperation:** U. Maas, J. Warnatz (Institut für Technische Verbrennung, Universität Stuttgart), G. Eigenberger, J. Frauhammer, U. Nieken (Institut für Chemische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart)

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Rahmen der Zusammenarbeit mit dem Institut für Chemische Verfahrenstechnik sollen räumlich eindimensionale Modelle zur katalytischen Abgasreinigung in Festbettreaktoren simuliert werden. Im Berichtszeitraum wurde der am ZIB entwickelte Experimentalcode PDEX1 (siehe Grundlagenprojekt “Adaptive Linienmethoden für parabolische Systeme in einer Raumdimension”) für die dabei auftretenden speziellen Bedürfnisse adaptiert und erweitert. So können nun auch Modelle mit inneren Randbedingungen durch ein Verfahren mit automatischer Wahl von Orts- und Zeitschrittweite effizient simuliert werden. Das entwickelte Softwarepaket [1] erlaubt eine robuste und schnelle Simulation einer ganzen Klasse von typischen Anwendungsproblemen bei gleichzeitig einfacher Handhabung durch den Ingenieur. Eine gemeinsame Publikation, in der die Vorteile der adaptiven Methode im Vergleich zu dem klassischen Ingenieursvorgehen herausgearbeitet sind, wird in Kürze erscheinen.

Für viele Verbrennungsprozesse ist jedoch eine räumlich zweidimensionale Modellierung unerlässlich. Hier bieten adaptive Multilevel-Finite-Elemente-Verfahren, wie sie am ZIB in mehreren Grundlagenprojekten Gegenstand von Forschung und Entwicklung sind, langfristig die beste Perspektive. Im Berichtszeitraum wurden zunächst die Arbeiten an einen raum- und zeitadaptiven 1-D-Forschungscode zu einem gewissen Abschluß gebracht [2]. So konnte z.B. für das Dwyer-Sanders Flammenausbreitungsmodell, das bereits wesentliche Seiten der Entstehung und Ausbreitung von Flammenfronten wiedergibt, auch für stark instationäre Flammenbewegungen eine hohe Auflösung der typischen steilen und wandernden Verbrennungsfronten erreicht werden. Der zugrundeliegende Algorithmus zur Lösung derartiger Probleme kann somit als gesichert angesehen werden. Die Erweiterung auf den räumlich zweidimensionalen Fall und die effiziente Behandlung mehrerer Spezies steht allerdings noch aus und ist als nichttrivial anzusehen. In der zweiten Berichtshälfte lag der Schwerpunkt der Arbeiten in der Entwicklung neuer Datenstrukturen, die es ermöglichen werden, auch Probleme mit



## Zweistufiger Autoabgaskatalysator (Modellierung T. Kirchner)

Rohrreaktor mit periodisch wechselnder Strömungsumkehr  
(Matros-Reaktor, Modellierung U. Nieken), hier mit der Möglichkeit der  
Heiß- oder Kaltgaseinspeisung oder des Mittenabzugs von heißem  
Reaktionsgas

zahlreichen Spezies effektiv zu rechnen. Ebenso wird die Erweiterung auf den räumlich zweidimensionalen Fall durch diese teilweise Neuimplementierung stark vereinfacht. Bedingt durch den Weggang eines Mitarbeiters dieses Projektes konnten die Arbeiten nicht so schnell wie gewünscht vorangetrieben werden.

### Literatur

- [1] J. Frauhammer: *Numerische Lösung von eindimensionalen parabolischen Systemen mit adaptiven Gittern*. Diplomarbeit Nr. 462, Institut für Chemische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart
- [2] J. Lang, A. Walter: *A Finite Element Method Adaptive in Space and Time for Nonlinear Reaction-Diffusion-Systems*. IMPACT of Comp. Sci. Eng. **4**, p. 269–314 (1992)

## Numerische Simulation von Relaxationsoszillationen bei Laserprozessen

**Bearbeiter:** Ch. Schütte

**Kooperation:** M. Dinand (Universität Paderborn)

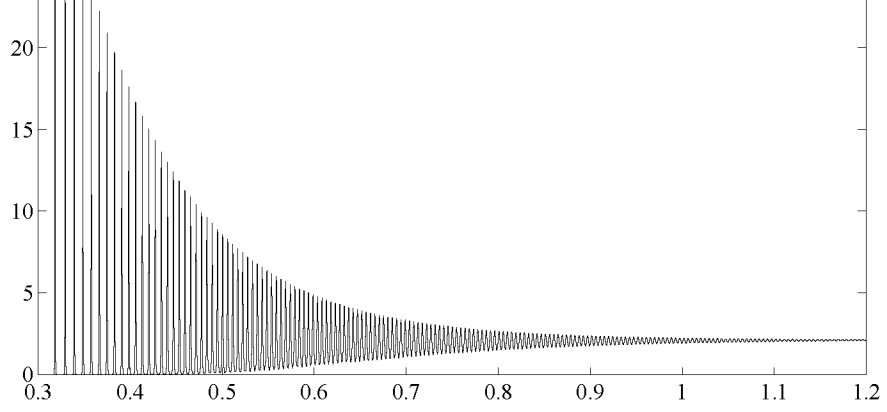
**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Bei der technischen Konzeption von Wellenleiter-Lasern kommt der Simulation des Einflusses von technischen Parametern und äußerer Steuerung eine wichtige Rolle zu.

Da bei der physikalischen Modellierung des Laserprozesses aber Unsicherheiten durch notwendige Abstraktionen auftreten, ist es besonders wichtig, die erstellten Modellgleichungen numerisch verlässlich und schnell lösen zu können. Bei der Beschreibung des Einschwingvorganges eines stationären Laserzustandes erhält man hochdimensionale Differentialgleichungssysteme, die phasenweise sehr steif sind. An der numerischen Lösung dieser Systeme mit wenig ausgefeilten Methoden scheiterten bislang alle Bemühungen um Fortschritte im Modellierungsbereich. Das Anwendungsprojekt hat zum Ziel, das im Softwareprojekt "Modulare Implementierung von Extrapolationsverfahren in C" entwickelte Programmpaket für diese Probleme zu nutzen.

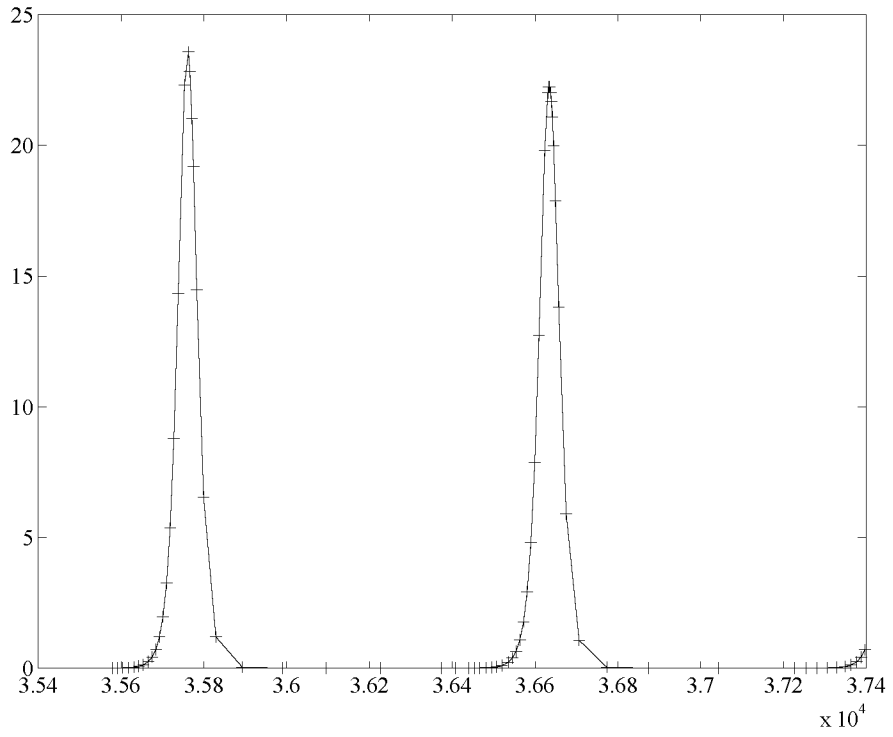
Durch den Einsatz des Integrators EULSIM konnte eine Modellierung für Relaxationsoszillationen in Laserprozessen in *Er*-dotiertem  $Ti : LiNbO_3$  erstellt werden, deren Ergebnisse in sehr guter qualitativer Übereinstimmung mit den experimentellen Beobachtungen stehen. Die Abbildungen zeigen die Laseramplitude aufgetragen gegen die Zeit.

### Literatur

- [1] M. Dinand, Ch. Schütte, R. Brinkmann, W. Sohler, H. Suche: *Relaxation Oscillations in Er-Diffused Ti : LiNbO<sub>3</sub>-Waveguide Lasers*. Erscheint 1993



1



Ausschnitt aus der oberen Abbildung. Markiert sind die Startpunkte der einzelnen Zeitschritte des steifen Integrators EULSIM.

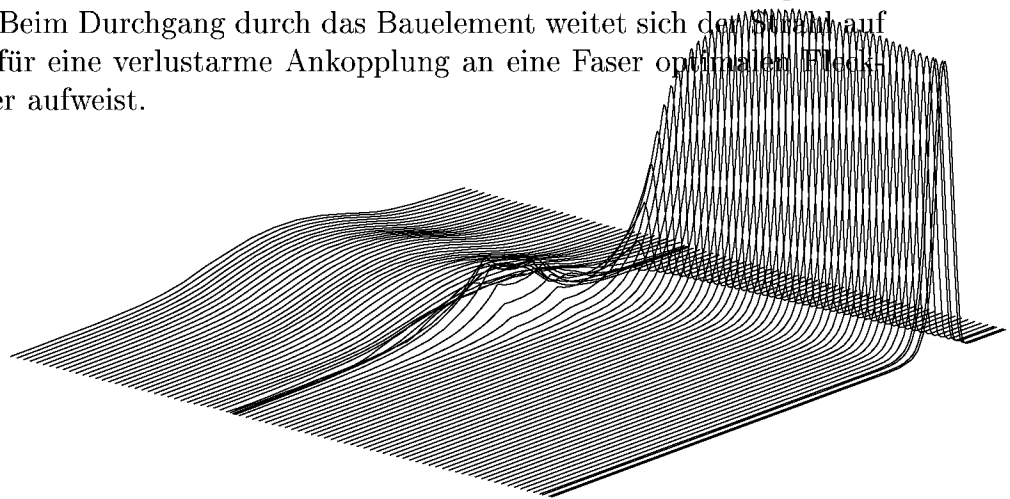
## Wellenausbreitung in Komponenten der Integrierten Optik

**Bearbeiter:** F. Schmidt, F.A. Bornemann, P. Deuffhard

**Kooperation:** H.-P. Nolting, Heinrich-Hertz-Institut Berlin

Das Projekt wurde durch die Deutsche Bundespost TELEKOM gefördert.

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Berichtszeitraum konzentrierte sich die Arbeit auf die Anwendung des 1992 entwickelten adaptiven Multilevel-Programms AMIGO zur Lösung von praxisrelevanten Problemen. Die wichtigste dieser Aufgaben betraf die Optimierung eines neuartigen, im Heinrich-Hertz-Institut erfundenen Wellenleiter-Tapers. Taper dienen als Übertragungselemente zwischen den Glasfasern und dem Chip. Die Simulationen zeigten, daß sich die zugrunde gelegten physikalischen Funktionsprinzipien mit beherrschbaren Technologien durchaus in einem Bauelement realisieren lassen können. Allerdings mußten die ursprünglichen, von klassischen Entwurfsverfahren geprägten Vorstellungen von der optimalen Geometrie des Tapers deutlich geändert werden, um zu einem funktionsfähigen Bauelement zu gelangen. Die ersten technologischen Schritte zur Herstellung des neuen Bauelements wurden bereits durchgeführt. Die Abbildung zeigt die Intensitätsverteilung über einem lateralen Schnitt durch die Komponente. Auf der rechten Seite wird ein schmaler Laserstrahl hoher Intensität in den Taper eingekoppelt. Beim Durchgang durch das Bauelement weitet sich der Strahl auf bis er den für eine verlustarme Ankopplung an eine Faser optimalen Fleckdurchmesser aufweist.



Aufweitung des Laserstrahls (rechts) bis zum Fleckdurchmesser eines Faserstrahls (links)

## Simulation von Aufheizprozessen in Hochleistungstransistoren

**Bearbeiter:** F. Bornemann, R. Roitzsch, P. Deuffhard

**Kooperation:** A. Maurer, G. Löbel (Siemens AG, Erlangen)

**Beschreibung:** In Kooperation mit der Siemens AG sollte an einem typischen, dort anfallenden Beispiel die Leistungsfähigkeit des adaptiven zeitabhängigen FEM-Programms KASTIO2 (F. Bornemann) gegenüber den zur Verfügung stehenden kommerziellen Programmen, wie z.B. ADINA-T, getestet werden. Das Beispiel weist immense Skalenunterschiede sowohl im Ort als auch in der Zeit auf. Die Grundgittererzeugung konnte mit dem Programm BOXES von R. Kornhuber und R. Roitzsch durchgeführt werden und führte zu einem problemangepaßten Gitter mit 354 Knoten. Demgegenüber hat das von Hand für ADINA-T erzeugte Gitter 1596 Knoten. KASTIO2 rechnet mit variablen Zeitschritten und adaptiert das Ortsgitter in der wesentlichen Aufheizphase auf 583 Knoten. ADINA-T hat Probleme, eine numerisch stabile Lösung in der Disspationschicht zu berechnen; KASTIO2 erfüllt stets das diskrete Maximumsprinzip. Aus dem internen Abschlußbericht von Siemens sei zitiert

- Die Vorbereitungszeit für die Dateneingabe ist bei KASTIO2 erheblich kleiner (25 Minuten gegenüber 12 Stunden)
- Das Vertrauen in eine einmal gefundene Lösung ist bei KASTIO2 höher
- Die Rechenzeiten sind bei KASTIO2 niedriger (ungefähr einen Faktor 3)

Aus diesem erfolgreichen Abschluß wird sich eine weiterreichende Kooperation ergeben.

## Hyperthermie-Planung

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

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

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Rahmen der klinischen Hyperthermie sollen Krebstumore 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.

Die Schwerpunkte der Arbeit im Jahre 1992 lagen bei der Weiterentwicklung der 3-D-Gittergenerierung und der Feldberechnung.

*Gittergenerierung:* Die meisten Teilaufgaben der Gittergenerierung wurden automatisiert; etwa die Zuordnung der Konturen von Schicht zu Schicht, die Generierung von Randpunkten auf den Konturen, die Generierung von 2-D-Gittern und die Tetraedergenerierung für Teilgebiete. Für die Triangulierung der 3-D-Oberflächen der Gewebekompartimente, die im Falle von Verzweigungen nicht vollständig automatisch ablaufen kann, wurde eine graphische Oberfläche geschaffen, die eine interaktive graphische Eingabe der benötigten Daten ermöglicht. Es wurde ein 3-D-Patientenmodell für die Simulation einer regionalen Hyperthermie erzeugt. Das Modell besteht aus 2.814 Knoten und 14.267 Tetraedern. Abb. 1a zeigt die äussere Oberfläche des Modells, Abb. 1b die darin enthaltenen knöchernen Strukturen. Die Abbildung demonstriert, daß das Programm in der Lage ist, ein komplexes geometrisches Objekt wie den Beckenknochen zu diskretisieren.

*Feldberechnung:* Die 3-D-Feldverteilung wird mittels eines Integralgleichungsverfahrens auf Tetraedergittern als Lösung der sogenannten Volume Surface Integral Equation berechnet. Innerhalb des Berichtszeitraums wurde die

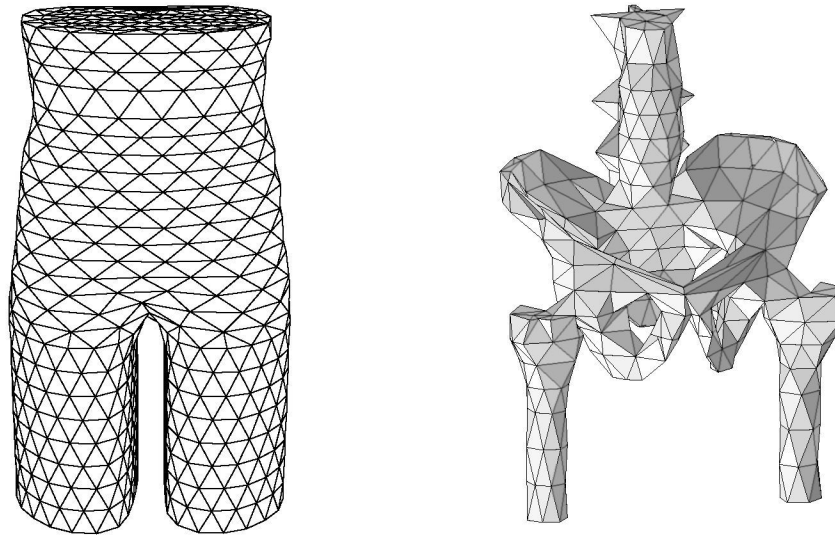


Abb. 1: 3-D-Patientenmodell für regionale Hyperthermie  
 a) äußere Oberfläche b) knöcherne Strukturen im Bereich des Beckens

Behandlung von Mehrmedien-Ecken und -Kanten weiterentwickelt, so daß nun beliebige 3-D-Konfigurationen erfasst werden können. Damit wurde es möglich, Feldberechnungen für das obengenannte 3-D-Patientenmodell durchzuführen. Das Ergebnis einer solchen Berechnung zeigt Abb. 2. Im Längsschnitt des Modells erkennt man den großen Einfluß, den die Grenzflächen zwischen Gewebekompartimenten mit unterschiedlichen elektrischen Eigenschaften (Fett-, Muskel- und Knochengewebe) auf die Feldverteilung haben. Solche Grenzflächeneffekte können zu lokalen Erwärmungen des Gewebes ("hot spots") führen, wie sie auch aus klinischen Beobachtungen bekannt sind. Diese Effekte treten in 2-D-Simulationen nicht auf; um sie zu erfassen, bedarf es der 3-D-Simulation.

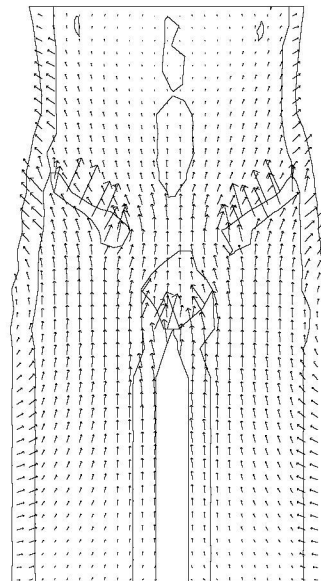
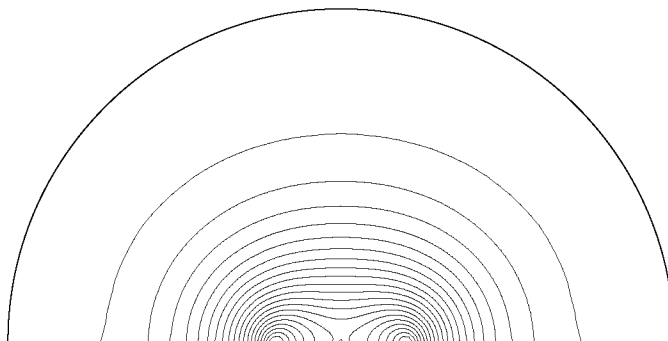


Abb. 2: Elektrische Feldverteilung für einen Längsschnitt des Patientenmodells

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

**Bearbeiter:** J. Ackermann, R. Roitzsch

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die quantenchemische ab initio Behandlung von Mehr-Elektronen 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. Da im Hause seit Jahren Entwicklungen in diesem Bereich (KASKADE) betrieben werden, waren erste Tests für diese Problemklasse einfach möglich. Durch eine adaptive lokale Verfeinerung des Gitters sollte dabei nicht nur die sonst notwendige Wahl eines problemangepaßten Koordinatensystems überflüssig und der Aufwand für die Lösung des Problems minimiert, sondern auch erstmals durch den Fehlerschätzer der "basis truncation error" zugänglich werden. Als erster Schritt wurde eine FE-Approximation mit linearen Ansatzfunktionen gewählt. Eigenwerte und Eigenfunktionen wurden mit Hilfe inverser Vektoriteration berechnet. Dabei erwies sich die LU-Zerlegung einer nach Cuthill McKee umgeordneten (Hamilton-)Matrix als beschleunigender Faktor. Bei adaptiver Verfeinerung wird für das  $\text{H}_2^+$  Molekül eine Genauigkeit von  $5 \cdot 10^{-5}$  mit 26000 Punkten erreicht. Der geschätzte Fehler liegt immer in der Größenordnung über dem wahren Fehler. Allerdings wird mit wachsendem Level die Verfeinerung fast uniform und die Effektivität konvergiert gegen 1. Für eine gewünschte Genauigkeit von  $10^{-6}$  wäre damit ein Gitter mit ca.  $10^6$  Punkten notwendig. Solch ein Aufwand ist mit Sicht auf kompliziertere Systeme zu hoch. Nahe liegend ist jedoch, daß wesentlich genauere Ergebnisse mit Ansatzfunktionen höherer Ordnung erzielt werden können. Die entsprechenden Erweiterungen dazu stehen inzwischen in KASKADE zur Verfügung.



Die Grundzustandswellenfunktion des  $\text{H}_2^+$  Moleküls



## Lösung von Wärmeleitungsproblemen in der Bauphysik

**Bearbeiter:** R. Roitzsch, R. Kornhuber

**Kooperation:** R. Müller, R. Rudolphi (BAM)

**Beschreibung der Forschungsarbeiten:**

Die stationäre Wärmeleitungsgleichung für die Temperatur  $u$

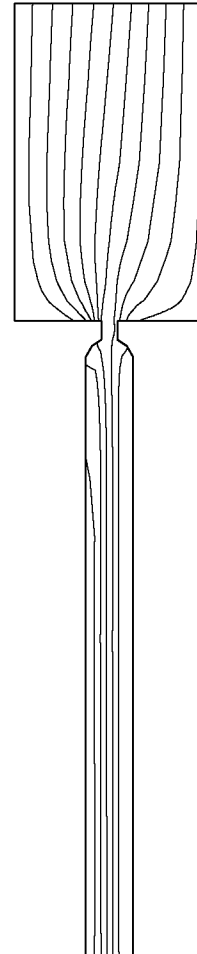
$$-\frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 0$$

mit den Neumann- und Cauchy-Randbedingungen

$$\begin{aligned} \text{grad } u \cdot n &= 0 \\ \lambda \text{ grad } u \cdot n + \alpha u &= \alpha v \end{aligned}$$

wurde mit KASKADE gelöst. Dabei sind  $\lambda$  die materialabhängige Wärmeleitungs-konstante,  $v$  die vorgegeben Temperaturen und  $\alpha$  die Wärmeübergangskoeffizienten am Cauchy-Rand.

Die Beispiele aus [1] und [2] wurden zur Kontrolle der Ergebnisse verwendet. Das nebenstehende Beispiel aus [1] zeigt die Isothermen bei Glas-auf-Glas-Randverbund.



### Literatur

- [1] R. Rudolphi, R. Müller: *Ein kurzer Überblick über Versuchs- und Rechenmethoden zum wärmeschutztechnischen Verhalten von Fenstern*. Amts- und Mitteilungsblatt der BAM, **15**, (1), pp. 19–25 (1985)
- [2] R. Rudolphi, R. Müller: *Zur numerischen Ermittlung des Wärmedurchlaßwiderstandes von Hausschornsteinen*. Bauphysik, **11**, (6), pp. 211–218 (1989)

## Diskrete Galerkin-Methode in der Anwendung

**Bearbeiter:** J. Ackermann, M. Martin, U. Nowak

**Kooperation:** Mohamed el-Gamal, J. Warnatz, (Universität Stuttgart, Institut für Technische Verbrennung)  
P. Marquardt, K.H. Reichert (TU Berlin, Institut für Technische Chemie)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die Anwendungsbereiche der diskreten Galerkin Methode sind vielfältig. Mit dem am Konrad-Zuse-Zentrum entwickelten Programmpaket MACRON ist diese Methode einfach für praktische und praxisrelevante Fragestellungen nutzbar. Die Formulierung der Modellvorstellung des Anwenders durch Reaktionssysteme in der üblichen chemischen Notation macht auch komplexe Systeme einer numerischen Simulation zugänglich. Die Modellierung und Simulation mit MACRON kann im allgemeinen vom Benutzer selbständig durchgeführt werden. Für spezielle Anwendungen wurden im Berichtszeitraum zusätzliche Polymerreaktionen implementiert und die Flexibilität der Ausgaberroutinen erweitert. Diese Erweiterungen wurden für folgende Anwendungen benutzt.

Die Modellierung vom Ruß wachstum während der Verbrennung von Acetylen in einer Explosionskammer (Verbrennungsmotor) wird am Institut für Technische Verbrennung der Universität Stuttgart untersucht und modelliert. Das Modell berücksichtigt mehrere hundert chemische Reaktionen, thermodynamische Effekte sowie die Bildung von Rußteilchen durch zyklische Prozesse mit mehreren beteiligten Makroteilchenarten. Die Ergebnisse der Simulation der zeitlichen Entwicklung des Modells mit MACRON wird mit entsprechenden experimentellen Resultaten verglichen und zur Verfeinerung oder Korrektur des theoretischen Modells benutzt. Die Entwicklung solcher Modellvorstellungen von den Vorgängen während der Verbrennung ist Voraussetzung für eine effektive Optimierung in diesem Bereich.

Ein weiteres Beispiel ist die Untersuchung der Polymerisation von Polybutadien mit einem neuartigen Ziegler-Natta-Katalysator auf der Basis von Neodym. Polybutadien wird als Synthetikgummi für die Herstellung von Autoreifen verwendet und am Institut für Technische Chemie der TU Berlin in Zusammenarbeit mit der Bayer AG Dormagen untersucht. Durch die Gelpermeationschromatographie von während der Polymerisation gezogenen Proben werden die Molmassenverteilungen zu diskreten Zeitpunkten gemessen. Zum Verständnis und zur Optimierung der ablaufenden Prozesse sollen diese mittels eines auf einem Reaktionsmechanismus basierenden Modells beschrieben werden. Auch hier sind die Ergebnisse der Simulation mit MACRON im Vergleich mit den experimentellen Daten ein nützliches Hilfsmittel.

