

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

Jahresbericht 1994

Inhaltsverzeichnis

1	Vorbemerkung	1
2	Das ZIB – Aufgaben und Ziele	3
3	Forschung und Entwicklung	7
3.1	Zusammenfassung	7
3.2	Grundlagenprojekte	12
	Kaskadische Mehrgitterverfahren	12
	Monotone Mehrgittermethoden	14
	Adaptive Multilevel-Methoden für die Kirchhoff-Platte	17
	Adaptive Multilevel-Methoden für Helmholtz-Eigenwertprobleme	18
	Bestimmung des Referenz-Wellenvektors bei der paraxialen Approximation von Wellengleichungen	20
	Adaptive h - p -Methoden für elliptische Randwertprobleme	21
	Iterative Lösung nichtsymmetrischer, linearer Gleichungssysteme	23
	Entwicklung adaptiver Multilevelverfahren zur Berechnung von Reaktions-Diffusionsgleichungen	24
	Entwicklung von FD-basierten Linienmethoden	26
	Adaptive Galerkinmethoden turbulenter reaktiver Strömungen	27
	Parameter-Ableitungen der Jacobi-Polynome	29
	Numerische Mathematik II — Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen	30
	Adaptive Dimensionsreduktion	31
	Eine adaptive Spektralmethode zur Berechnung periodischer Orbits	33
	Energieerhaltende Verfahren für Hamiltonsche Systeme	35
	Nichtlineare Glättung hochoszillatorischer Hamiltonscher Systeme	36
	Optimierung ultrakurzer Laser-Pulse zur Stimulanz definierter Übergänge in Molekülen	38
	Unterteilungsalgorithmen zur Berechnung instabiler Mannigfaltigkeiten und globaler Attraktoren	40
	Musterbildung in Reaktions-Diffusions-Gleichungen	42
	Symmetrie dynamischer Systeme	43
	Dünnbesetzte Gleichungssysteme	45
	Mehrparametrische Gleichungssysteme	46
	Nichtkommutative Operatorenalgebren	48
	Unendliche Reihen in der Computeralgebra	50
	Algorithmische Methoden für orthogonale Polynome	51
	Weiterentwicklung von REDUCE	52
	Visualisierung zweidimensionaler Vektorfelder	53
	DoPlex — ein verteilter, objekt-orientierter Simplex-Algorithmus	55

	Ganzzahlige und gemischt ganzzahlige Rucksackprobleme	56
	Gittermethoden für die ganzzahlige Programmierung	57
	Polyedrische Untersuchung kombinatorischer Optimierungsprobleme	58
	Projection Pursuit Methoden	59
	Modellwahl, Transformation und Varianzschätzung bei nichtlinea- rer Regression	61
	Stabilitätsuntersuchungen für stochastische Optimierungsprobleme	62
	Kombinatorische Geometrie endlicher Konfigurationen	64
3.3	Anwendungsprojekte	67
	Modellierung eines UNIX-Computers durch ein Processor-Sharing Modell	67
	Approximation der Anzahl von Paketen in Paket-Ankunftsströmen	69
	Dimensionierung des E-PLUS Mobilfunknetzes	70
	Routing in ATM Netzwerken	71
	Optimierung von Aufzugssteuerungen	72
	Anwendungen der Stochastischen Optimierung und Wahrschein- lichkeitstheorie in Nachrichtenverkehrstheorie und elektri- scher Lastverteilung	73
	Fahrzeugeinsatzplanung im Behindertentransport	75
	Fahrzeugumlaufplanung im Öffentlichen Personennahverkehr . . .	77
	Optimale Blockauswahl bei der Kraftwerkseinsatzplanung	78
	Fahrzeugeinsatzplanungsprobleme	80
	Volume Rendering	81
	Entwicklung eines parallelen Branch-&-Cut-Frameworks zur Lösung großer kombinatorischer Optimierungsprobleme	82
	Entwicklung eines parallelen C++ Programmiermodells zur Im- plementierung paralleler B&C-Verfahren	83
	Symbolische Lösung algebraischer Gleichungssysteme	85
	Entwicklung informationstechnischer Werkzeuge für die Museums- dokumentation	86
	Adaptive Finite Elemente in der Thermomechanik	87
	Implementierung adaptiver Multilevel-FE-Methoden	89
	Dynamische Prozeßsimulation	91
	Graphische Benutzeroberflächen für Codelib Software	92
	Komplexitätsuntersuchungen an Klimamodellen	93
	Thermo-elastische Bauteilsimulation im Brandingenieurwesen . .	94
	Simulation der Steuerung von Relaxationsoszillationen in Lasern .	96
	code++: Eine C++ Klassenbibliothek für gewöhnliche Differenti- algleichungen	97
	Layoutbeschreibung für Komponenten der Integrierten Optik . . .	98
	Hyperthermie-Planung	100
	Computergrafische Unterstützung bei der Hyperthermie-Planung	102
	Der Kontinuumslikes der nicht-kompakten Gitter-QED	104