## **Simulation und Optimierung von flexiblen Fertigungssystemen**

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

**Kooperation:** Siemens Nixdorf Informationssysteme, Augsburg

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Bei modernen Fertigungssystemen, die gemäß einem CIM/CAI-Konzept konzipiert und realisiert worden sind, besteht im täglichen Produktivbetrieb ein erheblicher Bedarf an Echtzeit-Optimierungsverfahren, von denen viele mit Methoden der Kombinatorischen Optimierung bearbeitet werden können. Es handelt sich hier meist um äußerst komplexe Systeme, in denen ohne weitere Hilfsmittel nicht überschaubar ist, welchen Einfluß die Änderung einer Komponente auf das Gesamtsystem haben wird. Es ist deshalb notwendig das Gesamtsystem in geeigneter Art und Weise zu modellieren. Da es bei dem heutigen Forschungsstand nicht zu erwarten ist, ein mathematisches Modell für solch komplexe Fertigungssysteme zu finden, die die Abläufe und Interdependenzen hinreichend genau beschreiben, entwickelten und implementierten wir das Simulationspaket AMSEL, welches ein Framework zur ereignisorientierten Simulation von Materialflußsystemen ist. Ein weiterer Vorteil eines Simulationsprogramms ist, daß mittels dieses Programms auch Experimente durchgeführt werden können, die im realen System zu gefährlich, zu teuer oder (noch) technisch unmöglich sind. Aufbauend auf dem Simulationsprogramm für den Materialfluß in einem PC-Werk der Siemens Nixdorf in Augsburg wurde ein Programmmodul entwickelt, welches die Fahrbewegungen eines Bediengeräts in einem Hochregallager optimiert. Anhand des Simulationsprogramms wurde im Hochlastbetrieb eine Einsparung von 30% der Leerfahrten nachgewiesen. Dieses Modul ist seit Anfang 1992 bei Siemens Nixdorf in sechs Hochregallagern mit Erfolg im täglichen Produktivbetrieb in Einsatz. Die erwartete Einsparung konnte auch im Produktivbetrieb nachgewiesen werden. Weitere Optimierungsansätze, die momentan bearbeitet werden, sind u.a. die optimale Lagerplatzvergabe in Hochregallagern und die optimale Fahrauftragszuweisung für ein fahrerloses Transportsystem.

### **Literatur**

- [1] A. Abdel-Hamid: *Optimization aspects of automatic storage systems*. Dissertation Technische Universität Berlin, in Vorbereitung
- [2] N. Ascheuer: *On-line optimization of flexible manufacturing systems*. Dissertation Technische Universität Berlin, in Vorbereitung
- [3] N. Ascheuer: *Das Simulationspaket AMSEL*. Dokumentation, ZIB-Berlin 1992

## Travelling Salesman Probleme mit Nebenbedingungen

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

**Kooperation:** M. Jünger (Institut für Informatik, Universität zu Köln), G. Reinelt (Institut für Angewandte Mathematik, Universität Heidelberg), M. Fischetti (Universität Bologna)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** In vielen praktischen Anwendungen tritt das inzwischen klassische “Travelling Salesman Problem” (Rundreiseproblem) nicht in seiner reinen Form auf, sondern in Zusammenhang mit weiteren Nebenbedingungen. Eine Art von Einschränkungen sind z.B. **Präzedenzrelationen**, die fordern, daß ein gewisser Ort erst besucht werden kann, wenn ein anderer schon besucht wurde. Sie 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. Genauso sind in manchen praktischen Situationen **Zeitfenster** vorgegeben, die besagen, daß ein gewisser Knoten nur in einen spezifizierten Zeitabschnitt besucht werden darf. Solche Zeitfenster treten bei der Fahrzeugeinsatzplanung auf, wo gewisse Kunden nur zu gewissen Zeiten erreichbar sind, aber auch bei der Abschätzung von “guten” oder “optimalen” Strategien zur Lösung von On-line Traveling Salesman Problemen. Wir verwenden einen polyedrischen Ansatz, um diese Probleme im Rahmen eines Branch & Cut-Frameworks optimal zu lösen. Zur Bestimmung zulässiger Lösungen änderten wir TSP-Heuristiken dahingehend ab, daß die Präzedenzrelationen beachtet werden. Erste Rechentests zeigten jedoch, daß selbst Verfahren, die für das TSP gute Ergebnisse liefern, oft sehr schlechte Lösungen konstruieren. Wir arbeiten momentan an der Implementierung zufriedenstellender Verfahren. Daneben versuchen wir durch die Entwicklung weitere Separieringroutinen die unteren Schranken zu verbessern. Eine Beobachtung war, daß die Präzedenzrelationen sowohl theoretische als auch rechentechnische Schwierigkeiten mit sich bringen. So war 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. Wir haben die Hoffnung, daß durch Verbesserung des Verfahrens die uns vorliegenden praktischen Problembeispiele von bis zu 350 Knoten gelöst werden.

## Literatur

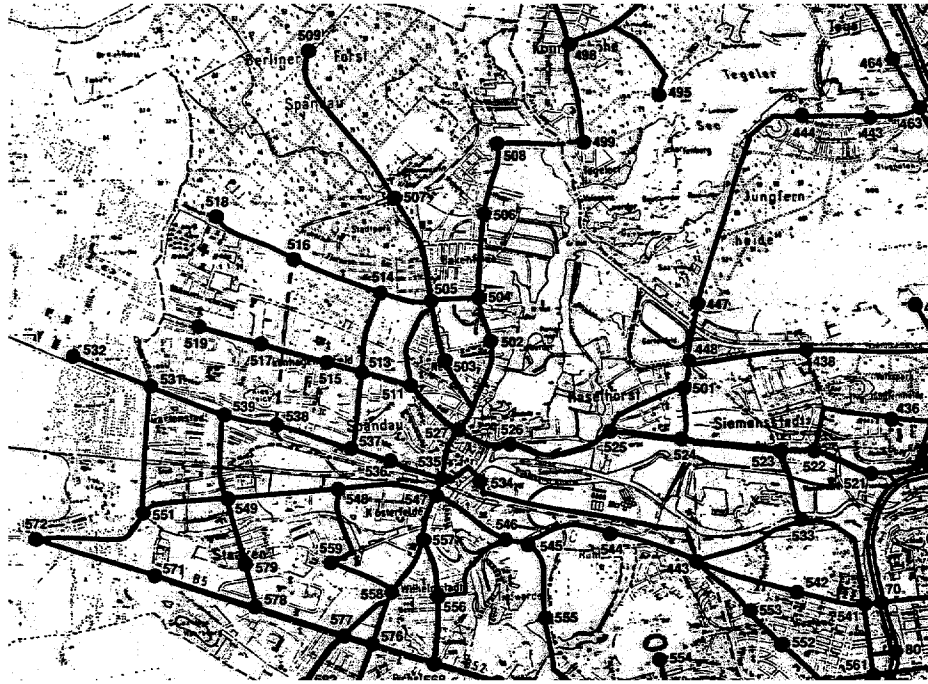
- [1] N. Ascheuer, L. Escudero, M. Grötschel, M. Stoer: *A cutting plane approach to the sequential ordering problem (with applications to job scheduling in manufacturing)*. erscheint im *SIAM Journal on Optimization*, 2/93.
- [2] E. Balas, M. Fischetti, W. R. Pulleyblank: *The precedence constrained asymmetric travelling salesman polytope*. Working paper, April 1992, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, USA.

## **Telebus-Projekt**

**Bearbeiter:** R. Borndörfer, M. Grötschel, F. Klostermeier, Ch. Küttner

**Kooperation:** Berliner Zentralaussschuß für Soziale Angelegenheiten (BZA)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Der BZA ist Betreiber des Telebus-Fahrdienstes für Behinderte. Berechtigte Behinderte können hierbei dem BZA über eine Telefonzentrale ihre Fahrtwünsche mitteilen, die je nach Art der Behinderung und des Umfangs der erforderlichen Ein- und Ausstiegshilfe mit verschiedenen Typen von (Spezial-)Fahrzeugen mit entsprechender Bemannung erfüllt werden. Es ergibt sich das Dispositionsproblem, diese Fahrtwünsche möglichst schnell und pünktlich sowie mit minimalen Kosten zu erfüllen, wobei eine Vielzahl von arbeitsrechtlichen und anderen Bedingungen zu beachten sind. Probleme von der Grössenordnung dieses Telebus-Dispositionsproblems sind manuell nicht mehr befriedigend zu lösen. Ziel des Telebus-Projektes ist zu zeigen, daß und wie Methoden der kombinatorischen Optimierung zur Lösung derartiger Fragestellungen einen signifikanten Beitrag leisten können. Wir haben die Fragestellung als sog. Set-Partitioning-Problem (vgl. auch das Projekt "Polyedrische Studien zu Set-Partitioning-Problemen") modelliert. Die Behandlung erfolgt hierbei in zwei voneinander unabhängigen Phasen. In der ersten Phase erzeugt ein Matrixgenerator eine Vielzahl möglicher Handlungsalternativen, die jeweils Einsatzpläne für einzelne Fahrzeuge darstellen; die Generierung der Alternativen erfolgt in dem Sinne in repräsentativer Weise, als versucht wird sicherzustellen, daß die in der Optimallösung vorkommenden Einsatzpläne in den erzeugten Alternativen enthalten sind. In der zweiten Phase wird aus diesen Handlungsalternativen die optimale Kombination ermittelt. Hierzu wollen wir einen auf Erkenntnissen über das Set-Partitioning-Polyeder basierenden Branch&Cut-Algorithmus entwickeln und beim BZA installieren. Die Trennung des Algorithmus in die oben beschriebenen Phasen erlaubt es, die komplexen Nebenbedingungen losgelöst von der Optimierung in der Matrixgenerierung zu behandeln, was Problemstellungen dieser Art einerseits überhaupt erst behandelbar macht und andererseits eine große Flexibilität des Optimierungssystems gegenüber Änderungen der Rahmenbedingungen garantiert. Im Berichtszeitraum wurde eine Analyse der Betriebsbedingungen beim BZA durchgeführt und mit der Entwicklung und Implementierung des Matrixgenerators im Rahmen von Diplomarbeiten von F. Klostermeier und Ch. Küttner sowie des Branch&Cut-Algorithmus begonnen. Erste Rechnungen an realen Daten des BZA sind sehr vielversprechend und deuten die Möglichkeit sowohl einer verbesserten Qualität der Behindertenbeförderung als auch erhebliche Kosteneinsparungen an. Insbesondere zeichnet sich bereits ein praktischer Einsatz von durch den Matrixgenerator erzeugten heuristischen Lösungen beim BZA ab.



Diskretisierter Stadtplan von Berlin mit 828 Knotenpunkten



Telebus im Einsatz

## Das Clusteringproblem

**Bearbeiter:** A. Martin, R. Weismantel

**Kooperation:** W. Hermann (Universität Augsburg)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Zur effizienten Lösung praktischer Platzierungsprobleme (zur Beschreibung des Problems siehe Projekt “Das Platzierungsproblem im VLSI-Design”) hat sich gezeigt, daß Dekompositionsmethoden unentbehrlich sind. Eine solche Dekompositionsmöglichkeit werden wir im folgenden kurz beschreiben. Sie führt uns zum sogenannten Clusteringproblem. Die grundlegende Idee der Methode besteht darin, in einem ersten Schritt mehrere Zellen zu einer sogenannten Superzelle zusammenzufassen. Anschließend wird das Platzierungsproblem für die Liste der Superzellen gelöst. Dadurch wird sichergestellt, daß jeder Superzelle ein Einbauplatz auf dem Chip zugeordnet wird. Im folgenden Schritt wird versucht, ausgehend von der Platzierung der Superzellen eine zulässige Platzierung der Zellen zu finden. Die wesentliche Fragestellung bei diesem Ansatz bezieht sich darauf, welche Zellen zu einer Superzelle zusammengefaßt werden sollen. Da es unser Ziel ist, eine Platzierung mit geringer (abgeschätzter) Verdrahtungslänge zu erhalten, erscheint es naheliegend, die Zellen, die stark miteinander verbunden sind, zu derselben Superzelle zusammenzufassen. Dieses Problem läßt sich in einem Graphen formulieren und führt zu dem folgenden Problem: Gegeben sei ein Graph  $G = (V, E)$  mit Knotengewichten  $f_i, i \in V$ , eine Zahl  $r \in \mathbb{N}$ , Kapazitäten  $F_k, k = 1, \dots, r$  und Kantengewichte  $c_e, e \in E$ . Finde eine Partitionierung  $(V_1, \dots, V_r)$  von  $V$ , so daß  $\sum_{i \in V_k} f_i \leq F_k$  für alle  $k = 1, \dots, r$  gilt und die Summe der Gewichte der Kanten, deren Endpunkte in verschiedenen Elementen der Partition sind, minimal ist. Zur Lösung dieses Problems haben wir verschiedene Heuristiken entworfen und in das von uns entwickelte Platzierungsprogramm integriert. Mit deren Hilfe ist es gelungen, die Laufzeit praktischer Platzierungsprobleme um einen Faktor zehn zu reduzieren, wobei für einige dieser Beispiele Qualitätsverluste hingenommen werden müssen. Für theoretische Untersuchungen im Rahmen dieses Projekts verweisen wir auf das Projekt “Mehrfach-Partitionierungsprobleme in Graphen und Hypergraphen”.

## Literatur

- [1] W. Hermann: *Clustering-Verfahren zur Platzierung von Zellen im Sea-of-cells Entwurfsverfahren*. Diplomarbeit, Universität Augsburg 1992.
- [2] R. Weismantel: *Platzieren von Zellen: Theorie und Lösung eines quadratischen 0/1 Optimierungsproblems*. Dissertation, Technische Universität Berlin 1992; Technical Report TR 92-3, ZIB-Berlin 1992.



## Das Verdrahtungsproblem im VLSI-Design

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

**Kooperation:** Siemens AG, München-Neuperlach

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Eines der wesentlichen Teilprobleme beim Entwurf elektronischer Schaltungen ist das Verdrahtungsproblem. Grob gesprochen, besteht hier die Aufgabe darin, eine gegebene Anzahl von sogenannten Terminalmengen durch elektrische Leitungen auf einer vordefinierten Fläche zu verbinden. Darüber hinaus müssen gewisse Entwurfsregeln sowie verschiedene Optimalitätskriterien berücksichtigt werden. Im allgemeinen ist das Verdrahtungsproblem zu komplex, um es direkt lösen zu können. In Abhängigkeit von der vom Benutzer verwendeten Dekomposition des Entwurfsproblems, von der zugrundeliegenden Technologie und von den gegebenen Entwurfsregeln lassen sich unterschiedliche Teilprobleme betrachten. Viele dieser Verdrahtungsprobleme können als (gewichtete) Steinerbaumpackungs-Probleme formuliert werden. Das (gewichtete) Steinerbaumpackungs-Problem besteht darin, in einem Graphen  $G = (V, E)$  mit Kantenkapazitäten  $c_e, e \in E$  (und Kantengewichteten  $w_e, e \in E$ ) für eine gegebene Liste von Knotenmengen  $\mathcal{N} = \{T_1, \dots, T_N\}$ ,  $N \geq 1$ , eine Steinerbaumpackung (minimalen Gewichts) zu finden. Zur Definition einer Steinerbaumpackung siehe Projekt "Steinerbaumpackungs-Polyeder und Schnittebenen". Wir betrachten das Steinerbaumpackungs-Problem aus polyedrischer Sicht und definieren ein Polyeder (das sogenannte Steinerbaumpackungs-Polyeder), dessen Ecken genau den Steinerbaumpackungen in  $G$  entsprechen. In dem bereits angesprochenen Projekt "Steinerbaumpackungs-Polyeder und Schnittebenen" haben wir mehrere Klassen von gültigen bzw. facetten-definierenden Ungleichungen beschrieben. Basierend auf diesen Ungleichungen entwickeln wir ein Schnittebenenverfahren. Dieses Verfahren läßt sich zur Lösung eines für die Praxis wichtigen Spezialfalls des Verdrahtungsproblems im VLSI-Design, dem sogenannten Switchbox-Verdrahtungsproblem, verwenden. Wir haben unsere Algorithmen an vielen in der Literatur diskutierten Problembeispielen getestet. Bis auf wenige Ausnahmen konnten wir alle Beispiele optimal lösen.

## Literatur

- [1] M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel: *Packing Steiner trees: a cutting plane algorithm and computational results*. Preprint SC 92-8, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin 1992.
- [2] M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel: *Packing Steiner trees: separation algorithms*. In Vorbereitung.
- [3] A. Martin: *Packen von Steinerbäumen: Polyedrische Studien und Anwendung*. Dissertation, Technische Universität Berlin 1992; Technical Report TR 92-4, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin 1992.

## On-line Optimierung

**Bearbeiter:** N. Ascheuer, N. Kamin

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Bedingt durch die rasante Weiterentwicklung von Hard- und Software gewinnt der computerunterstützte bzw. computergesteuerte Ablauf von technischen, naturwissenschaftlichen und auch wirtschaftswissenschaftlichen Prozessen immer mehr an Bedeutung. Im Rahmen dieser Computersteuerung müssen häufig in vorgegebenen, sehr geringen Rechenzeiten Entscheidungen getroffen werden, die lediglich von dem momentanen Systemzustand abhängig sind. Da zum Zeitpunkt der Entscheidung die weiteren Veränderungen meist nur sehr vage oder auch gar nicht bekannt sind, können sie bei der Entscheidungsfindung nicht oder kaum berücksichtigt werden, d.h. man trifft Entscheidungen unter unsicherer Zukunft. Diese lokal zu treffenden Entscheidungen sollen natürlich gewissen abstrakt formulierten, globalen Optimalitätskriterien genügen, wie z. B. einer optimalen Ausnutzung vorhandener Kapazitäten oder Ressourcen. Dabei ist es auf den ersten Blick nicht einsichtig, welche lokalen Entscheidungsstrategien zu einem globalen Optimum (oder weniger anspruchsvoll: zu einem vom Anwender akzeptierbaren Verhalten) führen. Unter On-line Optimierung verstehen wir die lokalen Entscheidungsstrategien unter unsicherer Zukunft. Die On-Line-Optimierung ist erst in den letzten vier bis fünf Jahren zunehmend zu einem Gegenstand der Forschung innerhalb der diskreten Mathematik geworden. Dementsprechend steckt die gegenwärtige Forschung auch noch in ihren Kinderschuhen, was bedeutet, daß keine befriedigende, geschweige denn umfassende, Theorie existiert. Jeder Anwender, der mit solchen Fragestellungen konfrontiert wird, ist deshalb auf "Kochrezepte" angewiesen. Er entwirft für sein spezielles Problem ein spezielles Verfahren, welches vielleicht ansprechende Ergebnisse liefert, er ist jedoch weit davon entfernt, sagen zu können, warum er diese Ergebnisse erzielt hat oder warum er keine besseren Ergebnisse erzielen konnte. Wünschenswert wäre es, auf eine mathematische Theorie zurückgreifen zu können und darauf basierend Algorithmen zur Lösung der praxisrelevanten Probleme zu entwerfen. Daneben sollten Güteabschätzungen für diese Algorithmen gegeben werden können. Wir versuchen, für praktisch relevante Fragestellungen, wie z.B. für die Online-Steuerung eines Hochregallagers oder die Online-Zuweisung von Aufträgen zu Fahrzeugen, Verfahren zu entwickeln, die beweisbar gute Lösungen liefern.

## **Ausfallsichere Telekommunikationsnetzwerke mit hohen Zusammenhangsanforderungen**

**Bearbeiter:** M. Grötschel, M. Stoer

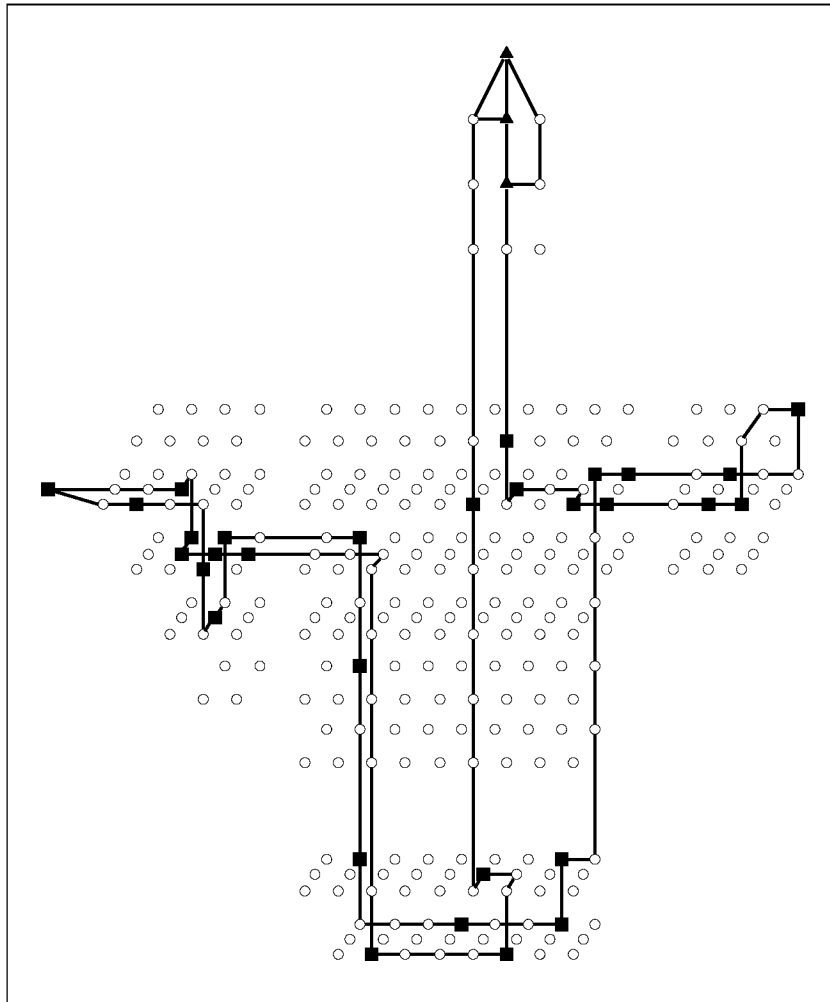
**Kooperation:** C. Monma, Bell Communications Research, Morristown

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Dieses Projekt hat sich aus einem Projekt mit Bell Communications Research entwickelt, in dem es um die möglichst billige Auslegung von Fiberglasnetzen für die Telekommunikation ging mit der Anforderung, daß bei Ausfall eines einzelnen Kabels oder Knotens die wichtigsten Knoten noch miteinander verbunden sein sollen. Kabelkapazitäten spielen in diesem Modell keine Rolle. Die guten Erfahrungen mit praktischen Beispielen aus dem Telekommunikationsbereich veranlaßten uns, unser Branch&Cut-Verfahren und die Lösungstheorie auf höhere Ausfallsicherheitsanforderungen zu verallgemeinern, nämlich, wenn bei Ausfall einer gegebenen Anzahl von Knoten und/oder Kabeln eine gewisse gegebene Menge von Knoten noch miteinander verbunden sein sollen. Die polyedertheoretischen Ergebnisse ließen sich sehr gut verallgemeinern. Das ist in der Dissertation [1] von M. Stoer dargestellt, für die sie 1992 einen Dissertationspreis der GMÖOR erhielt. Die praktischen Ergebnisse waren jedoch stark von den Problemparametern und von den Kosten abhängig. Das galt speziell für ein Anwendungsbeispiel von Bell Communications Research, das für verschiedene Sicherheitsanforderungen gelöst werden sollte. Einige Fälle konnten optimal gelöst werden, alle anderen innerhalb einer Schranke von 7% mit stark variierenden Rechenzeiten. Problembeispiele mit zufällig erzeugten Daten ließen sich dagegen im allgemeinen leicht optimal lösen. Die Rechenresultate sind in [2] zu finden, eine kurze Zusammenfassung in [3] und ein Übersichtsartikel über Auslegung von ausfallsicheren Kommunikationsnetzwerken im "Handbook in Operations Research and Management Science" ist in Bearbeitung. Das Bild zeigt eine optimale Lösung für eines der Anwendungsbeispiele von Bell. Für die drei als Dreiecke dargestellten Knoten war Zusammenhang bei zwei ausfallenden Kabeln gefordert, und für alle Dreiecke und schwarzen Kreise Zusammenhang bei einem ausfallenden Kabel.

## **Literatur**

- [1] M. Stoer: *Design of Survivable Networks*. Lecture Notes in Mathematics **1531**, Springer-Verlag, Berlin 1992.
- [2] C. Monma, M. Grötschel, M. Stoer: *Polyhedral and Computational Investigations for Designing Communication Networks with High Survivability Requirements*. Preprint SC 92-24, ZIB-Berlin 1992.

- [3] C. Monma, M. Grötschel, M. Stoer: *A Polyhedral Approach to Network Connectivity Problems (Extended Abstract)*. Preprint SC 92-22, ZIB-Berlin 1992.



## Das Plazierungsproblem im VLSI-Design

**Bearbeiter:** A. Martin, R. Weismantel

**Kooperation:** Siemens AG, München-Neuperlach

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Rahmen des vor drei Jahren begonnenen Projekts beschäftigen wir uns mit der Entwicklung eines neuen Ansatzes zur Lösung des Plazierungsproblems. Das Plazierungsproblem tritt als Teilproblem beim Entwurf elektronischer Schaltungen auf und läßt sich mathematisch folgendermaßen formulieren. Gegeben ist eine ebene Grundfläche, eine Menge von Netzen sowie eine Menge von Zellen. Jede Zelle ist charakterisiert durch Breite, Höhe und Kontaktpunkte. Die Netze spezifizieren, welche Zellen an welchen Kontaktpunkten miteinander verbunden werden müssen. Gesucht ist eine Anordnung der Zellen auf der Grundfläche, so daß je zwei Zellen nicht überlappen, gewisse technologischen Nebenbedingungen erfüllt sind und alle Netze physikalisch (d.h. durch elektrische Leitungen) verbunden werden können. Die technologischen Nebenbedingungen und Optimalitätskriterien hängen dabei von dem zugrunde liegenden Entwurstil ab. Das von uns entwickelte Verfahren beruht auf einer mathematischen Modellierung des Plazierungsproblems als ganzzahliges quadratisches Programm mit linearen Nebenbedingungen (siehe auch Projekt "Neue Ansätze zur Lösung quadratischer 0/1-Optimierungsprobleme"). Für praktische Problembeispiele führt diese Modell zu tausenden von ganzzahligen Variablen. Aus diesem Grund haben wir verschiedene Methoden entwickelt und getestet, welche das Ausgangsproblem in eine Folge "kleinerer" Probleme zerlegen. Jedes der Unterprobleme wird dann durch den Einsatz effizienter Heuristiken suboptimal gelöst. Eine Dissertation über dieses Projekt [2] wurde 1992 fertiggestellt.