Die kompakte Gitter–QED mit Wilson–Fermionen	105
Implementierung eines Kontinuum–Modells in den NDDO–Formalismus	106
Umgebungseinflüsse mit Kontinuums–Modellen	107
Verteilte Anwendung zur schnellen Berechnung des elektrostatischen Potentials auf Moleküloberflächen	108
4 Wissenschaftliche Dienstleistungen	110
Fachinformation innerhalb der DMV	110
Verteiltes Informationssystem für die Mathematik	113
Elektronische mathematische Informationsangebote der Abteilung Software–Information	116
Berliner Regionales Testbed (BRTB) – Projekt	117
Netzverteilte Visualisierung	120
Einheitliche Datenumgebung auf heterogenen Rechnersystemen	122
Kooperationsprojekte mit der Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung (GMD)	123
Offene Verteilte Multimediale Anwendungen	123
Netzwerktechnologie und Hochleistungsprotokolle	124
Effektiver Einsatz von Höchstleistungsrechnern in der Materialfor- schung	125
Paralleles und verteiltes Rechnen	126
Visualisierungsservice	127
Einsatz der Informationstechnik im Museum	129
5 Rechenzentrum	130
5.1 Aufgaben und Organisation	130
5.2 Ausbau des Landeshöchstleistungsrechners	130
5.3 Software–Ausbau im Berichtszeitraum	133
5.4 Rechnernutzung	138
5.5 Interne Dienstleistungen des Rechenzentrums	140
6 Publikationen	142
6.1 Preprints	142
6.2 Technical Reports	153
6.3 Beiträge in Zeitschriften	158
6.4 Monographien	163
6.5 Habilitationen	165
6.6 Dissertationen	165
6.7 Diplomarbeiten	166
6.8 Auszeichnungen	167
6.9 Herausgabe von Zeitschriften	167
7 Produkte	169
7.1 Symbolische Verfahren	169

7.1.1	REDUCE	169
7.1.2	Mathematica	169
7.1.3	Maple	170
7.2	code++	170
7.3	CODELIB	170
7.3.1	Große nichtsymmetrische lineare Gleichungssysteme	171
7.3.2	Nichtlineare Gleichungssysteme und Ausgleichsrechnung	171
7.3.3	Lösung von Anfangswertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen	171
7.3.4	Lösung von Randwertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen	172
7.3.5	Stationäre partielle Differentialgleichungen	172
7.3.6	Instationäre partielle Differentialgleichungen	172
7.3.7	Freie Randwertprobleme für partielle Differentialgleichungen	172
7.3.8	Gemischt symbolisch–numerische Verfahren	172
7.4	GOS — Datenbank für kulturgeschichtliche Daten	173
8	Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB–Mitarbeitern	174
8.1	Vorträge und Gastaufenthalte	174
8.2	Vorlesungen und Seminare	190
8.3	Mitveranstalter von auswärtigen Tagungen	191
9	Gäste am ZIB	193
9.1	Gastvorträge	193
9.2	Gastaufenthalte	197
9.3	Tagungen und Veranstaltungen des ZIB	202
10	Organisatorisches	206
10.1	Organe	206
10.2	Satzung	206
10.3	Wissenschaftlicher Beirat	207
10.4	Mitgliedschaften	207
10.5	ZIB–Fellows	207
10.6	Selbstverwaltung	208
10.7	Wirtschaftliche Situation	208
10.8	Personelle Entwicklung	209
11	Ansprechpartner	210