### Literatur

- [1] M. Jünger, A. Martin, G. Reinelt, R. Weismantel: *Quadratic 0/1 optimization and a decomposition approach for the placement problem of electronic circuits*. Preprint SC 92-10, ZIB-Berlin 1992.
- [2] R. Weismantel: *Plazieren von Zellen: Theorie und Lösung eines Quadratischen 0/1 Optimierungsproblems*. Dissertation, Technische Universität Berlin 1992; Technical Report TR 92-3, ZIB-Berlin 1992.

## MULTISUN – Optimale Kapazitätserweiterung in ausfallsicheren Netzwerken

**Bearbeiter:** M. Stoer

**Kooperation:** G. Dahl, Norwegische Telekom

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** MULTISUN steht für “Multicommodity Flow Survivable Network Design”. Dabei geht es darum, ein existierendes Telefonnetzwerk durch eine möglichst billige Kapazitätserweiterung dem erhöhten Kommunikationsbedarf anzupassen. Das soll so geschehen, daß bei jedem möglichen Ausfall einer einzelnen Übertragungsstrecke oder eines Knotens der Gesamtverkehr aufrechterhalten werden kann. Für jede Strecke kann man eine Auswahl aus verschiedenen Kapazitätserweiterungen zu verschiedenen Preisen treffen. Mathematisch gesehen hat man also für jede Strecke eine stückweise lineare Kapazitäts-zu-Kosten-Funktion. Weitere Nebenbedingungen betreffen die Verkehrsrouten, die manchmal innerhalb einer gewissen Region liegen und über mehrere kantendisjunkte Wege geführt werden sollen. Im Unterschied zu dem in “Ausfallsichere Telekommunikationsnetzwerke mit hohen Zusammenhangsanforderungen” beschriebenen Problem geht es hier nicht nur um die Bestimmung, wo Kabel gelegt werden sollen, sondern auch, welche Kapazität sie haben sollen. Dieses Modell gibt natürlich die Realität etwas besser wieder als das vorige, ist dafür aber um einiges komplexer. Das Modell wurde in Zusammenarbeit mit G. Dahl und einigen Netzwerkplanern der norwegischen Telekom aufgestellt. Es läßt sich vor allem bei der Planung des nationalen und der einzelnen regionalen Netzwerke verwenden, und es ist für verschiedene Multiplexer-Technologien einsetzbar. Um solche Probleme praktisch zu lösen, erschien uns den Schnittebenen-Ansatz als vielversprechend. Wir stellten hierzu einige polyedertheoretische Untersuchungen an. Das Modell und der Algorithmus sind in [1] beschrieben. Eine Darstellung der polyedertheoretischen Ergebnisse wird folgen. Ein Schnittebenenverfahren, für das die norwegische Telekom Daten zur Verfügung stellen wird, befindet sich in Entwicklung.

### Literatur

- [1] M. Stoer, G. Dahl: *MULTISUN — Mathematical Model and Algorithms*. Report TF R 46/92, Norwegian Telecom Research Dept., 1992.

## SU(3)–Gittereichtheorie–Simulation auf massiv–parallelem Rechensystem

**Bearbeiter:** H.C. Hege

**Kooperation:** A. Nakamura, I.O. Stamatescu (Universität Heidelberg), K. Akemi, M. Fujisaki, M. Okuda, Y. Tago (Fujitsu, Tokyo), Ph. deForcrand (ETH Zürich), T. Hashimoto (Fukui University), S. Hioki (Fukuyama University), O. Miyamura, T. Takaishi (Hiroshima University)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die starke Wechselwirkung, eine der vier fundamentalen Naturkräfte, wird durch die Quantenchromodynamik (QCD), eine nicht–lineare Theorie mit unendlich vielen Freiheitsgraden, beschrieben. Sie liefert zunächst divergente Werte für physikalisch meßbare Größen. Durch Beschränkung der Impulse auf Werte unterhalb  $\Lambda < \infty$  werden alle physikalischen Größen endlich (Regularisierung), hängen dann jedoch von dem willkürlichen Parameter  $\Lambda$  ab. Durch sogenannte “Renormierung” läßt sich dies beheben: Man kann in der Theorie enthaltene, physikalisch *nicht* meßbare Parameter als Funktionen von  $\Lambda$  derart wählen, daß alle physikalische Größen von  $\Lambda$  *unabhängig* werden (auch im Limes  $\Lambda \rightarrow \infty$ ). Eine mögliche Regularisierung ist die Diskretisierung von Raum und Zeit. Im Falle der QCD gelangt man hierdurch und nach einer weiteren Approximation (Quarks nur als statische Quellen) zur sogenannten *reinen* SU(3)–Gittereichtheorie. In numerischen Simulationen arbeitet man auf endlichen Raum–Zeitgittern und versucht, die Werte der Kontinuumstheorie durch Extrapolation auf (a) unendlich ausgedehnte Gitter und (b) beliebig kleine Gitterabstände – bei gleichzeitiger Justierung von Parametern der Theorie – zu gewinnen. Die sogenannte  $\beta$ –Funktion gibt an, wie die Eichfeldkopplung in Abhängigkeit vom Gitterabstand  $\frac{\pi}{\Lambda}$  zu variieren ist.

Wir bestimmten durch Monte–Carlo–Renormierungsgruppen–Analyse die  $\beta$ –Funktion der reinen SU(3)–Gittereichtheorie bei kleinen Eichfeldkopplungen und untersuchten die Effekte auf Hadronen–Massen bei Variation der Gittergröße und der zeitlichen Randbedingungen. Weiterhin analysierten wir die Autokorrelationen (wesentliche Kenngrößen für die Effizienz von Monte–Carlo–Verfahren) verschiedener Observablen. Die Untersuchungen erforderten hinsichtlich Rechenleistung und Hauptspeicher einen Rechner der obersten Leistungsklasse. Sie wurden auf einem Parallelrechner (Fujitsu AP1000, 512 SPARC–Prozessoren, 8 Gbyte verteilter Speicher) durchgeführt.



## Literatur

- [1] K. Akemi, Ph. deForcrand, M. Fujisaki, T. Hashimoto, H.C. Hege, et al.: *Autocorrelation in Updating Pure  $SU(3)$  Lattice Gauge Theory by the Use of Overrelaxed Algorithms*. Nuclear Physics B (Proc. Suppl.), to appear 1993.
- [2] K. Akemi, Ph. deForcrand, M. Fujisaki, T. Hashimoto, H.C. Hege, et al.: *Study of Spatial Size Effects in Quenched Wilson Hadron Spectroscopy at  $\beta = 6.3$* , ibd.
- [3] K. Akemi, Ph. deForcrand, M. Fujisaki, T. Hashimoto, H.C. Hege, et al.: *Monte Carlo Renormalization Group Study at Large  $\beta$  in the Confinement Region*, ibd.

## **Anwendungen der Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM)**

**Bearbeiter:** S. Bartmann

**Kooperation:** W. Müller, J. Zimpfer (BAM)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die mit der BAM seit 1988 bestehende Kooperation konnte 1992 um weitere vier Jahre verlängert werden. Ziel der Zusammenarbeit ist der effektive Einsatz der Hochleistungsrechner des ZIB für einschlägige Forschungsaufgaben der BAM. Hierbei sollen sowohl die eingesetzten Modelle und Methoden in gemeinsamer Arbeit verbessert werden, als auch das informationstechnische Umfeld dem jeweiligen internationalen technischen Standard angepaßt werden. Die Kooperation berührt folgende Teilgebiete:

- Entwicklung und Erschließung moderner Rechenmethoden für ingenieur-wissenschaftliche Anwendungen im Bereich der Materialforschung und –prüfung, einschließlich der Realisierung eines Musterarbeitsplatzes
- Sicherstellung angemessener und stabiler Produktionsbedingungen für die Rechenaufträge der BAM
- Laufende Anpassung der technischen Dokumentation an den sachlich gebotenen technischen Stand
- Optimierung von Software für die Hochleistungsrechner
- Methodische und technische Unterstützung der Endbenutzer.

Folgende Forschungsaufgaben wurden im Rahmen der Kooperation bearbeitet:

- Verifikation analytischer Funktionen durch FE-Modelle (Impedanzen)
- Werkstoffmodellierungen im Hochtemperaturbereich
- Untersuchungen des Trag- und Verformungsverhaltens bei brandbeanspruchten Stahlkonstruktionen (thermo-elastisch-plastische Stabilitätsuntersuchungen)
- Rißwachstumssimulation an 2D- und 3D-Modellen von Bruchmechanikproben mit Hilfe der FE-Methoden

- Berechnung des nichtlinearen Last–Verformungs–Verhaltens von Tankböden bei unfallähnlicher Beanspruchung
- Vergleichende Untersuchungen der FE–Programme ADINA und ABAQUS anhand bruchmechanischer Kenngrößen.

Für die wissenschaftlich–methodische Unterstützung und die Beantwortung wissenschaftlich–technischer Fragen stehen den Endbenutzern in der BAM im Rahmen der Kooperation einige wissenschaftliche Mitarbeiter des ZIB zur Verfügung. Der im Kooperationsvertrag vorgesehene “Musterarbeitsplatz für Ingenieure” konnte 1992 bereits weitgehend realisiert werden:

- Es wurde eine Workstation der Firma Silicon Graphics beschafft und in der BAM aufgestellt.
- Diese Workstation wurde mit einer direkten IP–Verbindung zu den Cray–Computern des ZIB versehen.
- Softwarepakete zur Visualisierung wurden auf der Workstation installiert.

Im Rahmen der wissenschaftlichen Kooperation wurden drei konkrete Projekte ausgewählt, die gemeinsam von der BAM und dem ZIB bearbeitet werden sollen.

## **Entwicklung informationstechnischer Grundlagen für die Museumsdokumentation**

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

**Kooperation:** C. Wolters (Institut für Museumskunde, Staatliche Museen zu Berlin), H. Klemens (Institut für Museumswesen)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Zwischen dem ZIB und dem Institut für Museumskunde der Staatlichen Museen zu Berlin – Preußischer Kulturbesitz (IfM) besteht seit 1981 eine vertragliche Zusammenarbeit, welche 1992 um weitere fünf Jahre verlängert werden konnte. Im Rahmen dieser langfristigen Kooperation wurden mehrere Projekte zum Computer-Einsatz im Museumsbereich (besonders bei der Inventarisierung und Dokumentation) durchgeführt. Als Basissoftware wird dazu das ursprünglich von der britischen Museum Documentation Association entwickelte Programmsystem GOS benutzt. Das Datenbankprogramm GOS wurde von Anfang an speziell zur Unterstützung der Inventarisierung und Dokumentation im Museum entwickelt. Es bietet Datenstrukturen und Verarbeitungsmoduln an, die den komplexen Informationstrukturen in diesem Bereich besonders angepaßt sind. Außerdem ist GOS sehr modular aufgebaut und dadurch leicht erweiterbar. GOS wird vom ZIB kontinuierlich weiterentwickelt, wobei eine einheitliche Bedienoberfläche auf den verschiedenen Hardware-Plattformen und Betriebssystemen sehr wichtig ist. Da GOS verstärkt auch in großen Museen eingesetzt wird, mußte die bisherige Datenverwaltung von GOS durch eine mehrplatzfähige Version ersetzt werden. Außerdem standen bei der Weiterentwicklung Vereinfachungen bei der Dateneingabe im Vordergrund. Bei der großen Menge der zu erfassenden Objekte wirken sich selbst kleine Rationalisierungen bei der Eingabe sehr stark auf die Dauer bzw. die Kosten eines Projektes aus. Wichtig ist dabei eine Übernahme von vorhandenen Karteien oder Erwerbungsbüchern, möglichst ohne inhaltliche Überarbeitung, da diese an Fremdfirmen delegiert werden kann. In engem Zusammenhang damit steht die Möglichkeit eines sinnvollen Retrievals auf nicht bei der Eingabe vereinheitlichten Daten z.B. durch einen Thesaurus. GOS ermöglicht z.B. eine Recherche nach Möbeln, ohne daß der einzelne Benutzer wissen muß, welche Objektbezeichnungen zu diesem Thema in der Inventardatei vorhanden sind. Ein weiterer Entwicklungsschwerpunkt ist die Verarbeitung ungenauer Informationen. Im kulturhistorischen Bereich gibt es häufig nicht exakt quantifizierbare Angaben (z.B. Datierung: Anfang 19. Jahrhundert, Herkunft: niederrheinisch etc.) oder widersprüchliche Quellen, welche nur mit großem Aufwand in herkömmlichen Datenbanksystemen verarbeitet werden können.

# Kapitel 4

## Wissenschaftliche Dienstleistungen

Berliner Software-Entwicklungs- und Testumgebung BERSET

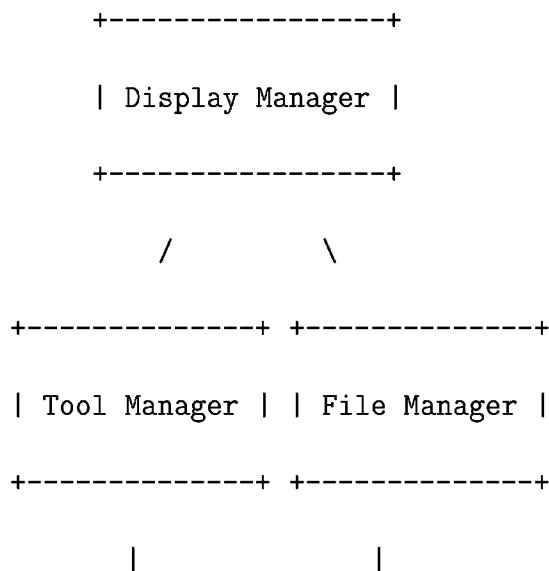
Bearbeiter: H.-H. Frese, C. Jarst

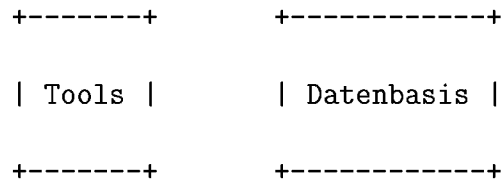
**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Ziel des Projektes BERSET ist die Entwicklung und Bereitstellung einer verteilten Programmentwicklungs- und Testumgebung mit grafischer Benutzeroberfläche für die Benutzer der Berliner Supercomputer. BERSET unterstützt in der Programmentwicklung die Phasen

- Codierung
- Modultest
- Integration
- Systemtest
- Leistungsanalyse

des Software-Lebenszyklus und faßt dabei alle benötigten Werkzeuge unter einer gemeinsamen grafischen Benutzeroberfläche zusammen.

Nach dem konzeptionellen Entwurf des BERSET-Schichtenmodells





wurden im Berichtszeitraum die einzelnen BERSET-Komponenten entwickelt und implementiert. Sämtliche BERSET-Komponenten sind in ANSI C implementiert. Die zentrale Steuerung und die Kommunikation zwischen BERSET und dem Benutzer erfolgt durch den BERSET Display Manager, dessen auf X Window basierende grafische Benutzeroberfläche mit dem Athena Widget Set implementiert wurde. Ein integrierter BERSET Tool Manager mit offener Werkzeugschnittstelle erlaubt eine flexible Anpassung der eingebundenen Werkzeuge durch den Benutzer und die Integration weiterer durch den Benutzer oder den Systemverwalter definierter Werkzeuge sowie den Austausch vorhandener Werkzeuge. Sämtliche für die Programmentwicklung benötigten Daten werden in einer gemeinsamen Datenbasis durch den integrierten BERSET File Manager verwaltet.

Im Berichtszeitraum wurde zunächst ein Prototyp entworfen und dann zu einer einsatzfähigen Produktionsversion weiterentwickelt. Implementierungen für die Betriebssystem SunOS, UNICOS und IRIX stehen zur Verfügung, weitere Implementierungen sind geplant.

Im Folgezeitraum soll BERSET zu einer verteilten Entwicklungsumgebung weiterentwickelt werden, wobei die Implementierungsphase (Codierung und Modultest) auf der lokalen Workstation und die Testphase (Systemtest und Optimierung) auf dem Supercomputer realisiert werden sollen und der Benutzer beim Werkzeugeinsatz zwischen der Workstation und dem Supercomputer durch die Entwicklungsumgebung geführt wird.

## **Verteilte Anwendungen im heterogenen Rechnernetz und auf Parallelrechnern**

**Bearbeiter:** H.-H. Frese, H.C. Hege

**Kooperation:** J. Diemer (Hahn–Meitner–Institut Berlin GmbH)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Rahmen der Kooperation “Scientific Workstation (SWS)” wurde in Zusammenarbeit mit dem HMI die Realisierung von parallelem und verteiltem Rechnen im heterogenen Rechnernetz unter Ausnutzung von freien Workstation–Kapazitäten und vorhandenen Vektorrechnern sowie dem Einsatz von massiv parallelen Rechnern untersucht. Als Planungsgrundlage für das Projekt “SWS 92/93” wurde zu Anfang des Berichtszeitraums ein Phasenplan erstellt, der sich auf Anwendungen am Beispiel des aus der kombinatorischen Optimierung stammenden Branch–and–Cut–Framework und eines Programmpaketes zur Analyse und Visualisierung von mehratomigen Clustern und deren Verteilung mit Hilfe eines einzusetzenden Softwaresystems bezieht. Zum Ende des Berichtszeitraums wurde zwischen dem HMI und dem ZIB ein neuer Kooperationsvertrag geschlossen, dessen Ziel die Forschung auf dem wissenschaftlichen Gebiet “Methoden der verteilten und parallelen Datenverarbeitung” und der Einsatz dieser Methoden im Bereich Scientific Computing ist. Als Schwerpunkte der Kooperation wurden definiert:

- Untersuchung des Einsatzes unterschiedlicher MPP–Systeme
- Untersuchung unterschiedlicher Programmiermethoden für parallele Anwendungen
- Parallele Nutzung von Workstationkapazitäten zu Leerzeiten
- Lastausgleich bei paralleler Nutzung von Rechnern.

Einen weiteren Schwerpunkt wird die Untersuchung von Programmiermodellen, –werkzeugen und –umgebungen für den zu beschaffenden Parallelrechner des ZIB bilden.

## **Zugangssystem RJE Tool für die Berliner Supercomputer**

**Bearbeiter:** H.-H. Frese, T. Klinski

**Kooperation:** J. Diemer (Hahn–Meitner–Institut Berlin GmbH)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Das im Rahmen einer Diplomarbeit in Zusammenarbeit mit dem Fachbereich Informatik der Technischen Fachhochschule Berlin und der Hahn–Meitner–Institut Berlin GmbH entwickelte Zugangswerkzeug RJE Tool für die Supercomputer im HMI und im ZIB wurde zu einer Produktionsversion weiterentwickelt und auf unterschiedlichen Server– und Workstation–Plattformen implementiert. Für die Rückübertragung der Auftragsausgabe wurde ein asynchrones Übertragungsverfahren entwickelt und in das RJE Tool integriert. Die auf der Basis von Open Look realisierte Benutzeroberfläche wurde für den Athena Widget Set portiert. Für Workstations ohne grafische Benutzeroberfläche wurde eine kommandozeilenorientierte Version entwickelt.

Es stehen jetzt Implementierungen für die folgenden Systeme zur Verfügung:

### **X Window Version:**

- Sun SPARCstation und SPARCserver mit SunOS 4.1.1 oder SunOS 4.1.2 und X11R5 vom MIT
- Silicon Graphics IRIS mit IRIX 4.0.5
- CDC 4680 mit EP/IX
- DECstation mit ULTRIX
- DELL PC mit UNIX

### **Open Look Version:**

- Sun SPARCstation und SPARCserver mit SunOS 4.1.1 oder SunOS 4.1.2 und Open Windows 3.0

### **Kommandozeilenversion:**

- für die o.g. Systeme und zusätzlich für IBM RS/6000 mit AIX 3.2

Der RJE Server wurde für CRAY X–MP und CRAY Y–MP mit UNICOS 6.1 und UNICOS 7.0 implementiert. Eine Version für UNICOS Multi Level Security (MLS) ist ebenfalls verfügbar.



## Verteilte Systeme auf Größtrechnern

**Bearbeiter:** G. Maierhöfer

**Kooperation:** Regionales Rechenzentrum der Universität Stuttgart (RUS)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** In Zusammenarbeit mit dem RUS wurde ein Konzept für eine leistungsfähige Kopplung der Supercomputer beider Rechenzentren erarbeitet. Als Netzverbindung sollten am RUS entwickelte Komponenten oder Industrielösungen auf der Basis von VBN (Vorläufer Breitbandnetz der Deutschen Bundespost Telekom) mit einer Bandbreite von 144 MBit/Sek. verwendet werden. Nach Gesprächen mit der Telekom, der Industrie und dem RUS wurde ein FDDI-Ring am ZIB zu Testzwecken installiert. Als Testinstallation wurden die beiden Supercomputer des ZIB und bis zu vier Ethernet-Subnetze über den FDDI-Ring verbunden und Messungen durchgeführt, um die Funktionalität und Leistung aller Netzkomponenten zu erproben. Meßergebnisse für ähnliche Konfigurationen lagen in [1], [2] und [3] vor. In Zusammenarbeit mit der CRAY Research GmbH wurden die für den Netzanschluß relevanten Systemparameter optimiert. Danach ergaben Messungen, daß der FDDI-Ring gegenüber dem Ethernet-Backbone des ZIB eine Leistungsverbesserung um eine Größenordnung erbringt (Ethernet ca. 500kByte/Sek., FDDI-Ring ca. 5 MByte/Sek.). Diese Verbesserung gilt sowohl für einzelne Verbindungen als auch für den Gesamtdurchsatz. Mitte des Jahres 1992 entschied die Telekom, daß VBN nicht mehr für die Datenübertragung zur Verfügung gestellt werden würde. Damit bestand zunächst keine Möglichkeit mehr, das erarbeitete Kopplungskonzept zwischen Stuttgart und Berlin zu realisieren. Auf Anregung der Deutschen Bundespost Telekom wurde ein Antrag auf Teilnahme am ATM-Pilotprojekt der Telekom (Beginn 1994) gestellt, um dann auf dieser Basis eine Größtrechnerkopplung zu verfolgen. Parallel zu den Arbeiten an der Hardwareverbindung zwischen den Standorten wurden Softwarewerkzeuge für verteilte Systeme getestet und die Voraussetzungen auf der Seite der Betriebssysteme und der Rechenzentrumsorganisation untersucht. Diese Arbeiten können im Rahmen der sonstigen Aktivitäten des ZIB auf dem Gebiet der verteilten Systeme genutzt werden und werden später, im Rahmen des ATM-Pilotprojektes, wieder in das durch die Absage der Bundespost ins Stocken geratene Projekt der Kopplung mit der Universität Stuttgart einfließen. Die Erprobung schneller Netzkomponenten im Rahmen dieses Projektes führte unmittelbar zur Einführung von schnellen Netzwerkkomponenten der Firma Network Systems Inc. in die aktuelle Konfiguration des Berliner Landeshöchstleistungsrechners.

## Literatur

- [1] O. Spaniol: *State of the Art bei FDDI; Erfahrungsbericht aus der Sicht eines Betroffenen*. EWI FDDI Report **91**, pp. 169–200 (1991)
- [2] F. Hemmer, E. Jagel, L. Robertson, B. Segal: *Mainframe Services using RISC-based Workstations: The first two years' experience at CERN*. CERN – European Laboratory for Particle Physics CN Divisio, Ref: CN / core – 92–00 (1992)
- [3] D. Raith: *FDDI AT RUS, University of Stuttgart*. GENESUS Proceedings Brighton, UK 15.–17. Mai 1991, pp. 53–57 Nexus XXIV Proceedings Scottsdale, Arizona 24.–27.9.1991

## 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:** Die elektronische Bibliothek eLib ist jetzt schon seit 3 Jahren im Einsatz und bietet der mathematischen Community einen kostenfreien Zugriff auf nun über 10000 mathematischen Algorithmen und Dokumente aus allen Bereichen des wissenschaftlichen Rechnens. Insbesondere die hauseigenen Softwareentwicklungen werden hierüber der wissenschaftlichen Öffentlichkeit zur Verfügung gestellt. Besonders sei aber hier erwähnt, daß vermehrt die an die Mathematik angrenzenden Naturwissenschaften (Physik, Chemie, E-Technik, Ing.-Wiss.) diesen Dienst nutzen. Zunehmend wird die eLib auch als allgemeines Informationsmedium eingesetzt, d.h. bestimmte Bereiche in der eLib werden dazu benutzt, Informationen (Tagungsveranstaltungen, Reviews, etc.) für eine spezielle Benutzergruppe dort abzulegen, die auch nachträglich (im Sinne eines Archivs) eingesehen werden können. Darüber hinaus kann diese Leistung sogar für spezielle Benutzergruppen exklusiv bereitgestellt werden. Auf diese Weise stellt die eLib z.B. ZIB-eigene Dokumentationslisten und Software-Bibliotheken nur für die Mitarbeiter des Hauses zur Verfügung. Im Zuge der vermehrten Anbindung der wissenschaftlichen Institutionen an das Internet wurde ein zusätzlicher Zugriff auf die Ressourcen der eLib über einen “anonymen ftp-Server” realisiert. Damit ist die eLib nicht nur über praktisch jedes wissenschaftliche Netz erreichbar, sondern es werden auch die international verbreiteten Internet-Dienste unterstützt. Diese Politik der “Unterstützung verbreiteter Netz-Dienste” wird auch weiterhin verfolgt. Insbesondere seit das ZIB über sogenannte High-Speed-Verbindungen verfügt, konnte eine deutliche Zunahme des Zugriffs über den Internet-Dienst “ftp” festgestellt werden. Innerhalb der eLib wurde im Berichtszeitraum auch ein “Fortran-nach C” Konverter bereitgestellt. Dieser erlaubt einem Benutzer, die vorwiegend in Fortran bereitstehenden Programmquellen nach C zu konvertieren. Damit wird der zunehmenden Bedeutung der Programmiersprache C auch innerhalb der Mathematik Rechnung getragen, und die schon bestehenden “Grundbibliotheken” brauchen nicht neu (in C) programmiert zu werden. Da die eLib als Verbundbibliothek mit den international bekannten Software-Bibliotheken NetLib (J.J. Don-

garra, E. Grosse) und Reduce Network Library (A.C. Hearn) realisiert ist, kommt dem Update-Service eine besondere Bedeutung zu. Insbesondere wurden bezüglich der NetLib neue Wege beschritten, die es heute ermöglichen, den kompletten Softwarebestand der amerikanischen Netlib mit dem am ZIB bestehenden automatisch zu synchronisieren. Bei der Reduce Network Library ist hierfür schon seit längerem ein Mechanismus etabliert, der den Update über eine Mailschnittstelle automatisiert. Technisch wurde auch eine Angleichung der beiden Netlib-Prozessoren vorgenommen, so daß jetzt am ZIB sowohl beide Mailknoten (NetLib und Reduce Network Library), als auch der Aufruf der entsprechenden Prozessoren innerhalb eines eLib Zugriffs, über dasselbe Programm realisiert sind. Ein Hauptproblem im Berichtsjahr war die quantitativ zunehmende Aufgabe, Informationen in die eLib zu integrieren, die von außenstehenden Benutzergruppen herangetragen wurden. Hier wurde ein neues Konzept entwickelt, das im Kern ein dezentrales Maintainieren der Informationen in der eLib und der entsprechenden eLib-Menüs beinhaltet, die jetzt automatisch erzeugt werden. Über eine Mailschnittstelle werden Informationen in die eLib geschickt, die daraufhin die Information ins eLib-Archiv integriert und den entsprechenden Teilbereich ihrer nach außen sichtbaren Menüs neu aufbaut und einen Preview hierauf ermöglicht, bevor der dezentral Verantwortliche seinen Bereich für die "Öffentlichkeit" frei gibt.

## 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)

## Das elektronische Diskussionsforum Opt-Net

**Bearbeiter:** J. Lügger, W. Dalitz

**Kooperation:** U. Zimmermann, M. Dowling und Mitarbeiter des Instituts für Angewandte Mathematik der Universität Braunschweig – Fachgruppe “Optimierung” der DMV

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Anfang Dezember wurden die Arbeiten am organisatorischen und technischen Konzept eines elektronischen Diskussionsforums als Modellentwurf für den Einsatz neuerer elektronischer Kommunikationstechniken in den Fachgruppen der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV) aufgenommen. Das Opt-Net soll das elektronische Forum der Fachgruppe “Optimierung” der DMV sein und am ZIB technisch eingerichtet werden. Das Opt-Net wird von der Fachgruppe “Optimierung” inhaltlich betreut, es soll aber nicht auf die Fachgruppe “Optimierung” beschränkt sein, sondern – international – allen Wissenschaftlern und Studenten aus Mathematik, Wirtschaftswissenschaften, Elektrotechnik und Informatik zur Verfügung stehen, die an der Optimierung interessiert sind oder die entsprechenden Informationen nutzen können. Es soll beinhalten:

- ein moderiertes Diskussionsforum (Mailing List)
- einen wöchentlichen Digest der Beiträge
- E-mail-Adressen für alle Teilnehmer (virtuelle Mailboxen)
- einen WhitePage-Service mit whois-Abfragemöglichkeiten
- einen Schlüssel für den interaktiven Zugang zur eLib des ZIB
- ein Opt-Net-Archiv in der eLib mit diversen Suchmöglichkeiten.

Über die elektronische Bibliothek eLib für mathematische Software des ZIB soll jeder Opt-Net-Teilnehmer – aktiv oder passiv – nutzen können:

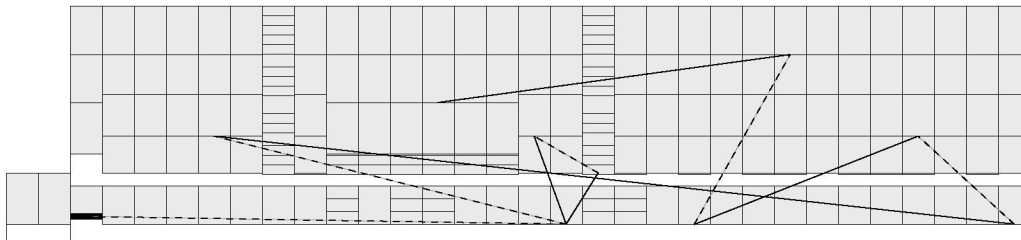
- den Dialog-Zugang zur NetLib und zur Reduce Network Library (RedLib), mit einer umfassenden Sammlung mathematischer Software
- einen Distributions-Service für Dokumente (PostScript,  $\text{\TeX}$ ), Programme (Quellen, Binaries), Daten und Reports (PostScript,  $\text{\TeX}$ )
- die automatische Ankündigung von Beiträgen im Internet und im USENET (Archie, WAIS, Gopher und IMP)
- den Zugriff aus dem Internet (telnet, mail, ftp) und aus allen Wissenschafts- und Postnetzen (Datex-P, X.400) auf alle in der eLib archivierte Informationen.

Die über das Opt-Net verbreiteten Informationen stehen der Öffentlichkeit zur Verfügung. Verkehrssprache im Opt-Net ist Englisch. Die Teilnahme am Opt-Net und die Mitgliedschaft sind kostenfrei.

## Animation vom Simulationsmodellen

**Bearbeiter:** N. Ascheuer, B. Kirkorowicz

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** In einem Kooperationsprojekt mit der Firma Siemens Nixdorf Informationssysteme, 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. Zur Verdeutlichung der Simulationsergebnisse sollte eine graphische Oberfläche geschaffen werden. Die Graphik sollte möglichst kompatibel sein, also unabhängig von anderer Software, und auch für andere Simulationsprojekte, z.B. für das Telebusprojekt, einsetzbar sein. Im Hause wurde schon eine Graphikschnittstelle auf der Basis der Bibliothek Xlib entwickelt, die *MiniGraphik*. Sie ist sowohl unter SunView als auch X11, sowie am Macintosh einsetzbar. Der Ablauf der Simulation und die Form und der Umfang der graphischen Ausgabe wird über ein Kontrollfenster, ein "Graphical User Interface", gesteuert. Dazu wird die ebenfalls im ZIB entwickelte Bibliothek *Ztools* verwendet, die auf XView und damit auf dem X Window System aufbaut. Für Dokumentationszwecke soll die Graphik auch als PostScript-Datei ausgegeben werden können. Im Hinblick auf den Einsatz in anderen Projekten wurde deshalb eine Schnittstelle zu *xfig* gewählt. Der jeweilige Bildschirminhalt wird im Format eines *xfig*-Textfiles ausgegeben und kann von *xfig* weiterverarbeitet und in eine PostScript-Datei umgewandelt werden. Die *xfig*-Schnittstelle soll auch dazu dienen, im weiteren Einsatz ein beliebiges Grundbild, das mit dem Graphikeditor gezeichnet wurde, einzulesen und dann darauf die animierten Simulationsergebnisse auszugeben. In einem ersten Anwendungsprogramm wurde eine graphische Oberfläche zur Simulation der Fahrbewegung des Regalbediengerätes geschaffen. Es werden sowohl die beladenen als auch die unbeladenen Fahrten besonders gekennzeichnet. Man hat sowohl die Möglichkeit, sich die bereits abgearbeiteten als auch die noch im Auftragspool befindlichen und noch nicht abgearbeiteten Fahrten anzeigen zu lassen.



## Paralleles und verteiltes Rechnen

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

**Beschreibung:** *Infrastruktur:* Durch Installation der jeweils neuesten Version der (sich gegenwärtig zu einem Quasistandard entwickelnden) Message-Passing-Bibliothek PVM und weitere begleitende Maßnahmen wurde am ZIB die Möglichkeit geschaffen, Applikationen im heterogenen Workstation-Netz zu verteilen. Zur Entwicklung paralleler Programme wurde ein auf SUN-Workstations laufender Simulator (für Intel iPSC) eingesetzt. Bis zur Beschaffung eines institutseigenen Parallelrechners muß auf externe Rechner ausgewichen werden — im Berichtsjahr einen Fujitsu AP1000 (Fujitsu Tokio) und einen Intel iPSC/860 (KFA Jülich).

*Evaluation paralleler Rechnersysteme:* Es ist geplant, für das ZIB einen leistungsstarken Parallelrechner zu beschaffen. Eine Analyse der im ZIB entwickelten Algorithmen ergab, daß für die Mehrzahl nur eine MIMD-Architektur in Frage kommt. Rechner der angestrebten Leistungsklasse sind heute nur durch Verwendung (physikalisch) verteilten Speichers realisierbar. Daher wurde eine Evaluation aller marktgängigen hoch-parallelen MIMD-Rechner mit physikalisch verteiltem Speicher vorgenommen. Hierzu wurde eine eigene Suite aus synthetischen Benchmarks und Kernen typischer Programme aus den Bereichen kombinatorische Optimierung, Numerik und Symbolik erstellt und auf den interessierenden Parallelrechnern zum Laufen gebracht. Daraus ergaben sich detaillierte Beurteilungen (hinsichtlich Architektur, Hardware, System- und Anwendungssoftware, Programmiermodellen, Entwicklungsumgebung, verschiedenen Leistungskriterien, Integration in die bestehende Rechner-Infrastruktur, usw.) für die neuesten, testfähigen Modelle der Hersteller Intel, Kendall Square, Meiko, nCUBE, Parsytec und Thinking Machines. Parallel wurde die Entwicklung weiterer, noch nicht am Markt erschienener Modelle verfolgt. Ergebnis der umfangreichen Recherchen war, daß keines der im Jahr 1992 fertigen Produkte unseren Anforderungen genügte. Die Beschaffung des Parallelrechners wurde daher um ein Jahr verschoben.

*Implementierung von Kernalgorithmen der kombinatorischen Optimierung:* Verschiedene Varianten von Netzwerk-Algorithmen wurden in optimierter sequentieller und (soweit möglich) paralleler Form implementiert. Dazu zählen der Algorithmus von Goldberg (Bestimmung des maximalen Flusses), ein Algorithmus von Gomory/Hu (Bestimmung des minimalen Schnittes zwischen je zwei Knoten eines ungerichteten Netzwerks), Verfahren von Hao/Orlin und Nagamochi/Ibaraki (Bestimmung des globalen minimalen Schnittes) sowie Algorithmen von Karp und Young/Tarjan/Orlin (Bestimmung des Minimum-Mean-Cycle in gerichteten Netzwerken). Grundproblem der Implementierung paralleler Netzwerk-Algorithmen ist die Diskrepanz zwischen deren zu meist feiner Granularität und den hohen Latenzzeiten der Kommunikation im Rechnernetz.

## Visualisierung

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

**Kooperation:** A. Rotthäuser, M. Rumpf (SFB 256, Inst. f. angew. Mathematik, Universität Bonn), W. Baumann, M. Morzynski, F. Thiele (Hermann-Föttinger-Institut für Thermo- und Fluidodynamik, TU Berlin), S. Yang (Gastprofessor am ZIB)

**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. Über die Dienstleistungsaufgaben hinaus wurde mit Vorarbeiten für ein Forschungsprojekt zu Methoden der wissenschaftlichen Visualisierung begonnen.

*Geräteausstattung:* Für die am Anfang des Berichtszeitraumes fertiggestellte erste Ausbaustufe der Video-Aufzeichnungsanlage wurden Programme zum Aufzeichnen und Schneiden computererzeugter Bildsequenzen entwickelt. Ebenso wurden Programme zur Bildaufzeichnung durch den Filmbelichter erstellt, so daß von jedem Arbeitsplatz im ZIB aus Dias erzeugt werden können.

*Software-Ausstattung:* Die im Vorjahr vielfach verwendete, interaktive Visualisierungsumgebung *apE* wurde durch das SGI-Produkt *Explorer*, welches auf ähnlichen Prinzipien beruht, fast vollständig ersetzt. Explorer wurde um neue Module erweitert mit dem Ziel, die Funktionalität von Explorer an die von *apE* anzupassen. Zur Vervollständigung der Software-Ausstattung wurde eine Reihe von Public-Programmsystemen, größtenteils aus den Gebieten Bildver- und -bearbeitung, installiert und an lokale Bedürfnisse angepaßt (z.B. Utah Raster Toolkit, SDSC Image Tools, PBMplus, Rayshade, Inetray, SciAn). Zur Anpassung an besondere Bedürfnisse (u.a. Video- und Dia-Aufzeichnung) wurden spezielle Erweiterungen für Public-Domain-Programme erstellt. Daneben wurden auch umfangreiche kommerzielle Produkte am ZIB eingeführt (SGI Inventor, Wavefront Advanced Visualizer) und in die Arbeitsumgebung integriert.

*Ergänzende Entwicklung eigener Visualisierungs-Software:* Die optimale Nutzung der verschiedenen, recht heterogenen Software-Komponenten erfordert Bindeglieder, die eine Reihe von neuen Eigenentwicklungen erforderlich machten. Frühere Eigenentwicklungen wurden weitergeführt; zum Beispiel wurde für das hauseigene, im ZIB vielfach verwendete Programm GRAZIL eine gra-

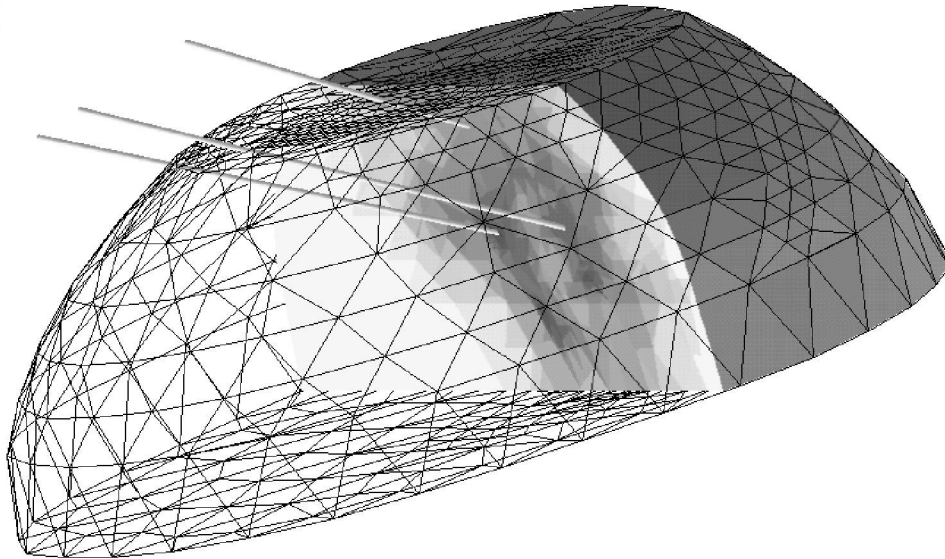


fische Benutzeroberfläche entwickelt, um dessen Bedienung ansprechender zu gestalten.


*Durchführung von Projekten der wissenschaftlichen Visualisierung:* In Zusammenarbeit mit anderen Abteilungen und externen Kooperationspartnern wurden mehrere Filmsequenzen erstellt. Dazu mußten teilweise umfangreiche Erweiterungen zu vorhandener Software entwickelt und implementiert werden (z.B. Animationssteuerung für Grape und Explorer/Inventor). Es wurde mit den Vorarbeiten für die Erstellung eines Films begonnen, der die Arbeit der Forschungsgruppen des ZIB darstellen soll.

*Anwender-Betreuung und -Information:* Neben der Betreuung von Anwendern in Einzelprojekten waren die vielfältigen Grafik- und Visualisierungsmöglichkeiten am ZIB allen ZIB-Mitarbeitern als auch externen Benutzern nahebringen. Dazu wurde ein entsprechendes Handbuch verfaßt. In einem viertägigen Workshop wurde ein Überblick über das Gebiet der wissenschaftlichen Visualisierung vermittelt.

*Zukünftige Projekte:* Gegen Ende des Berichtszeitraumes wurde mit Vorarbeiten für ein 1993 zu startendes Forschungsprojekt "Volume-Rendering auf massiv parallelen Rechnern" begonnen. Ziel dieses Projektes ist, moderne Parallelrechner zur interaktiven Visualisierung höher-dimensionaler, auch auf nicht-uniformen Gittern angesiedelter Daten (etwa Lösungen aus adaptiven PI



Schnitt durch einen menschlichen Schädel zur Planung einer Hyperthermie-Therapie. Die Grauwerte auf der Schnittfläche geben die Feinheit eines Tetraeder-Gitters wieder, das zur Berechnung der Wärmeverteilung dient, welche durch die drei dargestellten Mikrowellen-Antennen induziert wird.



Darstellung einer Travelling-Salesman-Tour mit 666 Städten.

### **Literatur**

- [1] Abt. Visualisierung und Paralleles Rechnen: *Handbuch zur Visualisierung am ZIB*. Technical Report TR 92-7, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (1992)

## **Europäische Normung von LISP**

**Bearbeiter:** W. Neun

**Kooperation:** EuLISP Working Group

**Beschreibung:** Auch im letzten Jahr hat die Europäische Gemeinschaft die Internationale Normung der Programmiersprache LISP ("ISO-LISP") unterstützt. Der dabei erarbeitete Dialekt EuLISP wird demnächst in der Version 1.0 vorliegen und dann von der Europäischen Gemeinschaft publiziert werden.

Wesentliche Konkurrenten bei der internationalen Normung sind Common LISP, der amerikanische Entwurf, der nunmehr in einer überarbeiteten Version vorliegt sowie ISLISP, ein japanischer Entwurf, der in der Nachfolge der im letzten Jahresberichts erwähnten DKLisp steht.

## **Technische Basis für symbolisches Rechnen im Hochleistungs- bereich**

**Bearbeiter:** W. Neun, H. Melenk

**Kooperation:** Diverse Rechnerhersteller, University of Utah

**Beschreibung:** Auch im Berichtszeitraum wurde an der Weiterentwicklung und Pflege von Portable Standard LISP als Basis für das symbolische Rechnen gearbeitet.

Für den als Baustein von Parallelrechnern häufig verwendeten Intel Prozessor i860 wurde ein Codegenerator geschrieben und die notwendigen Anpassungen erstellt. Dies ist insbesondere für eine Erweiterung von PSL oder REDUCE für parallele Rechnerarchitekturen von Interesse.

Die Kommunikation von PSL mit externen Prozessen wurde verbessert, die Verwendung von shared memory und Semaphoren im Betriebssystem UNIX ist jetzt möglich. Diese Komponenten sind erforderlich, wenn PSL oder REDUCE in einer hybriden Prozeßumgebung (z.B. Kopplung symbolischer Verfahren mit anderen Verarbeitungsschritten) eingesetzt werden sollen.

## Numerische Auswertungen in symbolischer Systemumgebung

**Bearbeiter:** W. Neun, I. Beckingham und Ch. Cannam \*

**Kooperation:** A.C. Hearn, S. Kameny (RAND, Santa Monica)

**Beschreibung:** Computer Algebra Systeme bieten als Alternative zum exakten (symbolischen) Rechnen Gleitkommazahlen beliebiger Genauigkeit (frei wählbare Mantissenlänge und unbeschränkter Exponent) an. Das ist insbesondere von Interesse, wenn das exakte Verfahren zu lange dauert oder in Fällen, wo das Ergebnis im allgemeinen nicht exakt dargestellt werden kann, wie etwa Wurzeln von Polynomen höheren Grades. In Abhängigkeit von der gewünschten Genauigkeit kann der mit derartigen Rechnungen verbundene Aufwand sehr hoch sein.

Zunächst wurde die technische Grundlage der in REDUCE benutzten "big-floats" von einer dezimalen auf eine binäre Basis umgestellt, was eine vollständige Aufarbeitung der Software zur Folge hatte. Dadurch konnten Rechnungen mit diesen Zahlen um einen Faktor 8 beschleunigt werden.

Als nächster Schritt schloß sich im Berichtszeitraum eine Erweiterung der Funktionalität an. Im Zusammenhang mit der Erstellung eines Pakets für die symbolische Verarbeitung spezieller Funktionen wurde ebenfalls an deren Auswertung mit beliebiger Genauigkeit gearbeitet.

---

\*I. Beckingham und Ch. Cannam sind Studenten der Universität Bath (England) und haben im Berichtszeitraum als Praktikanten am ZIB gearbeitet

## **Einsatz der Informationstechnik im Museum**

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

**Kooperation:** Deutsches Historisches Museum  
Bayerisches Nationalmuseum  
Museum für Völkerkunde (Staatliche Museen zu Berlin)  
Museum für Volkskunde (Staatliche Museen zu Berlin)  
Museen in Mecklenburg–Vorpommern und Sachsen–Anhalt

**Beschreibung:** 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 besteht seit September 1991 ein direkter Kooperationsvertrag. Im Rahmen dieser Kooperation wurde GOS auf das Betriebssystem OS/2 portiert. Seit Anfang 1992 wird GOS am Deutschen Historischen Museum von etwa 15 Mitarbeitern zur Inventarisierung der Bestände von etwa 400.000 Objekten eingesetzt. Dabei wurden bisher (Januar 1993) etwa 40.000 Objekte nach einem sehr ausführlichen Beschreibungsschema (mehr als 200 Kategorien) inventarisiert.

Seit Mitte 1992 gibt es eine intensive Zusammenarbeit mit dem Bayerischen Nationalmuseum in München. Ziel ist die Umstellung einer bisher manuell geführten Standortkartei für etwa 200.000 Objekte auf ein Computernetz. Da die Datenerfassung der vorhandenen Karteikarten von einer Fremdfirma vorgenommen wird, soll die Umstellung bis Mitte 1993 abgeschlossen werden.

Das im Vorjahr begonnene Projekt am Museum für Völkerkunde (der Staatlichen Museen zu Berlin) zur EDV–Unterstützung der Rückführung von im zweiten Weltkrieg nach Leningrad ausgelagerten Beständen wurde 1992 erfolgreich weitergeführt und wird wahrscheinlich im Frühling 1993 abgeschlossen. Seit Mitte 1992 laufen parallel dazu Vorbereitungen für die Inventarisierung der übrigen Bestände.

Am Museum für Volkskunde der Staatlichen Museen zu Berlin begannen 1992 zwei verschiedene Projekte. Zunächst wurden Hilfsmittel zur Unterstützung des Umzugs des Museums für Volkskunde von der Museumsinsel geschaffen. Längerfristig ist an eine vollständige Inventarisierung der Bestände gedacht (etwa 200.000 Objekte).

# Kapitel 5

## Rechenzentrum

### 5.1 Aufgaben und Organisation

Das Rechenzentrum des ZIB betreibt den Berliner Landeshöchstleistungsrechner, eine im internationalen Vergleich eher bescheidene Höchstleistungsrechnerkonfiguration, die es gestatten soll, Probleme der jeweils aktuellen höchsten Komplexitätsklasse in Angriff zu nehmen. Unter den gegebenen finanziellen Randbedingungen wird die Konfiguration laufend den ständig wachsenden technischen Anforderungen des sogenannten High Performance Scientific Computing (HPSC) angepaßt. Während des vergangenen Jahres wurde sie sowohl durch Verbesserungen des Rechnernetzes als auch durch Erweiterungen des File- und Computeservers CRAY Y-MP2E weiterentwickelt. Da das HPSC einen stark interdisziplinären Charakter hat, beschäftigt das ZIB im Rechenzentrum nicht nur Informatiker, Mathematiker und Computertechniker, sondern auch Wissenschaftler aus verschiedenen Gebieten der "Computational Sciences", die in den Projekten der Supercomputeranwender mitarbeiten. Die Entwicklungsprojekte des Rechenzentrums sind grundsätzlich an seine Serviceaufgaben gebunden. Über diese Projekte wird an anderer Stelle berichtet. Zusätzlich zum Betrieb des Landeshöchstleistungsrechners hat das Rechenzentrum die Aufgabe, die informationstechnische Infrastruktur innerhalb des ZIB zu schaffen bzw. auf einem angemessenen technischen Stand zu halten. Ein Organigramm des Rechenzentrums findet sich in Kapitel 2 dieses Berichtes.

### 5.2 Beteiligung des ZIB an der DV-Landesplanung

Ein Gesamtplan für die Ausstattung der Hochschulen und wissenschaftlichen Einrichtungen in Berlin mit Geräten der Informations- und Kommunikationstechnik wurde 1973 unter dem Titel "EDV-Gesamtplan für die Wissenschaft im Lande Berlin 1972-1976" dem Berliner Abgeordnetenhaus vorgelegt und zuletzt 1981 umfassend fortgeschrieben. Seitdem sind in unregelmäßigen Abständen allenfalls Teilbereiche dargestellt worden. Die Zusammenführung der Potentiale in Berlin und die Schaffung einer geeigneten Infrastruktur für Forschung und Entwicklung ließen es als geboten erscheinen, eine koordinierende Planung für die nächsten Jahre zu erstellen. Die Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung des Landes Berlin hat daher eine Arbeitsgruppe ins Leben gerufen, die zumindest für den Bereich der im Rahmen

der Hochschulbauförderung finanzierbaren Ausstattungen während des Berichtszeitraums eine Landesplanung erarbeitet hat. An dieser Arbeitsgruppe hatte auch das ZIB Anteil. Die Landesplanung basiert auf dem Prinzip, jede verfügbare Dienstleistung nach wirtschaftlichen Kriterien so dicht wie möglich an den Arbeitsplatz des Wissenschaftlers, Studenten oder technischen Angestellten zu bringen. Gleichwohl gibt es zahlreiche Dienstleistungen und Geräte, die aus Gründen der Wirtschaftlichkeit oder aufgrund organisatorischer Notwendigkeiten nicht jedem Benutzer lokal zur Verfügung gestellt werden können, sondern den Anwendern regional, überregional oder weltweit über ein Rechnernetz zugänglich gemacht werden müssen. Als wesentliche strukturelle Voraussetzung für den Wissenschaftsstandort Berlin schlägt die Arbeitsgruppe daher die Schaffung eines leistungsfähigen regionalen Rechnernetzwerkes (Metropolitan Area Network, MAN) vor. Das ZIB ist im Rahmen der vorliegenden Landesplanung als (einziger) Betreiber des Landeshöchstleistungsrechners ausgewiesen. Die Planung sieht vor, daß als Nachfolgerechner der CRAY X-MP eine Supercomputerkonfiguration beschafft werden soll, die sowohl aus konventionellen vektorialen und skalaren Komponenten bestehen soll als auch aus einem leistungsfähigen Parallelrechner. Die 1993/1994 zu beschaffende Konfiguration soll einen etwa zwanzigfachen Leistungsgewinn gegenüber dem jetzigen System bringen. Als überregionale Dienstleistung des ZIB werden in der Landesplanung die Softwareinformationsdienste des ZIB erwähnt, über die im Kapitel 4 berichtet wurde.