1 Vorbemerkung

Das Berichtsjahr 1994 brachte für das Konrad-Zuse-Zentrum eine weitere Stabilisierung seiner Position als außeruniversitäre Forschungseinrichtung mit dem wissenschaftlichen Schwerpunkt Scientific Computing und dem Service-Schwerpunkt Supercomputing. Die Erweiterung des **Verwaltungsrates** um Mitglieder der Humboldt-Universität zu Berlin und des Max-Delbrück-Centrums für Molekulare Medizin wurde durch die Zustimmung des Abgeordnetenhauses von Berlin vorgenommen. Das entsprechende Änderungsgesetz ist am 1. Februar 1995 in Kraft getreten. Damit hat auch das ZIB seine gesamtdeutsche Vereinigung vollzogen. Der **Wissenschaftliche Beirat** trat am 8. Juli 1994 zu seiner konstituierenden Sitzung zusammen und nahm eine erste Bewertung des ZIB vor. Sein Fazit: "Der Beirat hält das ZIB für ein TOP-Institut, das aufgrund der Forschungs- und Entwicklungsziele, der Zusammenführung zweier Gebiete (numerisch-symbolische und diskrete Methoden), der Praxisnähe und nicht zuletzt der hohen Qualität der wissenschaftlichen Mitarbeiter ... international anerkannt ist." Diese für den Bereich Scientific Computing äußerst erfreuliche Beurteilung wird auch für den Bereich Rechenzentrum ausgesprochen: "Das Rechenzentrum wird gut und vorausschauend geführt. Beim Aufbau des Berliner regionalen Testbeds führte unorthodoxes Vorgehen zu beträchtlichen Kosteneinsparungen."

Die erfolgreiche wissenschaftliche Arbeit des ZIB wurde im Berichtsjahr in besonderem Maße durch drei **Auszeichnungen** honoriert. Dem Vizepräsidenten wurde im Dezember 1994 der Leibniz-Preis 1995 zuerkannt, die höchste wissenschaftliche Auszeichnung in der Bundesrepublik Deutschland. Herr Priv. Doz. Dr. Ziegler erhielt einen Förderpreis aus dem Gerhard-Hess-Programm der DFG, einer hohen Anerkennung für junge habilitierte Wissenschaftler. Die Deutsche Vereinigung für Chemie- und Verfahrenstechnik verlieh dem Präsidenten die Gerhard-Damköhler-Medaille 1994 für seine mathematischen Arbeiten, die zur Vertiefung der Grundlagen der Chemischen Reaktionstechnik geführt haben.

Im Bereich **Forschung und Entwicklung** wurde die bisher schon erfolgreiche wissenschaftliche Arbeit um neue Themen erweitert. In mittlerweile über 20 Drittmittelprojekten werden ca. 40 Beschäftigte eingesetzt. Hervorzuheben sind der seit Oktober 1994 etablierte Sonderforschungsbereich "Hyperthermie: Methodik und Klinik", der DFG-Schwerpunkt "Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme" sowie die Planung des DFG-Schwerpunktes "Echtzeit-Optimierung großer Systeme". Außerdem ist das ZIB an zwei Projekten des durch das Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (BMBF) aufgelegten Förderprogramms "Anwendungsorientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik" beteiligt. Darüber hinaus leistete die Abteilung Software-Information wichtige Beiträge bei der informationstechnischen Vernetzung der deutschen mathematischen Institute und Biblio-

theken und nahm weiterhin aktiv teil an der Entwicklung des elektronischen Publizierens. Insgesamt besteht im Bereich Forschung und Entwicklung derzeit ein ungefähres Verhältnis 1:1 von Grundlagenausstattung zu Drittmittelförderung.

Das **Rechenzentrum** erfüllt nach wie vor seine anspruchsvolle Dienstleistungsfunktion als Anbieter von Supercomputerkapazität für Hochschulen und wissenschaftliche Einrichtungen im Raum Berlin unter Einbeziehung weiterer wissenschaftlicher Einrichtungen aus den neuen Ländern. Erfreulicherweise konnte im Herbst 1994 mit der Installation des Parallelrechners CRAY T3D die zweite Ausbaustufe des Höchstleistungsrechners realisiert werden. Durch die damit erreichte Verzehnfachung der Rechenleistung erfüllt Berlin auch weiterhin seine volle Funktion im Norddeutschen Vektorrechnerverbund. Darüber hinaus beteiligt sich das ZIB gemeinsam mit dem Landesamt für Informationstechnik (LIT) im Geschäftsbereich der Senatsverwaltung für Inneres am Aufbau eines landeseigenen Glasfasernetzes für ein künftiges Wissenschaftsnetz in Berlin. In dem im Oktober begonnenen DFN-Projekt "Regionales Testbed Berlin" hat das ZIB die Projektleitung.