## **5.3 Ausbau des Landeshöchstleistungsrechners**

### **5.3.1 Hardware**

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 am Ende dieses Kapitels). 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 HPSC die technischen Voraussetzungen für eine Lösung zu bieten. Folgende Verbesserungen und Erweiterungen wurden im Berichtszeitraum vorgenommen:

- Die Aufteilung der Funktionen des Landeshöchstleistungsrechners in die Bereiche "Fileserver" und "Computeserver" wurde im Laufe der ersten Hälfte des Berichtsjahres abgeschlossen. Als Datenverwaltungsoftware wird die Data Migration Software der Cray Research, Inc. ein-

gesetzt. Die ausgewählte Hard- und Softwarekonfiguration (CRAY Y-MP plus STK-ACSL und SUN-Steuerrechner) funktionierte von Anfang an reibungslos. Für die Sicherung der auf den circa 125 Arbeitsplatzcomputern im ZIB erzeugten und verwalteten Daten wurden Prozeduren geschrieben, die Sicherheitskopien in der langfristigen Datenerhaltung des Fileservers ablegen.

- Die für die Trennung der Funktionsbereiche erforderliche Leistungsverbesserung im Netzbereich wurde durch Beschaffung von Netzwerkkomponenten der Firma Network Systems erreicht. Diese Beschaffung legt zugleich die Grundlage für den Aufbau eines Hochgeschwindigkeitsnetzwerkes mit HIPPI-Verbindungen und Anschlüssen an das künftige ATM-Netz der deutschen Bundespost Telekom.
- Als letzter Vorrechner mit herstellergebundenem Betriebssystem wurde am Ende des Berichtszeitraums die CDC Cyber 930 mit Betriebssystem NOS/VE stillgelegt. Dies war der Abschluß der 1987 begonnenen Überführung der gesamten Produktionsumgebung des Landeshöchstleistungsrechners in die UNIX-Welt.
- Als Dialogserver wurde ein Vierprozessorsystem SUN 4/670 installiert und über ein VME-Bus-Interface direkt mit dem Fileserver verbunden. Dieses System hat sich hinsichtlich Leistung, Softwarestabilität und Funktionalität im Berichtszeitraum bestens bewährt. In diesem Zusammenhang wurde ein gemeinsames NQS (Network Queuing System) mit der Universität Kiel eingerichtet und die Organisation des ZIB-Dialogservers von den Kieler Partnern übernommen. Damit besteht zu den CRAY-Computern in Kiel und Berlin ein aus Benutzersicht vollkommen gleichartiger und gleichberechtigter Netzzugang.
- Der Computeserver CRAY-X-MP/24 wurde vom Hersteller gegen das neuere und leistungsstärkere Modell X-MP/216 ausgetauscht.
- Die Rechenleistung des Fileservers wurde durch Hinzunahme eines weiteren Prozessors verdoppelt.
- Das Datenarchiv des Fileservers wurde durch Installation eines weiteren Kassettensilos erweitert.

Somit wurde im Berichtszeitraum die Rechnerkonfiguration so umgestaltet, daß im Rahmen der für den Zeitraum 1991–1994 vorgesehenen Beschaffung eines Nachfolgerechners für den Berliner Landeshöchstleistungsrechner jetzt praktisch “nur noch” die Beschaffung der Computeserver aussteht.



### 5.3.2 Software

Typisch für den Einsatz eines Superrechners in der universitären Forschung ist die Verwendung von selbstentwickelten Programmen der Benutzer bzw. von Programmen, die innerhalb der wissenschaftlichen Gemeinschaft über die Rechnernetze kostenlos ausgetauscht werden. Trotzdem wurde im Laufe der Jahre eine nicht unerhebliche Sammlung von Programmen und Bibliotheken aufgebaut, die vom ZIB zentral verwaltet und angeboten werden. Die Verwendung solcher im allgemeinen kommerziell vertriebener Software gewinnt auch bei Supercomputern zunehmende Bedeutung:

**Basisbibliotheken:**

IMSL, NAG, BLAS, EISPACK, LINPACK, LAPACK

**Compiler:**

FORTRAN77, ANSI C, C++, PASCAL, LISP

**Chemie:**

AMBER 3A, AMPAC 2.1, DISCOVER, GAMESS-UK, GAMESS-USA, GAUSSIAN 90, GRADSCF 9.6, GROMOS 87, MOPAC 6.0, RPAC 8.6, UniChem (MNDO90, DGauss, CADPAC)

**Strukturmechanik:**

ADINA 6.0, ABAQUS 4.9

**Computeralgebra:**

REDUCE 3.4

**Graphik, Visualisierung:**

GKS 4.x (Fortran), NewGKS, XGKS, GRIPS (Fortran), BIZEPS (Fortran), NAG GRAPH. LIB. Mark 3.0 (Fortran), CVT (X11R4, Motif, XView, DGL), MPGS

**Tools:**

AIT, PVM, RJETOOL

Selbstverständlich stehen die vom ZIB weltweit angebotenen Dienste eLib, netlib und redlib auch den Benutzern der Superrechner zur Verfügung.

## 5.4 Nutzung des Landeshöchstleistungsrechners

### 5.4.1 Norddeutscher Vektorrechnerverband (NVV), wechselseitige Rechnernutzung

Zwischen den Ländern Schleswig-Holstein, Niedersachsen und Berlin besteht ein Vertrag über die wechselseitige Nutzung von Vektorrechnern. Das ZIB

verwaltet neben dem eigenen Rechner die Anteile des Landes Berlin auf den Rechnern der Partnerländer. Die folgende Tabelle zeigt die wechselseitige Inanspruchnahme von Vektorrechnerkapazität im NVV seit 1984:

<b>Wechselseitige anteilige Rechnernutzung im NVV</b>				
<b>Jahr</b>	<b>System</b>	<b>Nutzung durch</b>		
		Berlin	Schleswig -Holstein	Nieder- sachsen
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* (Berlin)	65 %	16 %	19 %
1988	CRAY X-MP/24 (Berlin)	81 %	4 %	15 %
	CRAY X-MP/216** (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*** (Hannover)	2 %	0 %	98 %
1991	CRAY X-MP/24 (Berlin)	90 %	7 %	3 %
	CRAY Y-MP-2E/164 (Berlin)****	85 %	15 %	0 %
	CRAY X-MP/216 (Kiel)	14 %	85 %	1 %
	SIEMENS VP 400/10*** (Hannover)	8 %	3 %	89 %
1992	CRAY X-MP/216 (Berlin)	88 %	12 %	0 %
	CRAY Y-MP-2E/164 (Berlin)	83 %	16 %	1 %
	CRAY X-MP/216 (Kiel)	5 %	95 %	0 %
	SIEMENS S 400/40	7 %	4 %	89 %
*	Installiert Januar 1987			
**	Installiert Dezember 1987 als CRAY X-MP/18, erweitert zur CRAY X-MP/216 im 4. Quartal 1988			
***	Installiert Januar 1990 als SIEMENS VP200, Erweiterung zur SIEMENS S400/40 Ende 1991			
****	Installiert September 1991			

Superrechner sind in manchen Forschungsdisziplinen das einzige Werkzeug der Forschung, in anderen Disziplinen sind sie ein unentbehrliches Hilfsmittel neben anderen Geräten. Der Bedarf an Rechenleistung übersteigt die technischen Möglichkeiten dermaßen, daß viele Projekte nicht in Angriff genommen werden können, weil die verfügbare Rechenleistung zu gering ist. Dies erklärt die Beobachtung, daß Höchstleistungsrechner immer voll ausgelastet

sind, und daß lange Wartezeiten für die Bearbeitung größerer Aufträge bestehen. Wegen der besseren Vergleichbarkeit wurden in vorstehender Tabelle daher nur die prozentualen Anteile der Partner im Norddeutschen Vektorrechnerverbund an den durchweg voll ausgelasteten Systemen aufgeführt. Wie von Anfang an geplant, zeigt sich aufgrund der unterschiedlichen Installationstermine und Leistungscharakteristika eine deutliche Tendenz zum Kapazitätsausgleich zwischen Kiel und Berlin. Abweichend von der Planung ist hingegen zu beobachten, daß der Austausch von Rechenzeit zwischen Niedersachsen und den vorgenannten Partnern im NVV nicht den gewünschten Umfang angenommen hat. Mit der Einführung von UNIX als Betriebssystem des SIEMENS VP dürfte der von allen Beteiligten angestrebte Kapazitätsausgleich künftig erheblich erleichtert werden.

#### 5.4.2 Aufschlüsselung nach Partnern

Die 1992 von den Berliner Vektorrechnern an Benutzer abgegebene Leistung (gemessen in CPU-Stunden) verteilt sich wie folgt auf die verschiedenen Benutzergruppen:

<b>Rechner</b>	<b>X-MP/24</b>	<b>Y-MP2E/164</b>
An Benutzer abgegebene Leistung insgesamt:	15.093,6	7.860,4
Vor der Berechnung der Anteile der einzelnen Partner des ZIB an der Leistung der Berliner Supercomputer wird der Eigenverbrauch des ZIB und seiner unmittelbaren Forschungspartner ermittelt:		
Eigene Forschungsprojekte des ZIB	462,5	141,4
Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung	3,8	148,9
Somit betrug der Anteil des ZIB:	466,3	290,1
Nach Abzug dieses Eigenanteils verblieben demnach zur Verteilung an externe Benutzer:	14.627,3	7.570,3
Diese Leistung verteilte sich wie folgt auf die Partner des ZIB:		
Freie Universität Berlin	7.671,8 (52 %)	3.559,5 (47 %)
Technische Universität Berlin	4.384,2 (30 %)	2.217,6 (29 %)
Humboldt-Universität zu Berlin	0,6	67,7 (1 %)
Land Niedersachsen	32,2	77,7 (1 %)
Land Schleswig-Holstein	1.780,4 (12 %)	1.205,9 (16 %)
Sonstige Universitäten	439,1 (3 %)	441,9 (6 %)
Sonstige Institute	319,0 (2 %)	0,0

### 5.4.3 Projekte mit großem Rechenzeitverbrauch

Die im folgenden aufgeführten Projekte mit großem Rechenzeitverbrauch sind nach Sachgebieten (danach nach Instituten) geordnet. Der Rechenzeitverbrauch wird in CPU-Stunden, getrennt nach den Rechnern CRAY X-MP und CRAY Y-MP angegeben. Der Verbrauch auf den anderen Rechnern im NVV ist jeweils unter der Projektbeschreibung notiert.

	Institut	Rechner	
		X-MP	Y-MP
<b>Physik</b>			
Computerunterstützte Untersuchungen zur Hochenergiephysik (S400 – RRZN: 1226) (X-MP – Kiel: 328)	[1]–ITP	1842	1182
Statistische Mechanik von Elektrolyten Phasenübergang in Flüssigkeitskristallen (X-MP – Kiel: 196)	[1]–ITP	546	116
	[1]–ITP	1836	32
MO-Berechnungen an großen organischen Systemen	[1]–IEP	109	0
Staubbildung in pulsierenden Sternatmosphären	[2]–IAAP	980	66
Modellierung und Chemie zirkumstellarer Staubhüllen	[2]–IAAP	181	69
Theoretische Untersuchungen von Polymerströmungen	[2]–ITP	513	347
Statische und dynamische Struktur von Flüssigkeiten	[2]–ITP	0	266
Struktur von Ferrofluiden	[2]–ITP	226	114
Untersuchung molekularer Gase und Stoßprozesse	[2]–ITP	31	85
Ab initio Green-Funktionberechnung von Defekten in GaAs	[2]–ITP	68	216
Ab initio Bandstrukturberechnungen von Zn-Chalkonidschichten	[2]–ITP	0	110
Simulation nichtlinearer Transportphänomene in Halbleitern	[2]–ITP	0	164
Untersuchung von Nichtgleichgewichtsatmosphären	[3]–IPA	1594	785
Bearbeitung seismischer Reflexionsdaten	[3]–IPG	58	151
Selbstkonsistente Bandstrukturberechnungen	[3]–ITP	117	0
Simulation der Magnetfeldentstörung in Neutronensternen	[7]	319	

	Institut	Rechner	
		X-MP	Y-MP
<b>Chemie</b>			
Moleküldynamik von Clustern (X-MP – Kiel: 112)	[1]–IPTC	350	191
Quantenchemische Berechnung von Metallclustern und Molekülen	[1]–IPTC	228	1642
Berechnung elektronischer Eigenschaf- ten bioaktiver Moleküle	[1]–IKrist	0	117
Ab initio Berechnungen von Clustern	[2]–IOC	40	107
Untersuchung von Reaktionen in der Gasphase	[2]–IOC	70	244
MD/MC-Simulation von Polymersy- stemen	[2]–PTC	120	175
Quantenchemische Untersuchungen von Li-Verbindungen	[4]–IAC		67
Ab initio Berechnungen zum Mechanis- mus von Oxetanreaktionen	[5]–IPTC	171	240
Quantenchemische Untersuchung des Protonen-Transfers	[5]–IPTC	0	135
Berechnung angeregter Zustände von Cyaninen	[5]–IPTC	100	0
Untersuchung zur Stabilität vom Metallclustern	[6]–IPTC	168	67
<b>Ingenieurwissensch./Bauwesen</b>			
Umströmung um oszillierende Tragflü- gelprofile	[2]–HFI	729	0
Instationäre Profilmströmung mit ab- gelöster Wirbelströmung	[2]–HFI	506	49
Analyse abgelöster Strömungen	[2]–HFI	200	0
Nichtlineare FE-Berechnungen von Baukonstruktionen	[2]–IBau	11	104
<b>Meteorologie/Ozeanographie</b>			
Numerische Simulation zur Klimafor- schung	[1]–IMeteor	1802	100
Ozeanographische Modelle	[3]–IOzean	0	130

Das für das jeweilige Projekt verantwortliche Institut kann nach folgendem Schlüssel ermittelt werden:

[Kennzahl]–Kürzel

mit folgenden Kennzahlen: [1] FUB, [2] TUB, [3] Uni Kiel, [4] HUB, [5] Uni Leipzig, [6] Uni Wuppertal, [7] Sonstige  
und folgenden Institutskürzeln:

[IPTC]	Institut für Physikalische und Theoretische Chemie
[IKrist]	Institut für Kristallographie
[ITP]	Institut für Theoretische Physik
[IEP]	Institut für Experimentalphysik
[IMeteor]	Institut für Meteorologie
[IPA]	Institut für Physikalische Astronomie
[IPG]	Institut für Physikalische Geodäsie
[IOzean]	Institut für Meereskunde
[IAC]	Institut für Anorganische Chemie
[IAAP]	Institut für Astronomie und Astrophysik
[IOC]	Institut für Organische Chemie
[PTC]	Iwan-N.-Stranski-Institut für Physikalische und Theoretische Chemie
[HFI]	Hermann-Föttinger-Institut für Thermo- und Fluidodynamik
[IBau]	Institut für Allgemeine Bauingenieurmethoden

## 5.5 Interne Dienstleistungen des Rechenzentrums

Für die Forschungs- und Entwicklungsaufgaben des ZIB, sowie für die systemtechnischen Aufgaben des Rechenzentrums ist das ZIB mit Gruppen von UNIX-Workstations ausgestattet, die jeweils einer Arbeitsgruppe zugeordnet sind und in der Regel aus einem Paging-Server und mehreren Diskless-Nodes (3-8) bestehen. Der Paging-Server enthält auch häufig geladene Betriebssystemmoduln und intensiv genutzte Benutzerdaten. Mehrere solcher Gerätegruppen, die räumlich (z.B. in einem Stockwerk) beieinander liegen, werden in einem IP-Subnetz betrieben, das über einen der IP-Router an den FDDI-Backbone und damit an das "öffentliche" Netz angebunden ist. Insgesamt werden vom ZIB zur Zeit etwa 125 UNIX-Workstations betrieben und intensiv genutzt. Im einzelnen handelt es sich um folgende Geräte:

Typ	Anzahl	Kommentar
SUN 3/xx	6	3 als X-Terminal, 3 als Fileserver
SUN 4/xx	98	
SUN 4/xxx	8	
IBM RS6000	1	Referenzmaschine
SGI/4D310	1	
SGI/4D30	2	
SGI/Indigo	3	
HP900	3	
VAX 3500	1	Referenzmaschine
DI3100	1	Referenzmaschine
AV400	1	Referenzmaschine
DSMi860	1	Referenzmaschine

Außerdem werden 11 PCs und 4 Macintosh-Rechner als Referenzmaschinen für die Softwareentwicklung und für andere spezielle Aufgaben eingesetzt. Nach Möglichkeit verfügt jeder Mitarbeiter des ZIB über eine "eigene" UNIX-Workstation mit Zugriff zu Hochleistungs- und Spezialservern innerhalb und außerhalb des ZIB. Für die Datenhaltung stehen den Arbeitsgruppen Fileserver zur Verfügung, deren Daten vom Rechenzentrum gesichert werden. Für die im Berichtszeitraum ursprünglich geplante Beschaffung eines hochparallelen Systems in der Preisklasse unter 3 Millionen DM wurde das Marktangebot durch die Abteilung Visualisierung und Paralleles Rechnen in Zusammenarbeit mit dem Rechenzentrum untersucht. Nach zusätzlichen Benchmarkuntersuchungen wurde die Beschaffung zurückgestellt. Nachdem klar war, daß ein Parallelrechner erst im Rahmen des geplanten Ausbaus des Landeshöchstleistungsrechners installiert werden wird, wurden die Arbeiten zur kooperativen Nutzung von Workstations intensiviert. Es wurde ein Arbeitskreis von Anwendern und Implementierern verteilter Systeme gegründet, der in Zusammenarbeit mit dem Rechenzentrum die technischen und organisatorischen Voraussetzungen für die kooperative Nutzung von Workstations geschaffen hat. Der im Berichtszeitraum installierte FDDI-Ring sowie die ebenfalls im Berichtszeitraum beschafften Router der Firma Network Systems werden es künftig ermöglichen, Gruppen von Workstations mit Netzwerken unterschiedlicher Bandbreite zu verbinden und den Einfluß der Netzleistung auf die Effektivität verteilter Anwendungen auch experimentell zu untersuchen.





# Kapitel 6

## Publikationen

### 6.1 Preprints

SC 92–1 F.A. Bornemann; H. Yserentant: *A Basic Norm Equivalence for the Theory of Multilevel Methods.*

**Abstract:** Subspace decompositions of finite element spaces based on  $L_2$ -like orthogonal projections play an important role for the construction and analysis of multigrid like iterative methods. Recently several authors proved the equivalence of the associated discrete norms with the  $H^1$ -norm. The present report gives an elementary, self-contained derivation of this result which is based on the use of  $K$ -functionals known from the theory of interpolation spaces.

**Keywords:** multilevel methods, nonuniform meshes, optimal convergence rates.

**AMS(MOS) subject classifications:** 65N55, 65N30, 65N50.

SC 92–2 J. Ackermann; K. Helfrich: *Radius of Convergence of the  $1/Z$ -Expansion for Diatomic Molecules: The Ground State of the Isoelectronic  $H_2$  Sequence.*

**Abstract:** Using the perturbational-variational Rayleigh-Ritz matrix formalism, the  $1/Z$ -expansion for the ground state of the isoelectronic  $H_2$  sequence in the range of the internuclear distance  $0.2 \leq R \leq 9.0$  is calculated. Also lower bounds of the radius of convergence, based on Kato's theory of linear operators, are given. The numerical results of the  $1/Z$ -expansion can be compared with the exact results and do not converge in the whole  $R$ -range. This behavior is in qualitative agreement with the lower bounds for the radius of convergence and enlightens some still open properties of  $1/Z$ -expansions for this sequence in the literature.

**PACS:** 31.15 + q; 31.20 Di; 31.20 Tz.

SC 92–3 Martin Grötschel: *Discrete Mathematics in Manufacturing.*

**Abstract:** Manufacturing is a topic that provides rich opportunities for important mathematical contributions to real-world problems. The purpose of this paper is to show, by means of several examples, where and how mathematical problems of a discrete nature arise in manufacturing and to demonstrate the savings and improvements that can be achieved by employing the techniques of combinatorial optimization. The topics covered range from the design phase of a product (e.g. rou-

ting, placement and via minimization in VLSI design), the control of CNC machines (e.g. drilling and plotting), to the management of assembly lines, storage systems and whole factories. We also point out difficulties in the modelling of complex situations and outline the algorithmic methods that are used for the solution of the mathematical problems arising in manufacturing.

**Keywords:** discrete mathematics, combinatorial optimization, applications to manufacturing.

**SC 92–4** Yoshiko Wakabayashi: *Medians of Binary Relations: Computational Complexity.*

**Abstract:** Let  $\mathfrak{R}$  be the set of all binary relations on a finite set  $N$  and  $d$  be the symmetric difference distance defined on  $\mathfrak{R}$ . For a given profile  $\Pi = (R_1, \dots, R_m) \in R^m$ , a relation  $R^* \in \mathfrak{R}$  that minimizes the function  $\sum_{k=1}^m d(R_k, R)$  is called a **median** relation of  $\Pi$ . A number of problems occurring in the social sciences, in qualitative data analysis and in multicriteria decision making can be modelled as problems of finding medians of a profile of binary relations. In these contexts the profile  $\Pi$  represents collected data (preferences, similarities, games) and the objective is that of finding a median relation of  $\Pi$  with some special feature (representing e.g. consensus of preferences, clustering of similar objects, ranking of teams, etc.). In this paper we analyse the computational complexity of all such problems in which the median is required to satisfy one or more of the properties: reflexivity, symmetry, antisymmetry, transitivity and completeness. We prove that whenever transitivity is required (except when symmetry and completeness are also simultaneously required) then the corresponding median problem is *NP*-hard. In some cases we prove that they remain *NP*-hard when the profile  $\Pi$  has a fixed number of binary relations.

**SC 92–5** Jens Lang; Artur Walter: *A Finite Element Method Adaptive in Space and Time for Nonlinear Reaction–Diffusion–Systems.*

**Abstract:** Large scale combustion simulations show the need for adaptive methods. First, to save computation time and mainly to resolve local and instationary phenomena. In contrast to the widespread method of lines, we look at the reaction–diffusion equations as an abstract Cauchy problem in an appropriate Hilbert space. This means, we first discretize in time, assuming the space problems solved up to a prescribed tolerance. So, we are able to control the space and time error separately in an adaptive approach. The time discretization is done by several adaptive Runge–Kutta methods whereas for the space discretization a finite element method is used. The different behaviour of the proposed approaches are demonstrated on many fundamental exam-

les from ecology, flame propagation, electrodynamics and combustion theory.

**Keywords:** initial boundary value problem, Rothe–method, adaptive Runge–Kutta method, finite elements, mesh refinement.

**AMS(MOS) subject classifications:** 65J15, 65M30, 65M50.

**SC 92–6** R. Kornhuber; G. Wittum: *Discretization and Iterative Solution of Convection Diffusion Equations.*

**Abstract:** We propose an extended box method which turns out to be a variant of standard finite element methods in the case of pure diffusion and an extension of backward differencing to irregular grids if only convective transport is present. Together with the adaptive orientation proposed in a recent paper and a streamline ordering of the unknowns, this discretization leads to a highly efficient adaptive method for the approximation of internal layers in the case of large local Peclet numbers.

**SC 92–7** Christof Schütte; Michael Wulkow: *Quantum Theory with Discrete Spectra and Countable Systems of Differential Equations — A Numerical Treatment of Raman Spectroscopy.*

**Abstract:** Models for occupation dynamics in discrete quantum systems lead to large or even infinite systems of ordinary differential equations. Some new mathematical techniques, developed for the simulation of chemical processes, make a numerical solution of countable systems of ordinary differential equations possible. Both a basic physical concept for the construction of such systems and the structure of the numerical tools for solving them are presented. These conceptual aspects are illustrated by a simulation of an occupation process from spectroscopy. In this example the structures of rotation spectra observed in infrared spectroscopy are explained and some possibilities for an extension of the model are shown.

**SC 92–8** M. Grötschel; A. Martin; R. Weismantel: *Packing Steiner Trees: Polyhedral Investigations.*

**Abstract:** Let  $G = (V, E)$  be a graph and  $T \subseteq V$  be a node set. We call an edge set  $S$  a Steiner tree with respect to  $T$  if  $S$  connects all pairs of nodes in  $T$ . In this paper we address the following problem, which we call the weighted Steiner tree packing problem. Given a graph  $G = (V, E)$  with edge weights  $w_e$ , edge capacities  $c_e, e \in E$ , and node sets  $T_1, \dots, T_N$ , find edge sets  $S_1, \dots, S_N$  such that each  $S_k$  is a Steiner tree with respect to  $T_k$ , at most  $c_e$  of these edge sets use edge  $e$  for each  $e \in E$ , and such that the sum of the weights of the edge sets is minimal. Our motivation for studying this problem arises from the routing problem in VLSI–design, where given sets of points have to

be connected by wires. We consider the Steiner tree packing Problem from a polyhedral point of view and define an appropriate polyhedron, called the Steiner tree packing polyhedron. The goal of this paper is to (partially) describe this polyhedron by means of inequalities. It turns out that, under mild assumptions, each inequality that defines a facet for the (single) Steiner tree polyhedron can be lifted to a facet-defining inequality for the Steiner tree packing polyhedron. The main emphasis of this paper lies on the presentation of so-called joint inequalities that are valid and facet-defining for this polyhedron. Inequalities of this kind involve at least two Steiner trees. The classes of inequalities we have found form the basis of a branch & cut algorithm. This algorithm is described in our companion paper SC 92–9.

**SC 92–9** M. Grötschel; A. Martin; R. Weismantel: *Packing Steiner Trees: A Cutting Plane Algorithm and Computational Results.*

**Abstract:** In this paper we describe a cutting plane algorithm for the Steiner tree packing problem. We use our algorithm to solve some switchbox routing problems of VLSI-design and report on our computational experience. This includes a brief discussion of separation algorithms, a new LP-based primal heuristic and implementation details. The paper is based on the polyhedral theory for the Steiner tree packing polyhedron developed in our companion paper SC 92–8 and meant to turn this theory into an algorithmic tool for the solution of practical problems.

**SC 92–10** M. Jünger; A. Martin; G. Reinelt; R. Weismantel: *Quadratic 0/1 Optimization and a Decomposition Approach for the Placement of Electronic Circuits.*

**Abstract:** The placement in the layout design of electronic circuits consists of finding a non-overlapping assignment of rectangular cells to positions on the chip so that wireability is guaranteed and certain technical constraints are met. This problem can be modelled as a quadratic 0/1-program subject to linear constraints. We will present a decomposition approach to the placement problem and give results about NP-hardness and the existence of  $\varepsilon$ -approximative algorithms for the involved optimization problems. A graphtheoretic formulation of these problems will enable us to develop approximative algorithms. Finally we will present details of the implementation of our approach and compare it to industrial state of the art placement routines.

**Keywords:** Quadratic 0/1-Optimization, Computational Complexity, VLSI-Design.

**SC 92–11** Robert E. Bixby: *Das Implementieren des Simplex-Verfahrens: Die Startbasis.*

**Abstract:** Dieses Paper enthält die ersten beiden Teile einer geplanten Serie von Aufsätzen über die *CPLEX*<sup>2</sup>-Implementierung des Simplex-Verfahrens. Der erste Teil ist eine Einführung: er liefert eine kurze Beschreibung des Verfahrens für Probleme mit beschränkten Variablen, zusammen mit einer relativ ausführlichen Diskussion der numerischen Eigenschaften der Netlib-Probleme. Diese Probleme bilden auch das Fundament der rechnerischen Untersuchungen in den folgenden Teilen. Der zweite Teil enthält die Hauptergebnisse dieses Papers, eine Beschreibung der Methode, die von CPLEX verwendet wird, um eine Startbasis zu konstruieren.

**SC 92–12** CH. Lubich; U. Nowak; U. Pöhle; Ch. Engstler: *MEXX – Numerical Software for the Integration of Constraint Mechanical Systems.*

**Abstract:** MEXX (short for MEXanical systems eXtrapolation integrator) is a Fortran code for time integration of constrained mechanical systems. MEXX is suited for direct integration of the equations of motion in descriptor form. It is based on extrapolation of a time stepping method that is explicit in the differential equations and linearly implicit in the nonlinear constraints. It only requires the solution of well-structured systems of linear equations which can be solved with a computational work growing linearly with the number of bodies, in the case of multibody systems with few closed kinematic loops. Position and velocity constraints are enforced throughout the integration interval, whereas acceleration constraints need not be formulated. MEXX has options for time-continuous solution representation (useful for graphics) and for the location of events such as impacts. The present article describes MEXX and its underlying concepts.

**SC 92–13** Karin Gatermann: *Computation of Bifurcation Graphs.*

**Abstract:** The numerical treatment of Equivariant parameter-dependent nonlinear equation systems, and even more its automation requires the intensive use of group theory. This paper illustrates the group theoretic computations which are done in the preparation of the numerical computations. The bifurcation graph which gives the bifurcation subgroups is determined from the interrelationship of the irreducible representations of a group and its subgroups. The Jacobian is transformed to block diagonal structure using a modification of the transformation which transforms to block diagonal structure with respect to a supergroup. The principle of conjugacy is used everywhere to make symbolic and numerical computations even more efficient. Finally, when the symmetry reduced problems and blocks of Jacobian matrices are evaluated numerically, the fact that the given representation is a quasi-permutation representation is exploited automatically.

SC 92–14 B. Erdmann; F.A. Bornemann; R. Kornhuber: *Adaptive Multi-level-Methods in Three Space Dimensions*.

**Abstract:** We consider the approximate solution of selfadjoint elliptic problems in three space dimensions by piecewise linear finite elements with respect to a highly non-uniform tetrahedral mesh which is generated adaptively. The arising linear systems are solved iteratively by the conjugate gradient method provided with a multilevel preconditioner. Here, the accuracy of the iterative solution is coupled with the discretization error. As the performance of hierarchical bases preconditioners deteriorate in three space dimensions, the BPX preconditioner is used, taking special care of an efficient implementation. Reliable a-posteriori estimates for the discretization error are derived from a local comparison with the approximation resulting from piecewise quadratic elements. To illustrate the theoretical results, we consider a familiar model problem involving reentrant corners and a real-life problem arising from hyperthermia, a recent clinical method for cancer therapy.

SC 92–15 H.M. Möller: *On decomposing systems of polynomial equations with finitely many solutions*.

**Abstract:** This paper deals with systems of  $m$  polynomial equations in  $n$  unknown, which have only finitely many solutions. A method is presented which decomposes the solution set into finitely many subsets, each of them given by a system of type

$$f_1(x_1) = 0, f_2(x_1, x_2) = 0, \dots, f_n(x_1, \dots, x_n) = 0.$$

The main tools for the decomposition are from ideal theory and use symbolical manipulations. For the ideal generated by the polynomials which describe the solution set, a lexicographical Gröbner basis is required. A particular element of this basis allows the decomposition of the solution set. A recursive application of these decomposition techniques gives finally the triangular subsystems. The algorithm gives even for non-finite solution sets often also usable decompositions.

**Keywords:** Algebraic variety decomposition, Gröbner bases, systems of nonlinear equations.

SC 92–16 B. Leimkuhler; S. Reich: *The Numerical Solution of Constrained Hamiltonian Systems*.

**Abstract:** A Hamiltonian system subject to smooth constraints can typically be viewed as a Hamiltonian system on a manifold. Numerical computations, however, must be performed in  $\mathbf{R}^n$ . In this paper, canonical transformations from “Hamiltonian differential-algebraic equations” to ODEs in Euclidean space are considered.

In §2, canonical parameterizations or local charts are developed and it is shown how these can be computed in a practical framework. In §3 we consider the construction of unconstrained Hamiltonian ODE systems in the space in which the constraint manifold is embedded which preserve the constraint manifold as an integral invariant and whose flow reduces to the flow of the constrained system along the manifold. It is shown that certain of these unconstrained Hamiltonian systems force Lyapunov stability of the constraint-invariants, while others lead to an unstable invariant. In §4, we compare various projection techniques which might be incorporated to better insure preservation of the constraint-invariants in the context of numerical discretization. Numerical experiments illustrate the degree to which the constraint and symplectic invariants are maintained under discretization of various formulations.

**Keywords:** differential-algebraic equations, Hamiltonian systems, canonical discretization schemes.

**AMS(MOS) subject classification:** 65L05.

**SC 92-17** Shuli Yang: *MmB schemes on regular triangular meshes for 2-D conservation laws.*

**Abstract:** In this paper, two classes of second order accurate high resolution schemes are presented on regular triangular meshes for initial value problem of two dimensional conservation laws. The first class are called Runge-Kutta-FVM MmB (locally Maximum-minimum Bounds preserving) schemes, which are first discretized by (FVM) finite volume method in space direction and modifying numerical fluxes, and then by Runge-Kutta methods in time direction; The second class, constructed by Taylor expansion in time, and then by FVM methods and making modifications to fluxes, are called Taylor-FVM MmB schemes. MmB properties of both schemes are proved for 2-D scalar conservation law. Numerical results are given for Riemann problems of 2-D scalar conservation law and 2-D gas dynamics systems and some comparisons are made between the two classes of the schemes.

**Keywords and phrases:** MmB schemes, 2-D, conservation laws, gas dynamics systems, Runge-Kutta-FVM, Taylor-FVM.

**SC 92-18** F.A. Bornemann: *Adaptive Solution of One-Dimensional Scalar Conservation Laws with Convex Flux.*

**Abstract:** A new adaptive approach for one-dimensional scalar conservation laws with convex flux is proposed. The initial data are approximated on an adaptive grid by a problem dependent, monotone interpolation procedure in such a way, that the multivalued problem of characteristic transport can be easily and explicitly solved. The uni-



que entropy solution is chosen by means of a selection criterion due to LAX. For arbitrary times, the solutions is represented by an adaptive monotone spline interpolation. The spatial approximation is controlled by local  $L^1$ -error estimated. As a distinctive feature of the approach, there is no discretization in time. The method is monotone on fixed grids. Numerical examples are included, to demonstrate the predicted behavior.

**Keywords:** method of characteristics, adaptive grids, monotone interpolation,  $L^1$ -error estimates

**AMS(MOS) subject classifications:** 65M15, 65M25, 65M50.

**SC 92–19** Günter M. Ziegler: *Shellability of Chessboard Complexes.*

**Abstract:** The matchings in a complete bipartite graph form a simplicial complex, which in many cases has strong structural properties. We use an equivalent description as chessboard complexes: the complexes of all non-taking rook positions on chessboards of various shapes.

In this paper we construct ‘certificate  $k$ -shapes’  $\Sigma(m, n, k)$  such that if the shape  $A$  contains some  $\Sigma(m, n, k)$ , then the  $(k-1)$ -skeleton of the chessboard complex  $\Delta(A)$  is *vertex decomposable* in the sense of Provan & Billera. This covers, in particular, the case of rectangular chessboards  $A = [m] \times [n]$ , for which  $\Delta(A)$  is vertex decomposable if  $n \geq 2m-1$ , and the  $(\lfloor \frac{m+n+1}{3} \rfloor - 1)$ -skeleton is vertex decomposable in general.

The notion of vertex decomposability is a very convenient tool to prove shellability of such combinatorially defined simplicial complexes. We establish a relation between vertex decomposability and the CL-shellability technique (for posets) of Björner & Wachs.

**SC 92–20** Shuli Yang: *Numerical Riemann solutions in multi-pieces for 2-D gas dynamics systems I. Contact discontinuities.*

**Abstract:** The numerical solutions of Riemann problems in three, four, five and six pieces, which only contain contact discontinuities, are presented by using Taylor FVM MmB schemes on regular triangular meshes for 2-D gas dynamics systems. The 2-D Riemann initial data are as defined in [1], under the assumption that each jump in initial data outside of the origin projects exactly one planar wave of shocks, centered rarefaction waves, or contact discontinuities. The main ends of the paper are that spirals will be shown for some configurations and the relations of the solutions between different distributions of Riemann initial data are explained by the numerical solutions of modified Riemann problems.

**Keywords and phrases:** Riemann problem, gas dynamics systems, spiral, MmB schemes.

SC 92–21 U. Nowak: *Dynamic Sparsing in Stiff Extrapolation Methods*.

**Abstract:** Based on a simple stability analysis for the semi-implicit Euler discretization a new dynamic sparsing procedure is derived. This procedure automatically eliminates “small” elements of the Jacobian matrix. As a consequence, the amount of work needed to handle the linear algebra within a semi-implicit extrapolation integrator can be reduced drastically. Within the course of integration the sparsing criterion, which decides what “small” means, is dynamically adapted to ensure stability of the discretization scheme. Thus, stepsize restrictions due to instability can be avoided. Numerical experiments for quite different problems show robustness and efficiency of this dynamic sparsing technique. The techniques developed here in the context of stiff extrapolation integrators can, in principle, be applied to W-methods, where exact Jacobians may be replaced by “sufficiently good” approximations.

**Keywords:** Large scale integration, extrapolation methods, stiff ODEs, W-methods, sparse matrix techniques.

SC 92–22 M. Grötschel; C.L. Monma; M. Stoer: *A Polyhedral Approach to Network Connectivity Problems (Extended Abstract)*.

**Abstract:** We present a polyhedral approach for the general problem of designing a minimum-cost network with specified connectivity requirements. This includes identifying classes of facet-defining inequalities and using them in a cutting plane approach for obtaining optimal or near-optimal solutions. Preliminary computational results with this approach are presented.

SC 92–23 Nguyen Ngoc Chu: *An Algorithm for Optimizing a Linear Function over the Integer Efficient Set*.

**Abstract:** Whereas optimization of a linear function over an efficient set is a favourite topic for theoretical studies, the problem ( $P^I$ ) of finding a maximal value of a linear function  $dx$  over an integer efficient set is still open. The problem ( $P^I$ ) is NP-hard and it is very unlikely that the maximal objective value of the integer problem ( $P^I$ ) in many cases is greater than the maximal objective value of its corresponding continuous problem ( $P$ ). In this paper we pay attention to the study of the problem ( $P^I$ ) and some related properties of the problem ( $P$ ). In particular, we establish conditions determining whether or not an optimal solution to the problem ( $P$ ) is an optimal solution to the corresponding linear program. For the problem ( $P^I$ ) we find an upper bound for its optimal objective value and present an algorithm which gives a global optimal solution after a finite number of steps. We also study two particular classes of problems ( $P^I$ ): the bicriteria case and the case when  $d$  is a nonnegative linear combination of the vectors-criteria

defining the efficient set.

**Keywords:** Multiple objective linear programming, integer efficient set, efficient cone, cutting plane.

- SC 92-24** M. Grötschel; C.L. Monma; M. Stoer. *Polyhedral and Computational Investigations for Designing Communication Networks with High Survivability Requirements.*

**Abstract:** We consider the important practical and theoretical problem of designing a low-cost communications network which can survive failures of certain network components. Our initial interest in this area was motivated by the need to design certain “two-connected” survivable topologies for fiber optic communication networks of interest to the regional telephone companies. In this paper, we describe some polyhedral results for network design problems with higher connectivity requirements. We also report on some preliminary computational results for a cutting plane algorithm for various real-world and random problems with high connectivity requirements which shows promise for providing good solutions to these difficult problems.

- SC 92-25** C.E. Ferreira; M. Grötschel; S. Kiefl; L. Krispenz; A. Martin; R. Weismantel: *Some Integer Programs Arising in the Design of Main Frame Computers.*

**Abstract:** In this paper we describe and discuss a problem that arises in the (global) design of a main frame computer. The task is to assign certain functional units to a given number of so called multi chips or printed circuit boards taking many technical constraints into account and minimizing a complex objective function.

We describe the real world problem. A thorough mathematical modeling of all aspects of this problem results in a rather complicated integer program, that seems to be hopelessly difficult – at least for the present stage of integer programming technology.

We introduce several relaxations of the general model which are also NP-hard, but seem to be more easily accessible. The mathematical relations between the relaxations and the exact formulation of the problem are discussed as well.

- SC 92-26** M. Grötschel; A. Martin; R. Weismantel: *Routing in Grid Graphs by Cutting Planes.*

**Abstract:** In this paper we study the following problem, which we call the weighted routing problem. Let be given a graph  $G = (V, E)$  with non-negative edge weights  $w_e \in \mathbb{R}_+$  and integer edge capacities  $c_e \in \mathbb{N}$  and let  $N = \{T_1, \dots, T_N\}$ ,  $N \geq 1$ , be a list of node sets. The weighted routing problem consists in finding edge sets  $S_1, \dots, S_N$  such that, for each  $k \in \{1, \dots, N\}$ , the subgraph  $(V(S_k), S_k)$  contains

an  $[s, t]$ -path for all  $s, t \in T_k$ , at most  $c_e$  of these edge sets use edge  $e$  for each  $e \in E$ , and such that the sum of the weights of the edge sets is minimal. Our motivation for studying this problem arises from the routing problem in VLSI-design, where given sets of points have to be connected by wires. We consider the weighted routing problem from a polyhedral point of view. We define an appropriate polyhedron and try to (partially) describe this polyhedron by means of inequalities. We briefly sketch our separation algorithms for some of the presented classes of inequalities. Based on these separation routines we have implemented a branch and cut algorithm. Our algorithm is applicable to an important subclass of routing problems arising in VLSI-design, namely to problems where the underlying graph is a grid graph and the list of node sets is located on the outer face of the grid. We report on our computational experience with this class of problem instances.

## 6.2 Technical Reports

**TR 92-1** K. Schöffel: *Ab initio Quantum Chemical Calculations with GAMESS-UK and GAUSSIAN90 Program Packages – A Comparison.*

**Abstract:** Two commercially available molecular electronic structure software packages GAUSSIAN90 and GAMESS-UK are compared. Basis for this comparison is a benchmark suite which is designed to highlight the typical range of calculations commonly performed by the ab initio computational chemist.

**TR 92-2** Klaus Schöffel: *Computational Chemistry Software at ZIB.*

**Abstract:** The following report intends to provide a survey over the computational chemistry molecular structure software installed on the supercomputers CRAY X-MP/216 and CRAY Y-MP2E/164 at ZIB. It shows what kind of problems can be tackled with the existing chemistry software, which covers a wide range of ab initio, semiempirical, molecular mechanics, and dynamics applications.

**TR 92-3** Robert Weismantel: *Plazieren von Zellen: Theorie und Lösung eines quadratischen 0/1-Optimierungsproblems.*

**Abstract:** Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit dem Platzierungsproblem, welches beim Entwurf elektronischer Schaltungen auftritt. Das Platzierungsproblem modellieren wir als ein quadratisches 0/1-Optimierungsproblem unter linearen Nebenbedingungen und untersuchen das Modell komplexitätstheoretisch. Der zweite Aspekt der Arbeit bezieht sich auf die Lösung praktischer Problembeispiele im sogenannten "Sea of cells"-Entwurfstil. Zur Lösung dieser Beispiele wur-

de ein Prototyp implementiert und mit “state of the art”-Plazierungsverfahren verglichen.

Schließ lich werden wir uns mit dem Clusteringproblem, das eine Variante des Mehrfachschnitt-Problems darstellt, beschäftigen. Dabei steht einerseits im Vordergrund, wie diese Probleme heuristisch gelöst werden können und wie die Integration des Ansatzes in das Plazierungsprogramm erfolgt. Andererseits soll das Clusteringproblem polyedrisch untersucht werden.

**TR 92–4** Alexander Martin: *Packen von Steinerbäumen: Polyedrische Studien und Anwendungen.*

**Abstract:** Gegeben sei ein Graph  $G = (V, E)$  mit positiven Kantenkapazitäten  $c_e$  und Knotenmengen  $T_1, \dots, T_N$ . Das Steinerbaumpackungsproblem besteht darin, Kantenmengen  $S_1, \dots, S_N$  zu finden, so daß jedes  $S_k$  die Knoten aus  $T_k$  verbindet und jede Kante  $e$  in höchstens  $c_e$  Kantenmengen aus  $S_1, \dots, S_N$  vorkommt. Eine zulässige Lösung dieses Problems nennen wir eine Steinerbaumpackung. Ist zusätzlich eine Gewichtung der Kanten gegeben und nach einer bezüglich dieser Gewichtung minimalen Steinerbaumpackung gesucht, so sprechen wir vom gewichteten Steinerbaumpackungsproblem. Die Motivation zum Studium dieses Problems kommt aus dem Entwurf elektronischer Schaltungen. Ein dort auftretendes Teilproblem ist das sogenannte Verdrahtungsproblem, das im wesentlichen darin besteht, gegebene Punktmen-gen unter bestimmten Nebenbedingungen und Optimalitätskriterien auf einer Grundfläche zu verbinden. Wir studieren das Steinerbaumpackungsproblem aus polyedrischer Sicht und definieren ein Polyeder, dessen Ecken genau den Steinerbaumpackungen entsprechen. Anschließend versuchen wir, dieses Polyeder durch “gute” beziehungsweise facetten-definierenden Ungleichungen zu beschreiben. Basierend auf diesen Ungleichungen entwickeln wir ein Schnittebenenverfahren. Die Lösung des Schnittebenenverfahrens liefert eine untere Schranke für die Optimallösung und dient als Grundlage für die Entwicklung guter Primalheuristiken. Wir haben das von uns implementierte Schnittebenenverfahren an einem Spezialfall des Verdrahtungsproblems, dem sogenannten Switchbox-Verdrahtungsproblem, getestet und vielversprechende Ergebnisse erzielt.

**TR 92–5** Andreas Hohmann; Claudia Wulff: *Modular Design of Extrapolation Codes.*

**Abstract:** In this paper we describe a modular implementation of the well-established extrapolation codes EULEX, EULSIM and DIFEX for initial value problems of ordinary differential equations. The basic module embodies an abstract extrapolation method with order and step-

size control. Based on this module the particular integration codes only have to provide the underlying discretization schemes.

**TR 92–6** M. Grötschel; J. Lügger; W. Sperber: *Elektronische Fachinformation im Bereich der Mathematik an Hochschulen und Statusbericht zum DMV-Projekt “Fachinformation”*.

**Abstract:** Im Bereich der Mathematik entwickelte sich in Deutschland die elektronische Fachinformation in Form der Online-Datenbank MATH und der CD-ROM CompactMATH auf der Grundlage der Arbeiten des Referateorgans “Zentralblatt für Mathematik und Ihre Grenzgebiete”. Das “Zentralblatt” fand weithin Anerkennung und Verbreitung. Die Rezeption elektronischer Fachinformation ging jedoch – nicht nur im Bereich der Mathematik – nur zögerlich vonstatten. Die Gründe dafür werden in einer vom Bundesminister für Forschung und Technologie (BMFT) initiierten Studie analysiert. Ein kürzlich von der Deutschen Mathematiker-Vereinigung begonnenes und vom BMFT gefördertes Vorhaben hat die “Verbesserung des benutzerorientierten Zugriffs auf fachspezifische Online-Datenbanken und CD-ROM für Mathematische Institute in der Bundesrepublik Deutschland” zum Ziel. Insgesamt 51 mathematische Fachbereiche und Institute nehmen daran teil. Elektronische Fachinformation soll zu einem festen Bestandteil des methodischen Instrumentariums der wissenschaftlichen Arbeit werden. Diese Schrift soll die Ausgangslage in den Fachbereichen darstellen und die organisatorischen und technischen Infrastrukturmaßnahmen erläutern, mit denen den spezifischen Nutzungshemmnissen begegnet werden soll.

**TR 92–7** Abteilung Visualisierung und Paralleles Rechnen: *Handbuch zur Visualisierung am ZIB*.

**Abstract:** Scientists intending to employ scientific visualization techniques are confronted with the unpleasant task of choosing visualization software that meets their specific needs. A good choice requires consideration of several aspects. Most important are functionality, i.e. the set of supported visual representations, and restrictions due to the user’s production environment (i.e. available hardware and software platforms, software compatibility constraints, need of specific input and output formats, network distribution requirements). Crucial are quality demands, ranging from simple graphics for interactive control of simulations, to images of highest quality (glossy prints, slides or video movies) for presentation purposes. Further aspects of consideration are: ease of use, level on which the user is willing to program, portability, conformity to prevalent standards, availability in the world-wide user community, future dissemination, as well as emerging trends in computer graphics and scientific visualization. The aim of this manual is to

give a survey on the graphics and visualization software that is currently being provided at ZIB (mainly for internal use). The whole range of computer graphics software types relevant in mathematical, natural and technical sciences is covered: image synthesis (basic and higher graphics libraries, plot programs, visualization environments, combined text and drawing programs, renderers), image processing and storage (raster and vector formats, page description languages, raster toolkits for image processing and format conversion), capturing of images as well as printing on paper and recording on photographic film or video tape. This information, together with a glossar and recommendations for further reading, should help prospective users in getting started and assist them in making good choices of graphics and visualization software.

### 6.3 Beiträge in Zeitschriften

1. J. Ackermann, H. Hogreve: *On the metastability of the  $^1\Sigma_g^+$  ground state of  $He_2^{2+}$  and  $Ne_2^{2+}$  : a case study of binding metamorphosis.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **25**, pp. 4069–4098 (1992)
2. K. Akemi, Ph. deForcrand, M. Fujisaki, T. Hashimoto, H.C. Hege, et al., *Hadronic Spectroscopy on a  $32^3 * 48$  Lattice*, Nuclear Physics B (Proc. Suppl.) **16**, pp. 293-295 (1992)
3. K. Akemi, Ph. deForcrand, M. Fujisaki, T. Hashimoto, H.C. Hege, et al.,  *$SU(3)$  Renormalization Group Study on Parallel Computer AP1000*, Nuclear Physics B (Proc. Suppl.)**16**, pp. 420–422 (1992)
4. K. Akemi, Ph. deForcrand, M. Fujisaki, T. Hashimoto, H.C. Hege, et al., *QCD on the Highly Parallel Computer AP1000*, Nuclear Physics B (Proc. Suppl.)**16**, pp. 644–646 (1992)
5. A. Björner, G. M. Ziegler: *Combinatorial stratification of complex arrangements.* Journal of the American Mathematical Society **5**, pp. 105–149 (1992)
6. A. Björner, G. M. Ziegler: *Introduction to Greedoids.* In: *Matroid Applications* (N. White, ed.), Encyclopedia of Mathematics **40**, pp. 284-357, Cambridge University Press (1992)
7. F.A. Bornemann: *Adaptive Multilevel Solution of Parabolic Equations in 3D.* In: *Advances in Computer Methods for PDEs–VII*, R. Vichnevetsky, D. Knight, G. Richter (Eds.), IMACS, New Bronswick, pp. 75–81 (1992)

8. F.A. Bornemann: *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations III. 2D Error Estimation and Multilevel Preconditioning*. IMPACT Comput. Sci. Eng. **4**, pp. 1–45 (1992)
9. P. Deuffhard, F.A. Potra: *Asymptotic Mesh Independence of Newton–Galerkin Methods Via a Refined Mysovskii Theorem*. SIAM J. Numer. Anal., **29**, No. 5, pp. 1395–1412 (1992)
10. M. Deza, M. Grötschel, M. Laurent: *Clique–Web Facets for Multicut Polytopes*. Mathematics of Operations Research **17**, pp. 981–1000 (1992)
11. M. Grötschel: *Discrete Mathematics in Manufacturing*. In: Robert E. O’Malley (ed.), ICIAM 1991: Proceedings of the Second International Conference on Industrial and Applied Mathematics, SIAM pp. 119–145 (1992)
12. M. Grötschel, C. Monma, M. Stoer: *Computational results with a cutting plane algorithm for designing communication networks with low connectivity constraints*. Operations Research **40**, pp. 309–330 (1992)
13. M. Grötschel, C. Monma, M. Stoer: *Facets for Polyhedra Arising in the Design of Communication Networks with Low Connectivity Constraints*. SIAM Journal on Optimization **2**, pp. (1992)
14. M. Grötschel, Zaw Win: *A Cutting Plane Algorithm for the Windy Postman Problem*. Mathematical Programming **55**, pp. 339–358 (1992)
15. H.C. Hege, R. Knecht: *Parallel Computing ’91*, Parallel Computing **18**, pp. 473–476 (1992)
16. J. Lang, A. Walter: *A Finite Element Method Adaptive in Space and Time for Nonlinear Reaction–Diffusion–Systems*. IMPACT Comput. Sci. Eng. **4**, pp. 269–314 (1992)
17. J. Lang: *Raum– und zeitadaptive Finite Elemente Methoden für Reaktions–Diffusionsgleichungen*. In: Proceedings 8. TECFLAM–Seminar “Modellierung technischer Flammen”, Darmstadt (1992)
18. F. Schmidt, H.–P. Nolting: *Adaptive Multilevel Beam Propagation Method*. IEEE Photonics Technology Letters **4**, No. 12, pp. 1381–1383 (1992)
19. M. Wulkow, P. Deuffhard: *Towards an Efficient Computational Treatment of Heterogeneous Polymer Reactions*. In: S.O. Fatunla (ed.), Computational Ordinary Differential Equations. University Press, Nigeria, pp. 287–306 (1992)



20. G. M. Ziegler: *Matroid shellability,  $\beta$ -systems, and affine hyperplane arrangements*. Journal of Algebraic Combinatorics **1**, pp. 283–300 (1992)

## 6.4 Monographien

### Numerische Mathematik I. Eine algorithmisch orientierte Einführung. 2. überarbeitete Auflage.

**Bearbeiter:** P. Deuffhard, A. Hohmann

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Der erfreuliche Anklang des im Sommer 1991 erstmalig erschienenen Lehrbuchs “Numerische Mathematik – eine algorithmisch orientierte Einführung” hat rascher als vorgesehen eine zweite Auflage notwendig werden lassen, die zu Beginn des Jahres 1993 in Druck gehen wird. Die Gelegenheit wurde genutzt, um die erste Auflage in einer Reihe von Details zu überarbeiten, zum Teil auch zu vereinfachen. Der größte Teil der Änderungen geht auf Erfahrungen zurück, die F. Bornemann im Rahmen einer Vorlesung im Sommersemester 1992 an der FU Berlin gesammelt hat.

Zu den Vereinfachungen gehört die Darstellung der Fehlertheorie, die nun durchgängig linearisiert durchgeführt wird. Bei den Verbesserungen ist eine neue Herleitung der schnellen Fouriertransformation hervorzuheben, die auf einen Vorschlag von D. Braess (Ruhruniversität Bochum) zurückgeht.

Dank der Mitarbeit von R. Kornhuber (im Zusammenhang mit einer Vorlesung an der TU Berlin) konnte auch der Abschnitt zum vorkonditionierten cg-Verfahren weiter optimiert werden.

In Erwartung eines Fortsetzungsbandes über gewöhnliche Differentialgleichungen von F. Bornemann und P. Deuffhard wird das Buch ab der zweiten Auflage unter dem Titel “Numerische Mathematik I” firmieren.

### Literatur

- [1] P. Deuffhard, A. Hohmann: *Numerische Mathematik I – eine algorithmisch orientierte Einführung*, 2. überarbeitete Auflage, de Gruyter, Berlin, New York. In Vorbereitung.

# Numerische Mathematik II. Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen

**Bearbeiter:** P. Deuffhard, F. Bornemann

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Berichtszeitraum wurde mit der Arbeit an dem Folgeband zu “Numerische Mathematik I. Eine algorithmisch orientierte Einführung” von P. Deuffhard und A. Hohmann begonnen. Es soll ebenso für Mathematikstudenten wie für Ingenieure und Naturwissenschaftler in der Praxis als Lehrbuches geeignet sein. Ziel ist der möglichst direkte theoretische Zugang auf effektive Algorithmen, die sich in schwierigen Anwendungen bewährt haben. Deshalb steht eine anwendungsbezogene *Auswahl* gegenüber einer enzyklopädischen Behandlung des Gebietes im Vordergrund. Als Inhalt ist geplant:

## I Einführung

### 1 Mathematische Modellierung durch gewöhnliche Differentialgleichungen

- 1.1 Dynamische Systeme
- 1.2 Dreikörperproblem
- 1.3 Drei-Spezies-Reaktion

### 2 Theoretischer Hintergrund

- 2.1 Existenz und Eindeutigkeit
- 2.2 Analytische Vorbehandlung singulärer Anfangswertprobleme
- 2.3 Sensitivität und Kondition
- 2.4 Stabilität von Trajektorien
- 2.5 Lineare Differenzgleichungen
- 2.6 Differentiell-algebraische Systeme
- 2.7 Übungen

## II Einschrittverfahren

### 3 Einschrittverfahren für nichtsteife Probleme

- 3.1 Konsistenz und Diskretisierungsfehler
- 3.2 Runge-Kutta Verfahren
- 3.3 Extrapolationsverfahren
- 3.4 Schrittweitensteuerung
- 3.5 Übungen

## **4 Einschrittverfahren für steife und differentiell–algebraische Probleme**

- 4.1 Lineare Stabilitätstheorie
- 4.2 Implizite Runge–Kutta Verfahren vom Kollokationstyp
- 4.3 Implementierung impliziter Runge-Kutta Verfahren
- 4.4 Vereinfachungen impliziter Runge-Kutta Verfahren
- 4.5 Linear-implizite Extrapolationsverfahren
- 4.6 Behandlung differentiell–algebraischer Probleme
- 4.7 Übungen

## **III Mehrschrittverfahren**

### **5 Mehrschrittverfahren für nichtsteife Probleme**

- 5.1 Konsistenz, Stabilität und Diskretisierungsfehler
- 5.2 Adams Verfahren
- 5.3 Übungen

### **6 Mehrschrittverfahren für steife und differentiell–algebraische Probleme**

- 6.1 Lineare Stabilitätstheorie
- 6.2 BDF Verfahren
- 6.3 Gemischte Mehrschrittverfahren
- 6.4 Übungen

## **IV Große Anwendungsklassen**

### **7 Effektive Integration sehr großer Anfangswertprobleme**

- 7.1 Berechnung der Jacobi–Matrizen
- 7.2 Iterative Lösung der linearen Gleichungssysteme
- 7.3 Dynamisches Sparsing
- 7.4 Verwendung expliziter Verfahren an der Stabilitätsgrenze
- 7.5 Übungen

### **8 Beispiele großer Anwendungsklassen**

- 8.1 Chemische Reaktionskinetik
- 8.2 Elektronik
- 8.3 Mehrkörperdynamik
- 8.4 Linienmethode für partielle Differentialgleichungen
- 8.5 Übungen

### **9 Anfangswertmethoden für zeitartige Randwertprobleme**

- 9.1 Zeitartige Randwertprobleme
- 9.2 Zielmethoden
- 9.3 Lösung der zyklischen linearen Gleichungssysteme
- 9.4 Grenzschichtprobleme
- 9.5 Übungen

## **Design of Survivable Networks**

**Bearbeiter:** M. Stoer:

Lecture Notes in Mathematics **1531**, Springer-Verlag Berlin – Heidelberg 1992

Dieses Buch stellt die Doktorarbeit von Mechthild Stoer unter Anleitung von Prof. Grötschel dar. Es geht darin um ein Problem beim Bau von Kommunikationsnetzwerken, nämlich das Kabel-Layout so zu gestalten, daß bei Ausfall eines oder mehrerer Kabel oder Knoten wichtige Teile des Netzwerks noch zusammenhängen, und die gesamten Kabelplatzierungskosten möglichst niedrig sind. Graphentheoretisch läßt sich das Problem so verstehen, daß man in dem Graphen der möglichen Kabelverbindungen einen kostenminimalen Untergraphen mit gewissen Zusammenhangseigenschaften sucht. Für das zugehörige ganzzahlige lineare Programm werden neue nichtredundante Ungleichungsklassen entwickelt und in einem sogenannten Schnittebenenverfahren eingesetzt. Die angeführten Rechenergebnisse zeigen, daß mit diesem Verfahren für gewisse Anwendungen aus dem Telekommunikationsbereich, in denen nur niedriger Zusammenhang verlangt wird, Optimallösungen in kurzer Zeit gefunden wurden, und in anderen praktischen Anwendungen mit höherer gewünschter Ausfallsicherheit gute untere Schranken bestimmt werden konnten.

## **6.5 Dissertationen**

**Technische Universität Berlin**

**02.07.1992 A. Martin**

Gutachter:

M. Grötschel, TU Berlin

R. H. Möhring, TU Berlin

Titel der Dissertation und Thema der Disputation:

Packen von Steinerbäumen: Polyedrische Studien und Anwendung

**02.07.1992 R. Weismantel**

Gutachter:

M. Grötschel, TU Berlin

R. H. Möhring, TU Berlin

Titel der Dissertation und Thema der Disputation:

Plazieren von Zellen: Theorie und Lösung eines quadratischen 0/1 Optimierungproblems

## 6.6 Habilitationen

17.08.92 G. M. Ziegler

Gutachter:

M. Grötschel, TU Berlin

P. Kleinschmidt, Passau

R. D. MacPherson, MIT

Titel der Habilitationsschrift:

G. M. Ziegler: *Combinatorial Models for Subspace Arrangements*. Habilitationsschrift, TU Berlin, April 1992.

## 6.7 Auszeichnungen

**Dr. Folkmar Bornemann**, *Abteilung Numerik*:

*Ernst-Reuter-Preis* für seine hervorragende Dissertation “An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations in Two Space Dimensions” an der Freien Universität Berlin.

**Dr. Mechthild Stoer**, *Abteilung Kombinatorische Optimierung*:

*Dissertationspreis* der Gesellschaft für Mathematik, Ökonomie und Operations Research (GMÖOR) für ihre Dissertation “Design of Survivable Networks”.

**Dipl.–Math. Claudia Wulff**, *Abteilung Numerik*:

*IBM-Preis* für hervorragende Nachwuchswissenschaftler für ihren Vortrag über das Thema ihrer Diplomarbeit “Berechnung symmetriebrechender Verzweigungen periodischer autonomer Differentialgleichungen” auf der Studentenkonzferenz im Rahmen der DMV-Tagung in Berlin.

## 6.8 Herausgabe von Zeitschriften

**P. Deuffhard** ist Hauptherausgeber der Zeitschrift  
IMPACT of Computing in Science and Engineering

**M. Grötschel** ist Mitherausgeber der Zeitschriften

- Computing
- Discrete and Computational Geometry
- Matemática Aplicada e Computacional
- Mathematical Programming A
- Mathematical Programming B
- Mathematics of Operations Research
- SIAM Journal on Discrete Mathematics
- Surveys of Mathematics for Industry
- Zeitschrift für Operations Research

# Kapitel 7

## Produkte

### 7.1 Fachinformation und Dokumentation

#### DMV-Projekt “Fachinformation”

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

**Kooperation:** 51 Mathematische Institute und Fachbereiche an Universitäten und Hochschulen in Deutschland, Fachinformationszentrum Karlsruhe, Deutsche Mathematiker Vereinigung, Projektträger Fachinformation  
Dieses Projekt wird vom BMFT gefördert.

**Beschreibung:** Der 1.1.1992 markiert den offiziellen Beginn des ersten Förderprojekts des BMFT auf dem Gebiet der Mathematik, ein Infrastrukturvorhaben mit dem Kurztitel “Fachinformation”. Schwerpunkt und Ziel ist die dezentrale Nutzung elektronischer Datenbanken, insbesondere der elektronischen Versionen des “Zentralblatt für Mathematik” in den Mathematischen Fachbereichen der Universitäten und Hochschulen der Bundesrepublik Deutschland. Das ZIB hat in diesem Projekt im Auftrag der Deutschen Mathematiker Vereinigung e.V. (DMV) die zentrale wissenschaftliche Leitung übernommen. Dem eigentlichen Projekt wurde eine Vorphase (1.1.1992–1.9.1992) vorangestellt, die das Vorhaben durch eine umfassende Information und Beratung der Fachbereiche inhaltlich und organisatorisch vorbereitete. Insbesondere mit dem ersten Workshop zum Projekt, der thematisch einen Bogen von technischen Referenzlösungen bis zu den förderpolitischen Zielen spannte, sowie der Unterstützung der Fachbereiche bei der Formulierung der Förderanträge wurde den Fachbereichen seitens der Projekt-Leitung wesentliche Impulse und Hilfe gegeben. Das Vorhaben stieß auf eine erfreulich große Resonanz und Akzeptanz in den Mathematischen Institutionen: 51 Fachbereiche und Institute stellten konzeptionell ausgereifte Förderanträge beim BMFT, die alle bewilligt werden konnten. Basis der Anträge war die Schaffung der organisatorischen und technischen Infrastruktur vor Ort. Das bedeutet im einzelnen: Alle Fachbereiche hatten einen für dieses Projekt verantwortlichen Mitarbeiter, den Fachinformationsbeauftragten, zu benennen. Im Projektantrag hatte der Fachbereich in der Person des Fachinformationsbeauftragten, ausgehend vom technischen Level im Fachbereich eine geeignete Hardware- und Softwarelösung als Recherchemöglichkeit so-

wie die Zugangs- und Zugriffsmöglichkeiten zu konzipieren. Eine Integration von elektronischer Fachinformation in Lehre und Forschung, die Voraussetzung für den Erfolg des Fördervorhabens ist, bedeutet aber mehr als nur die Schaffung technischer Voraussetzungen. Alle Fachbereiche entwickelten eigene Konzepte für die Information, die Beratung, die Schulung und das Training elektronischen Recherchierens und Retrievals für Mitarbeiter und Studenten. Ebenso wichtig ist die finanzielle Absicherung der Nutzung elektronischer Fachinformation. Das kann letztlich nur über eine Etablierung der Fachinformation erfolgen. Im Projekt ist eine stufenweise Übernahme der Recherchekosten vorgesehen. Es ist das Ziel des Vorhabens, die Hochschulen und die Bundesländer an der Finanzierung der Fachinformation zu beteiligen. In der Einführungsphase, die am 1.9.1992 begann, waren die Beschaffung, die Installation, die Netzanbindung und die Durchführung erster Übungsrecherchen die Schwerpunkte der Arbeit in den Fachbereichen. Die technisch angestrebten Lösungen reichen von Einzelplatzlösungen als Recherchearbeitsplatz über dezentrale Möglichkeiten in PC- oder Unix-Netzen bis zu derzeit technisch aufwendigen CD-ROM-Server Lösungen. Die weitaus größte Zahl der Fachbereiche konnte diese vorbereitenden Arbeiten 1992 abschließen und beginnt 1993 mit der Umsetzung der eigentlichen Projektarbeit, der Intensivierung der Nutzung der elektronischen Datenbanken, die wesentliche Vorteile gegenüber der konventionellen Literatursuche in den gebundenen Ausgaben der Referateorgane bieten. Der bisherige Projektverlauf hat einen wesentlichen Beitrag zur Verbreitung und Akzeptanz der elektronischen Fachinformation in den Mathematischen Fachbereichen geleistet. Über moderne Kommunikationsmöglichkeiten, wie einen am ZIB aufgebauten E-Mail-Verteiler ist eine schnelle Kommunikationsmöglichkeit für die Fachinformationsbeauftragten mit der Projekt-Leitung und untereinander, aber auch mit den Datenbankanbietern gegeben. Damit sind viele technische und organisatorische Probleme schnell und ohne großen Aufwand lösbar. Der unmittelbare Kontakt zu den Datenbankanbietern hat auch schon zu ersten Konsequenzen bei der Produktentwicklung geführt, insbesondere für die Verbesserung der Inhouse-Datenbank "CompactMATH" wurden Anregungen aus dem Projekt aufgegriffen und berücksichtigt. Im weiteren Verlauf ist es ein Ziel des DMV-Projekts, den gesamten Bereich der elektronischen Fachinformation für die Mathematik den Fachbereichen zu erschließen und zugänglich zu machen und damit eine wesentliche Verbesserung der Infrastruktur der Fachbereiche zu bewirken.



## 7.2 Verfügbare Produkte

### 7.2.1 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.

#### 1. Große nichtsymmetrische lineare Gleichungssysteme

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

#### 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)

#### 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
- LARKIN Simulation großer chemischer Reaktionskinetik

#### **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

#### **5. Stationäre partielle Differentialgleichungen**

- KASKADE Baukasten für adaptive Multilevel-Verfahren auf beliebigen Gebieten in 2-D
- 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 3-D

## 6. 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.

### 7.2.2 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, REDUCE für MS-DOS), Universität zu Köln (REDUCE für IBM /370), Joint Institute for Nuclear Research (Dubna, Rußland) und Queen Mary and Westfield College (London). Die folgenden im ZIB entwickelten Pakete für REDUCE sind erhältlich:

GROEBNER – H. Melenk, M. Möller, W. Neun: *Berechnung von Gröbner Basen für Polynomideale*

LININEQ – H. Melenk: *Lösen kleiner linearer Ungleichungssysteme*

REACTEON – H. Melenk: *Umformen chemischer Reaktionsgleichungen in Differentialgleichungen*

SOLVEALG – H. Melenk: *Lösen nichtlinearer Gleichungssysteme durch Rückführen auf Gröbner Basen*

SYMMETRY – K. Gatermann: *Lineare Darstellungstheorie für endliche symmetrische Gruppen*

TAYLOR – R. Schöpf: *Approximation von uni- und multivariaten Funktionen durch Potenzreihen*

### 7.2.3 GOS

Das System GOS (siehe Projekt Museumsdokumentation) wird inzwischen in der Form PC-GOS auch über den Rahmen der reinen Projektarbeit hinaus an einige interessierte Anwender weitergegeben. Da es sich derzeit noch um Pilotinstallationen handelt, ist noch keine endgültige Regelung für die Abdeckung der durch die Weitergabe entstehenden Belastungen (Ausbildung, Beratung) getroffen worden. Jedoch hat eine Kommission externer Gutachter zu dieser Frage ausführlich Stellung genommen in dem Sinne, daß die Beratung vornehmlich dezentral von den Ländern selbst zu organisieren sei.

## Kapitel 8

### Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern

#### 8.1 Vorträge und Gastaufenthalte

**N. Ascheuer**

**09.03.92** *Online-Optimierung eines Hochregallagers*. Universität Augsburg

**14.04.92** *Hamiltonian path problems with precedence constraints*. Workshop “Algorithmic approaches to large and complex combinatorial optimization problems”, SCIENCE project of the European Community, Capri, Italien

**23.04.92** *Hamiltonian Path problems with side constraints (encountering in the optimization of Flexible Manufacturing Systems)*. EPFL–Lausanne, Schweiz

**R. Borndörfer**

**07.05.1992** *An Assembly Line Scheduling Problem*. Workshop on Discrete Optimization in Mägdesprung, Institut für Mathematische Optimierung, Universität Magdeburg

**F.A. Bornemann**

**26.02.92** *Adaptive Berechnung zeitabhängiger thermischer Prozesse in zwei Raumdimensionen*. Vortrag vor der Arbeitsgruppe “Systemtechnologie” der Siemens AG, Erlangen

**05.03.92** *Adaptive Multilevel Solution of 3D Elliptic Boundary Value Problems*. Gamm – GACM Seminar, Hannover (5. – 6.3.1992)

**23.06.92** *Adaptive Multilevel Solution of Parabolic Equations*. 7th IMACS Conference on Computer Methods for Partial Differential Equations, New Brunswick, New Jersey, USA

**25.08.92** *Adaptive Berechnung zeitabhängiger thermischer Prozesse in zwei Raumdimensionen*. Vortrag am Institut für Chemische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart

- 14.09.92** *Adaptive Multilevel-Lösung zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen.* Übersichtsvortrag auf der DMV-Jahrestagung, Sektion Wissenschaftliches Rechnen, Humboldt Universität Berlin
- 24.11.92** *Adaptive Multilevel-Lösung zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen.* Vortrag am Fachbereich Mathematik der Universität Jena
- 10.12.92** *Adaptive Rothe's Method for Time-Dependent PDEs.* Tagung "Theory and Numerical Methods for Initial-Boundary Value Problems", Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, Leitung: H.-O. Kreiss, J. Lorenz

## H. Busch

- 07.04.92** *ZIB Site Overview.* CUG '92 in Berlin
- 06.11.92** *Einsatz der Data Migration Facility (DMF) im ZIB RJETOOL.* Arbeitskreis UNICOS, DLR Oberpfaffenhofen

## W. Dalitz

- Sept. 92** *Verteilung mathematischer Software mittels elektronischer Netze – die elektronische Bibliothek eLib für mathematische Software.* DMV-Jahrestagung, Humboldt Universität Berlin. Im Verlauf der Tagung wurden zusammen mit J. Lügger und W. Sperber in der Zeit vom 12. bis zum 18. September (ganztägig) Demonstrationen
- zur elektronischen Fachinformation und
  - zur elektronischen Bibliothek eLib für mathematische Software
- durchgeführt.

## P. Deuffhard

- 14.01.92** *Globale inexakte Newton-Methoden für diskretisierte nichtlineare partielle Differentialgleichungen.* Mathematisches Institut, TU München
- 15.01.92** *Scientific Computing am ZIB.* Zentralbereich Forschung und Entwicklung, Siemens AG München
- 07.02.92** *Globale inexakte Newton-Methoden für diskretisierte nichtlineare partielle Differentialgleichungen.* Fachbereich Mathematik, Universität des Saarlandes, Saarbrücken

- 6./10.4.92** *Supercomputing Versus Computing on Supercomputers*. CRAY User Group (CUG), Jahrestagung Berlin
- 09.06.92** *Chemisches Computing am Konrad-Zuse-Zentrum Berlin – eine Auswahl*. Schering AG Berlin
- 27.06.92** *Kaskadenprinzip versus Parallelisierung*. GAMM-Workshop “Parallele Strukturen in der Numerik”, Lambrecht
- 05.07.92** *Recent Developments in the Adaptive Multilevel FEMily*. Tagung “Mathematische Modellierung und Simulation elektrischer Schaltungen und Halbleiter”, Oberwolfach
- 1./5.9.92** *Recent Advances in Self-adaptive Multilevel Finite Element Methods for PDEs*. International Conference Computation of Differential Equations and Dynamical Systems, Academia Sinica, Beijing/China
- 07.09.92** *Stochastic Versus Deterministic Numerical ODE Integration*. Workshop Stochastic Numerics, Gosen
- 21./25.9.92** *Adaptive Multilevel Finite Element Methods – a Survey*. Tagung NUMDIFF-6 Universität Halle-Wittenberg
- 26./30.10.92** *Adaptive Discrete Galerkin Methods for Macromolecular Processes*. 2. Gentner Symposium: Applied and Applicable Analysis, Gosen
- 20.11.92** *Adaptive diskrete Galerkinmethoden für makromolekulare Prozesse*. Festkolloquium anlässlich des 60. Geburtstages von Prof. Dr. Dr. h.c. R. Bullirsch. Mathematisches Institut, TU München
- 9./12.12.92** *Konzepte der Numerischen Mathematik im Feuer der Anwendungen*. Abschlußkolloquium Sonderforschungsbereich “Stochastische Modelle”, Universität Heidelberg

### **C.E. Ferreira**

- 12.04.1992** *Combined node-edge facets of the  $r$ -Clustering Polytope*. Workshop “Algorithmic approaches to large and complex combinatorial optimization problems”, SCIENCE project of the European Community, Capri, Italien
- 15.09.1992** *A Branch and Cut Algorithm for the Multiple Knapsack Problem*. DMV-Jahrestagung, Humboldt Universität Berlin

**H.–H. Frese**

**11.09.92** *An Overview of State-of-the-Art Visualization Systems.* Conference of the NAG Users Association. University of Kent at Canterbury, United Kingdom

**05.11.92** *Public Domain Software für Visualisierung Kommerzielle Visualisierungs- und Animationssoftware.* Workshop “Supercomputing und Visualisierung”, ZIB

**K. Gatermann**

**28.07.92** *Computation of Bifurcation Graphs.* AMS–SIAM Summer Seminar “Exploiting Symmetry in Applied and Numerical Analysis”, Fort Collins 27.–31. Juli 1992

**15.09.92** *Symbolisch–numerische Berechnung der Lösungen äquivarianter Systeme.* Sektionshauptvortrag auf der DMV–Jahrestagung, Sektion Wissenschaftliches Rechnen, Humboldt Universität Berlin, 13.–18. September 1992

**27.11.92** *Systems of polynomial equations with symmetry solved with Groebner bases.* Computer Algebra Contact Day, Leuven/Belgien

**30.11.92** *Numerics of Symmetry Breaking.* European Study Center on “Reactive and Diffusive Flows”, Heidelberg 22.11.–13.12.1992

**J. Gottschewski**

**15.06.92** *Verteilte Anwendungen auf Größtrechnern.* Arbeitskreis “Verteilte Anwendungen bei der Telekom”, Neckargemünd

**M. Grötschel**

**14.01.92** *The Polyhedral Approach to Combinatorial Optimization: The Basic Ideas.* 17th Conference on the Mathematics of Operations Research, Lunteren, Niederlande

**14.01.92** *The Polyhedral Approach to Combinatorial Optimization: Proof Techniques.* 17th Conference on the Mathematics of Operations Research, Lunteren, Niederlande

**15.01.92** *The Polyhedral Approach to Combinatorial Optimization: A Few Key Results.* 17th Conference on the Mathematics of Operations Research, Lunteren, Niederlande

- 16.01.92** *Solving Combinatorial Optimization Problems in Practice*. 17th Conference on the Mathematics of Operations Research, Lunteren, Niederlande
- 28.01.92** *Theoretical and Practical Aspects of Combinatorial Problem Solving*. Third Annual ACM–SIAM Symposium on “Discrete Algorithms”, Orlando, Florida, USA
- 31.01.92** *Scientific Computing at the Konrad–Zuse–Zentrum Berlin*. Bell Communications Research, Morristown, NJ, USA
- 05.02.92** *Scientific Computing at the Konrad–Zuse–Zentrum Berlin*. IBM T. J. Watson Research Center, Yorktown Height, NY, USA
- 18.02.92** *Kombinatorische Mathematik in der Elektroindustrie*. ZFE–Kolloquium, Siemens AG, München
- 03.04.92** *DMV–Projekt Fachinformation*. 1. Treffen der Fachinformationsbeauftragten des DMV–Projekts, Darmstadt
- 11.05.92** *Das Travelling–Salesman–Problem: Exakte Verfahren*. Graduiertenkolleg “Algorithmische Diskrete Mathematik”, Berlin
- 18.05.92** *Das Travelling–Salesman–Problem: Anwendungen und Heuristiken*. Graduiertenkolleg “Algorithmische Diskrete Mathematik”, Berlin
- 21.05.92** *Kombinatorische Optimierung in der Computerindustrie*. Symposium “Moderne Entwicklungen in der angewandten Mathematik”, Universität Ulm
- 07.07.92** *Moderne Anwendungen der Mathematik in der Computerindustrie*. Vortragskreis der Stipendiaten der Studienstiftung des Deutschen Volkes, Berlin
- 14.09.92** *Elektronische Fachinformation im Bereich der Mathematik – Statusbericht zum DMV–Projekt “Fachinformation”*. DMV–Jahrestagung, Humboldt Universität Berlin
- 30.9./2.10.92** *Elektronische Fachinformation im Bereich der Mathematik – Überblick zum DMV–Projekt “Fachinformation”*. Workshop Fachinformation, ZIB
- 29.10.92** *Discrete mathematics for computer manufacturing*. Symposium on Trends in Discrete Mathematics, Universität Bielefeld
- 03.11.92** *On some theoretical aspects of VLSI routing*. Oberwolfach–Tagung über “Kombinatorik”



**07.12.92** *Die Ellipsoidmethode für konvexe Mengen.* Graduiertenkolleg “Algorithmische Diskrete Mathematik”, Berlin

**14.12.92** *Die Ellipsoidmethode in der ganzzahligen Optimierung.* Graduiertenkolleg “Algorithmische Diskrete Mathematik”, Berlin

### **H.C. Hege**

**28.06.92** *Parallelrechnerkauf – heute?.* Workshop “Parallele Strukturen in der Numerik”, Lambrecht

**06.07.92** *Modern Algorithms on MPP Systems: Soft- and Hardware-Requirements.* MPP Advisory Group Meeting, Cray Research, Eagan, USA

**02.11.92** *Supercomputing und Visualisierung.* Eröffnungsvortrag, Workshop “Supercomputing und Visualisierung”, ZIB

**05.11.92** *Kommerzielle Visualisierungs- und Animationssoftware.* Workshop “Supercomputing und Visualisierung”, ZIB

**05.11.92** *Video-Aufzeichnung: heute und morgen (HDTV, digitales Video).* Workshop “Supercomputing und Visualisierung”, ZIB

**10.12.92** *Parallelrechner: heute und morgen.* Institut für angewandte Analysis und Stochastik, Berlin

### **A. Hohmann**

**04.11.92** *Numerische Pfadverfolgung am ZIB.* Institut für Baustatik, Universität Stuttgart

### **R. Kornhuber**

**24.01.92** *Discretization and Preconditioning of Convection Diffusion Equations.* 8. GAMM-Seminar on Incomplete Decompositions, Kiel (24. – 26.1.1992)

**05.03.92** *Multilevel-Methods for Obstacle Problems.* GAMM – GACM Seminar, Hannover (5. – 6.3.1992)

**14.05.92** *Adaptive Finite Elemente Methoden für Konvektions-Diffusionsgleichungen.* Universität Magdeburg

**15.09.92** *Adaptive Multilevel-Methods for Obstacle Problems.* Jahrestagung der Deutschen Mathematiker Vereinigung, Humboldt-Universität Berlin

**24.09.92** *Adaptive MAS-Methods for Obstacle Problems.* GAMM-Seminar on Multigrid Methods, Gosen

**23.11.92** *Adaptive Multilevel-Methoden für Hindernisprobleme.* Universität Tübingen

**26.11.92** *Adaptive Orientierung und anisotrope Verfeinerung.* Universität Heidelberg

**09.12.92** *Adaptive Multilevel-Methoden in 3 Raumdimensionen.* Technische Universität München

### **J. Lang**

**10.02.92** *An Adaptive Discontinuous Finite Element Method for the Transport Equation.* Einladungsvortrag an der TU "Otto v. Guericke" Magdeburg

**21.09.92** *A Finite Element Method Adaptive in Space and Time for Nonlinear Reaction-Diffusion-Systems.* Sixth International Seminar on Numerical Treatment of Differential Equations, Halle (21. – 25.9.1992)

**13.11.92** *Raum- und zeitadaptive Finite-Elemente-Methoden für Reaktions-Diffusionsgleichungen.* TECFLAM-Seminar "Modellierung technischer Flammen", Darmstadt

### **A. Löbel**

**18.05.92** *An Efficient Implementation of the Network Simplex Algorithm.* Graduiertenkolleg "Algorithmische Diskrete Mathematik", Berlin

### **J. Lügger**

**03.04.92** *Vorstellung des DMV-Projekts "Fachinformation" und Erläuterung der Rahmenbedingungen.* GMD, Darmstadt

**25.04.92** *Statusbericht zum DMV-Vorhaben "Fachinformation".* Konferenz der Mathematischen Fachbereiche, Frankfurt

**07.05.92** *Verbesserung des benutzerorientierten Zugriffs auf fachspezifische Online-Datenbanken und CD-ROM für Mathematische Institute in der Bundesrepublik Deutschland.* IAAS Berlin

**30.9./2.10.92** *Statusbericht zum DMV-Projekt "Fachinformation" und weiteres Vorgehen.* Workshop Fachinformation, ZIB

**Sept. 92** *Elektronische Fachinformation im Bereich der Mathematik – Statusbericht zum DMV-Projekt “Fachinformation”*. DMV-Jahrestagung, Humboldt Universität Berlin

**Sept. 92** *Verteilung mathematischer Software mittels elektronischer Netze – die elektronische Bibliothek eLib für mathematische Software*. DMV-Jahrestagung, Berlin

### **G. Maierhöfer**

**15.06.92** *Verteilte Anwendungen auf Großrechnern*. Arbeitskreis “Verteilte Anwendungen bei der Telekom”, Neckargemünd

### **A. Martin**

**31.01.92** *Packen von Steiner-Bäumen: Ein Schnittebenenansatz zum Verdrahtungsproblem*. Freie Universität Berlin

**02.07.92** *Packen von Steinerbäumen: Polyedrische Studien und Anwendung*. Technische Universität Berlin

**28.08.92** *The Steiner Tree Packing Problem: A Branch and Cut Algorithm*. 17th Symposium on Operations Research, Universität der Bundeswehr Hamburg

**13.10.92** *A Polyhedral Approach to the Steiner Tree Packing Problem*. Center of Operations Research and Econometrics, Louvain la Neuve, Belgien

**06.11.92** *Entwicklung kombinatorischer Verdrahtungsverfahren*. Siemens AG, München

### **H. Melenk**

**15.09.92** *Symbolische Lösung einer Klasse algebraischer Gleichungssysteme*. DMV-Jahrestagung, Humboldt Universität Berlin 13.–18.9.1992

**20.11.92** *REDUCE as workbench for scientific computing*. Physics Dept., Universität Wrocław, Polen

### **W. Neun**

**05.04.92** *Using Vector Operations in a LISP System*. CUG Conference, Berlin

## U. Nowak

- 05.02.92** *Numerik und Informatik im Kontext des Scientific Computing.* Informatik-Kolloquium der FU Berlin – im Rahmen der Ringvorlesung “Anwendungsbereiche der Informationstechnik”
- 23.03.92** *Numerische Lösung von eindimensionalen parabolischen Systemen mit adaptiven und bewegten Gittern.* GAMM-Jahrestagung, Leipzig
- 19.05.92** *Extrapolation algorithms for stiff and differential-algebraic systems.* 3. Arbeitstagung Mehrkörperdynamik in der Praxis, Berlin
- 27.08.92** *Numerische Software zur Lösung von hochnichtlinearen Gleichungssystemen.* Institut für Chemische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart
- 28.08.92** *Schaltpunktbestimmung mit Extrapolationsverfahren.* Institut für Chemische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart
- 13.09.92** *Dynamisches Sparsing in steifen Extrapolationsverfahren.* DMV-Jahrestagung, Humboldt Universität Berlin

## R. Roitzsch

- 14.09.92** *Erfahrung mit der Implementierung des adaptiven Finite-Elemente-Programms KASKADE.* DMV-Jahrestagung, Humboldt Universität Berlin

## F. Schmidt

- 16.04.92** *An Adaptive Approach to a Beam Propagation Method.* Integrated Photonics Research Conference, New Orleans, USA
- 01.10.92** *The Paraxial Approximation in Beam Propagation Methods.* Workshop on “Optical Waveguides Modelling, Numerical Simulation and Theory”, Teupitz/Brandenburg

## R. Schöpf

- 13.03.92** *OCCAL – Optimal Control Calculator.* DECHEMA Fachausschuß Reaktorberechnung
- 04.09.92** *OCCAL – Optimal Control Calculator.* 9th IFAC Workshop “Control Applications of Optimization”
- 15.09.92** *OCCAL – Optimal Control Calculator.* DMV-Tagung Berlin

## W. Sperber

- 03.04.92** *Modellkonfigurationen für einen Recherche Arbeitsplatz, Voraussetzungen für die Nutzung von CD-ROM.* Zusammen mit W. Werner (Universität Paderborn) bei der GMD in Darmstadt
- 07.05.92** *Verbesserung des benutzerorientierten Zugriffs auf fachspezifische Online-Datenbanken und CD-ROM für Mathematische Institute in der Bundesrepublik Deutschland.* IAAS Berlin
- Sept. 92** *Elektronische Fachinformation im Bereich der Mathematik – Statusbericht zum DMV-Projekt “Fachinformation”.* DMV-Jahrestagung, Humboldt Universität Berlin
- 30.9./2.10.92** *Projektelevaluation und Berichtswesen im DMV-Projekt “Fachinformation”,* Workshop Fachinformation, ZIB
- 8./9.10.92** *DMV-Modellversuch: Verbesserung des benutzerorientierten Zugriffs auf fachspezifische Online-Datenbanken und CD-ROM für Mathematische Institute in der Bundesrepublik Deutschland.* Ländertag am 8./9. Oktober 1992, Fachinformationszentrum Karlsruhe, Eggenstein-Leopoldshafen

## M. Stoer

- 11.03.92** *Auslegung von Netzwerken unter beliebig hohen Zusammenhangsbedingungen.* DFG-Kolloquium, Augsburg
- 03.04.92** *A Quadratic 0/1 Approach for Cell Placement in VLSI-Design.* Forschungsabteilung der Norwegischen Telekom, Kjeller, Norwegen
- 28.08.92** *Experiences with a Cutting Plane Algorithm for Survivable Network Design.* 17th Symposium on Operations Research, Universität der Bundeswehr Hamburg

## R. Weismantel

- 12.04.92** *The Clustering Problem.* Workshop “Algorithmic approaches to large and complex combinatorial optimization problems”, SCIENCE project of the European Community, Capri, Italien
- 02.07.92** *Plazieren von Zellen: Theorie und Lösung eines quadratischen 0/1 Optimierungsproblems.* Technische Universität Berlin

**27.08.92** *Polyhedral Investigations for the Multiple Knapsack Problem.* 17th Symposium on Operations Research, Universität der Bundeswehr Hamburg

**17.09.92** *Polyhedral Studies for the Clustering Problem.* Humboldt Universität Berlin

**13.10.92** *An Attack to the Placement Problem in VLSI Design.* Center of Operations Research and Econometrics, Louvain la Neuve, Belgien

### **G.M. Ziegler**

**28.01.92** *Subspace arrangements and their homotopy types.* Konferenz “Applied and Computational Convexity”, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

**26.03.92** *What is a complex matroid?.* Institut Mittag–Leffler, Djursholm, Schweden

**04.06.92** *Kombinatorik und Topologie von Unterraum–Arrangements.* Universität GH Siegen

**16.07.92** *Kombinatorik und Topologie von Unterraum–Arrangements.* Mathematisches Kolloquium, Universität Erlangen–Nürnberg

**03.08.92** *Homotopy formulas for arrangements.* Geometry Seminar, Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University, New York, USA

**14.09.92** *Homotopy formulas for arrangements.* Jahrestagung der Deutschen Mathematiker–Vereinigung in Berlin

**15.09.92** *Shellability of some chessboard complexes.* Jahrestagung der Deutschen Mathematiker–Vereinigung in Berlin

**01.10.92** *Complex arrangements and complex matroids.* Workshop on “Matroids”, Sonderforschungsbereich 343 “Diskrete Strukturen in der Mathematik”, Universität Bielefeld

**03.11.92** *On the matching complexes of bipartite graphs.* Konferenz “Kombinatorik”, Mathematisches Forschungsinstitut, Oberwolfach

**13.11.92** *On bipartite matching complexes that are vertex decomposable.* “11. Berliner Algorithmen–Tag” an der Humboldt–Universität, Berlin

## **8.2 Vorlesungen und Seminare**

### **Vorlesungen**

**F. Bornemann: FU Berlin**

**SS92** Numerische Mathematik

**WS92/93** Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen

**P. Deuffhard: FU Berlin**

**WS92/93** Doktoranden- und Diplomanden-Seminar

**R.E. Bixby: TU Berlin**

**SS92** Numerische Aspekte der linearen Optimierung

**M. Grötschel: TU Berlin**

**SS92** Lineare Optimierung

**WS92/93** Kombinatorische Optimierung

**WS92/93** Innere Punkte – Methoden der linearen Optimierung

**R. Kornhuber: TU Berlin**

**SS92** Adaptive Finite-Elemente-Methoden I

**WS92/93** Adaptive Finite-Elemente-Methoden II

**G.M. Ziegler: TU Berlin**

**SS92** Matroide und Hyperebenenarrangements

**WS92/93** Polytope

## **8.3 Mitveranstalter von auswärtigen Tagungen**

M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber:

**03.04.92** Treffen der Fachinformationsbeauftragten im Bereich der Mathematik am 3. April 1992 bei der GMD in Darmstadt.

Durchführung: ZIB gemeinsam mit dem Projektträger Fachinformation (PTF).

Bemerkung: Im Rahmen des DMV-Projekts hat das ZIB das Programm gestaltet und auch zum Treffen eingeladen. Die organisatorische Durchführung lag bei Frau C. Schoening-Walter (PTF), Darmstadt.

J. Gottschewski:

**06.–10.04.92** CUG '92 "Breaking the Barriers". Diese Tagung der internationalen Cray User Group wurde vom ZIB in Berlin organisiert

P. Deuffhard:

**13.–18.09.92** DMV-Jahrestagung, Sektion *Wissenschaftliches Rechnen*, (gemeinsam mit V. Weispenning, Passau), Humboldt-Universität Berlin



# Kapitel 9

## Gäste am ZIB

### 9.1 Gastvorträge

**15.01.92** Y. Wakabayashi (Universidade de São Paulo, Brasil): *A Clique Partitioning Problem.*

**18.03.92** C.L. Monma (Bell Communications Research Laboratories Morristown, USA): *Design and Analysis of Communication Networks.*

**01.04.92** E. Welzl (Freie Universität Berlin): *Lineares Programmieren in subexponentieller Zeit im Einheitskostenmodell.*

**07.05.92** R. Thomas (Cornell University): *An Interior Point Algorithm for Integer Programming.*

**15.05.92** Workshop “10. Berliner Algorithmen Tag”

**30.06.92** M. Padberg (New York University): *Zur Lösung von Airline Crew Scheduling Problemen.*

**01.07.92** R. Indovina (Rice University, Houston, Texas): *Generalized basis reduction algorithm for integer programming.*

**15.07.92** H. Lenzing (Universität Paderborn): *Das Euromath Projekt.*

**04.09.92** R. Fourer (Northwestern University, Illinois): *Applications of Algebraic Modeling Languages to Network and Combinatorial Optimization Problems.*

**21.09.92** U. Suhl (Freie Universität Berlin): *Algorithms and Software for Mixed Integer Optimization.*

**22.09.92** M. Fischetti (Universita di Bologna, Italia): *A Cutting Plane Algorithm for the Generalized Traveling Salesman Problem.*

**23.09.92** R. E. Bixby (Rice University Houston, Texas): *Implementation of the dual simplex method.*

**23.09.92** R. Indovina (Rice University Houston, Texas): *Implementation of basis reduction methods for integer programs.*

**24.09.92** Workshop Visualisierung am ZIB

- 28.09.92** M. Fischetti (Universita di Bologna, Italia): *On the monotonization of polyhedra.*
- 29.09.92** Workshop der TU Magdeburg am Konrad-Zuse-Zentrum: das Institut für Mathematische Optimierung stellt sich vor.
- 30.09./2.10.92** 2. Workshop der Fachinformationsbeauftragten im Bereich der Mathematik
- 14.10.92** Nguyen Ngoc Chu (Institute of Mathematics, Hanoi, Vietnam): *Optimizing a Linear Function over the Integer Efficient Set.*
- 20.10.92** Nguyen Ngoc Chu (Institute of Mathematics, Hanoi, Vietnam): *A Fast Polynomial Time Algorithm for Linear Programs – A New Approach.*
- 27.10.92** B. von Stengel (Universität der Bundeswehr München): *Matrixdarstellung von Verhaltensstrategien für Spielbäume.*
- 2./5.11.92** Workshop “Supercomputing und Visualisierung”
- 26.11.92** A. Frank (Eötvös Lorand Universität Budapest & Universität Bonn): *Increasing edge-connectivity in mixed graphs.*
- 03.12.92** Workshop “Industrielle Anwendungen der Mathematik: Die Projektgruppe “Angewandte Wahrscheinlichkeitstheorie und stochastische Optimierung” der Humboldt-Universität zu Berlin stellt sich am ZIB vor.
- 07.12.92** J. Matoušek (Charles University Praha): *Recent Results on Linear Programming in small Dimension.*
- 08.12.92** A. Mandel (Universidade de São Paulo, Brasil): *Principal and sticky matroids.*
- 10.12.92** D. Shanno (Rutgers University): *Interior Point Methods for Linear Programming: An Overview.*
- 14.12.92** D. Shanno (Rutgers University): *On Implementing an Interior Point Method for Linear Programming.*
- 15.12.92** R. Rojas (Freie Universität Berlin): *Wer hat den Computer erfunden? Ein Vergleich früherer Rechnerarchitekturen.*

## 9.2 Gastaufenthalte

Atef Abdel-Aziz (University Kairo)  
vom 1. 8. 1991 — 31. 10. 1992  
(DAAD-Stipendiat)

Prof. Dr. Robert E. Bixby (Rice University Houston, Texas)  
vom 1. 1. 1992 — 30. 9. 1992  
(Preisträger der Alexander von Humboldt-Stiftung)

Prof. Dr. Anders Björner (Royal Institute of Technology, Stockholm, Schweden)  
11. 9. 1992 — 18. 9. 1992  
(Gast des ZIB)

Carlos Ferreira (University Sao Paulo)  
1. 8. 1991 — 30. 6. 1993  
(DAAD-Stipendiat)

Dr. Matteo Fischetti (University of Bologna)  
20. 9. — 3. 10. 1992  
(DFG-Förderung)

Prof. Dr. Andras Frank (Universität Bonn)  
25. 11. 1992 — 27. 11. 1992  
(Gast des ZIB)

Ronni Rae Indovina (Rice University, Houston, Texas)  
1. 6. 1992 — 30. 9. 1992  
(DFG-Förderung und Förderung der Rice University, Houston)

Dr. Arnaldo Mandel (Universidade de São Paulo)  
7. 12. 1992 — 10. 12. 1992  
(Gast des ZIB)

Dr. Clyde Monma (Bell Communications Research, Morristown, New Jersey)  
1. 3. 1992 — 31. 3. 1992  
(DFG-Förderung)

Dr. Ngoyen Nghoc Chu (University of Hanoi, Vietnam)  
1. 9. 1992 — 31.10. 1992  
(DFG-Förderung)

Prof. Dr. Manfred Padberg (New York University)  
29. — 30. 6. 1992  
(Gast des ZIB)

Prof. Dr. Victor Reiner (University of Minnesota, Minneapolis)  
11. 11. 1992 — 24.11.1992  
(Gast des ZIB)

Janusz Rydel (University Warschau)  
1. 10. 1991 — 31. 7. 1992  
(DAAD-Stipendiat)

Prof. Dr. David Shanno (Rutgers University, New Jersey)  
9. 12. 1992 — 16. 12. 1992  
(Gast des ZIB)

### **9.3 Tagungen und Veranstaltungen im ZIB**

**21.01.92** ZIB-Tag, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin

H. Busch, H.H. Frese, H.C. Hege, T. Hoellerer, O. Paetsch, D. Stalling:

**2./5.11.92** Workshop "Supercomputing und Visualisierung". Vom Rechenzentrum und der Abt. "Visualisierung und Paralleles Rechnen" wurde ein Workshop "Supercomputing und Visualisierung" veranstaltet. Ziel des mit ca. 100 Teilnehmern (sehr gut) besuchten Workshops war, über neue Entwicklungen im Bereich der wissenschaftlichen Visualisierung zu berichten, Erfahrungen auszutauschen und Supercomputer-Anwendern moderne Methoden der wissenschaftlichen Visualisierung in Tutorien zu vermitteln. Neben Wissenschaftlern aus verschiedenen Anwendungsgebieten des Scientific Computing fanden sich auch eine Reihe großenteils auswärtiger Visualisierungs-Fachleute ein. Die Tagungsbeiträge stammten von externen Anwendern, Firmen und (zu einem Drittel) der Abt. "Visualisierung und Paralleles Rechnen" des ZIB.

Das zentrale Thema waren Software-Systeme zur wissenschaftlichen Visualisierung sowie deren Einsatz im Supercomputer-Umfeld. Auch zu Hardware-Fragen (Grafik-Rechner und Supercomputer, Video-Aufzeichnung, sonstige Grafik-Peripherie) gab es Beiträge. Hinsichtlich der Software wurde das Spektrum der für das Scientific Computing relevanten (kommerziellen und public domain) Visualisierungspakete behandelt: von Grafik-Funktionsbibliotheken, Plotpaketen, gemischten Text- und Zeichenprogrammen über Visualisierungsprogramme für spezielle Anwendungen, bis hin zu komplexen, allgemein verwendbaren Visualisierungsumgebungen und Animationssystemen.

Anhand beispielhafter Anwendungen aus den Gebieten Chemie, Pharmazie, Medizin, Strömungsforschung, Materialforschung und Strukturmechanik wurden Methoden und Möglichkeiten der wissenschaftlichen Visualisierung aufgezeigt. In drei Tutorien wurde das Arbeiten mit modernen, im Bereich des Supercomputing einsetzbaren Visualisierungssystemen vermittelt.

Auf vielfach geäußerten Wunsch der Teilnehmer soll 1993 wieder ein Workshop zu Themen der wissenschaftlichen Visualisierung am ZIB angeboten werden.

**30.9./2.10.92** Workshop der Fachinformationsbeauftragten im Bereich der Mathematik – mit einem ganztägigen Messenger-Seminar des FIZ Karlsruhe. Der Beitrag des FIZ Karlsruhe (W. Detemple) war erheblich und – für die Fachbereiche – kostenfrei.

**02.–05.11.92** “Supercomputing und Visualisierung”. Workshop in Zusammenarbeit mit Cray Research GmbH und Silicon Graphics GmbH im Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (ZIB)

# Kapitel 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 1992 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Kurt Kutzler, TUB, Vorsitzender
- Prof. Dr. Dr. Walter Schunack, FUB — bis 11.02.1992  
Prof. Dr. Konrad Seppelt, FUB — ab 12.02.1992
- StS Steffie Schnoor, Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung — bis 30.03.1992  
StS Prof. Dr. Erich Thies, Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung — ab 14.04.1992
- Dr. Reinhard Baumgarten, Senatsverwaltung für Wirtschaft und Technologie — bis 31.08.1992  
Reiner Jäck, Senatsverwaltung für Wirtschaft und Technologie — ab 01.09.1992
- Prof. Dr. Gerhard Wilhelm Becker, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung — bis 31.08.1992  
Prof. Dr. Horst Czichos, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung — ab 01.09.1992
- Prof. Dr. Erich te Kaat, Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH

Im Jahre 1992 tagte der Verwaltungsrat am 18. Juni, 23. Oktober und am 18. Dezember.

Präsident des ZIB ist Prof. Dr. Peter Deuffhard. Als Vizepräsident amtiert Prof. Dr. Martin Grötschel.

## 10.2 Satzung

Der Verwaltungsrat hat in seiner Sitzung am 23. Oktober 1992 die Satzung des ZIB verabschiedet; sie ist am 7. November 1992 in Kraft getreten.

## 10.3 Wissenschaftlicher Beirat

Die Amtszeit der bisherigen Mitglieder des Wissenschaftlichen Beirates endete nach Inkrafttreten der Satzung am 7. November 1992. Auf der ersten Sitzung des Verwaltungsrates im Jahre 1993 ist die Neubestellung des Wissenschaftlichen Beirates vorgesehen. Der Wissenschaftliche Beirat setzte sich bis zum Ende seiner Amtszeit unverändert wie folgt zusammen:

Prof. Dr.-Ing. Konrad Zuse	—	Ehrenvorsitzender
Prof. Dr. Clemens Baack	—	Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin GmbH
Prof. Dr. Karl Ganzhorn	—	IBM Deutschland GmbH, Stuttgart
Herr Lebrecht Metzger	—	Siemens-Nixdorf GmbH, Berlin
Dr. Heinz Schwärtzel	—	Siemens AG, München
Prof. Dr. Ulrich Trottenberg	—	Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung mbH, Bonn
Prof. Dr. Karl Zander	—	vormals Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH

## 10.4 Mitgliedschaften

Das ZIB ist Mitglied folgender Organisationen:

1. Berliner Wissenschaftliche Gesellschaft
2. CRAY User Group
3. DFN
4. DMV
5. ECUDO (bis 31.12.1992)
6. Forum für Zukunftsenergien
7. NAG Users Association
8. SIAM

## 10.5 ZIB-Fellows

Präsident und Vizepräsident vergeben an wenige ausgewählte Wissenschaftler das Konrad-Zuse-Fellowship, in dessen Rahmen im Jahre 1992 die folgenden Projekte bearbeitet wurden:

- Prof. Dr. B. Fiedler (Universität Stuttgart)  
*Dynamische Systeme*
- 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*
- Prof. Dr. J. Weyer (Universität Köln)  
*AIDS-Ausbreitungsmodelle*
- Prof. Dr. G. Wittum (Universität Heidelberg)  
*Unvollständige LU-Zerlegung auf irregulären Gittern*

## 10.6 Selbstverwaltung

Dem Personalrat gehörten bis zu den Neuwahlen am 26. November 1992 an:

Peter Ertmann – Vorsitzender  
Detlef Bayer  
Klaus-Dietrich Engel  
Jörg-Achim Jacob  
Gabriele Kempf

Nach den Wahlen setzt sich der Personalrat wie folgt zusammen:

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

Vertrauensmann der Schwerbehinderten ist unverändert Wolfgang Maibauer.  
Frauenvertreterin ist seit dem 10. April 1992 Barbara Märschenz.



## 10.7 Wirtschaftliche Situation

Die wirtschaftliche Situation des ZIB zeichnete sich nach wie vor durch eine erfreuliche Kontinuität aus. Verfügungsbeschränkungen durch den Senat von Berlin konnten durch sparsame Wirtschaftsführung aufgefangen werden. Ohne die Gehälter und Dienstbezüge der planmäßigen Mitarbeiter beliefen sich die Ausgaben im Jahre 1992 auf insgesamt 22.370 TDM; davon entfielen auf den konsumtiven Bereich 9.570 TDM und auf Investitionen 12.800 TDM.

Das Land Berlin leistete einen Zuschuß von 20.900 TDM. Die eigenen Erträge aus Kooperationen und Drittmittelprojekten betrugen im Berichtsjahr 1.470 TDM.

## 10.8 Personelle Entwicklung

Für die planmäßigen Mitarbeiter (89,5 Stellen, davon 7 Beamten- und 82,5 Angestelltenstellen) waren im Haushaltsplan des Landes Berlin nach Durchschnittssätzen 6.435 TDM ausgewiesen.

Die Zahl der Beschäftigten entwickelte sich wie folgt:

	<b>31.12.91</b>	<b>31.12.92</b>
Leitung	5	5
Wiss. Personal	43,75	48
Datenverarbeitung	26	25
Technik	5	5
Verwaltung/Bibliothek	15,5	16
Studentische Hilfskräfte	11	15
<b>Insgesamt</b>	<b>106,25</b>	<b>114</b>

# Kapitel 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/ 896 04 – 101 Ralf Kornhuber 896 04 – 174
Numerische Software- Entwicklung:	Ulrich Nowak 896 04 – 175
Symbolik:	Herbert Melenk 896 04 – 195
Kombinatorische Optimierung:	Martin Grötschel/ 896 04 – 210 Günter M. Ziegler 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