Abschließend sei noch erwähnt, daß auch der **Neubau** des ZIB auf dem mathematisch-naturwissenschaftlichen Campus der FUB in Dahlem unter weitgehender Einhaltung des vorgegebenen Terminplans zügig voranschreitet. Damit dies so bleibt, hoffen wir weiterhin auf den Schutz und Schirm der politisch Verantwortlichen.

Berlin, im Mai 1995

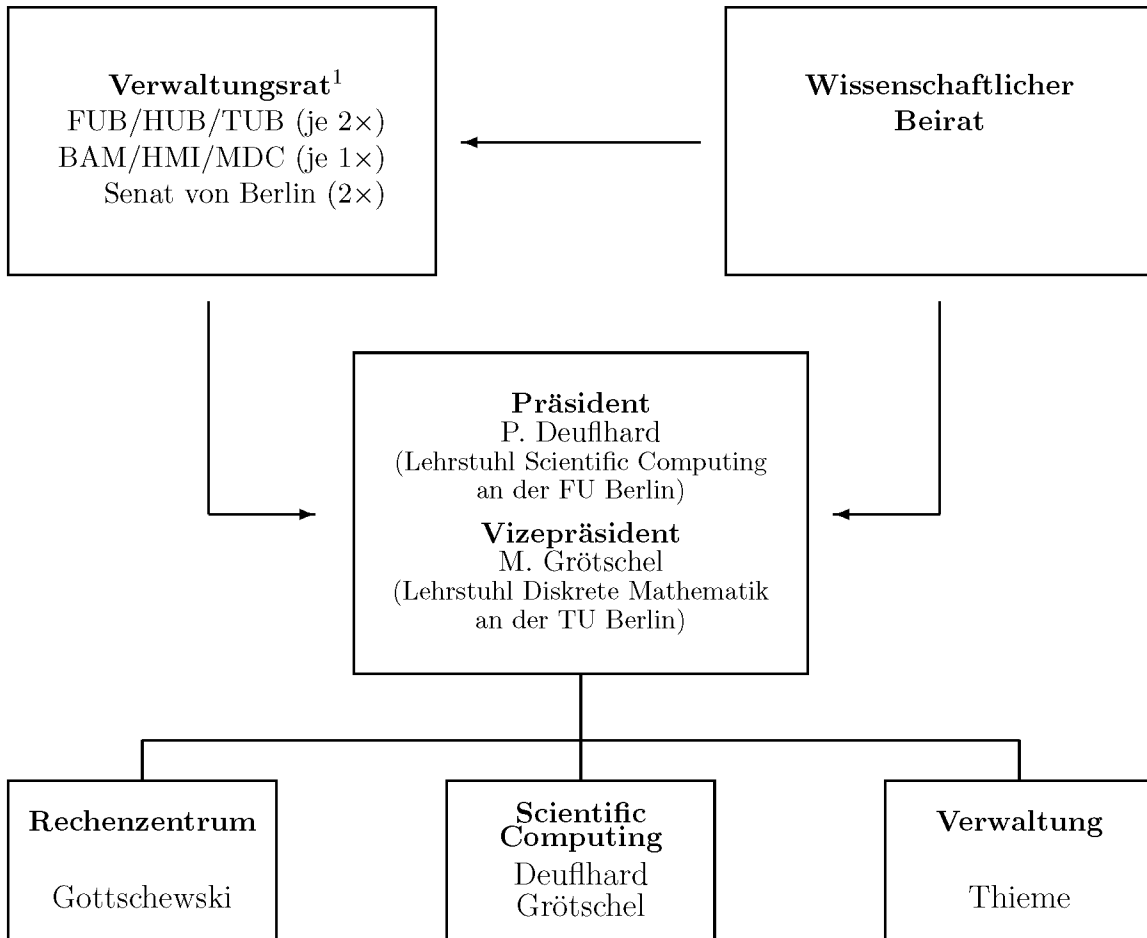
Prof. Dr. Peter Deuffhard

Präsident

2 Das ZIB – Aufgaben und Ziele

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

Struktur des ZIB



¹in der Fassung der ab 01.02.1995 erweiterten Zusammensetzung

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. Diese beiden Be-

reiche gliedern sich derzeit in sechs Abteilungen:

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.

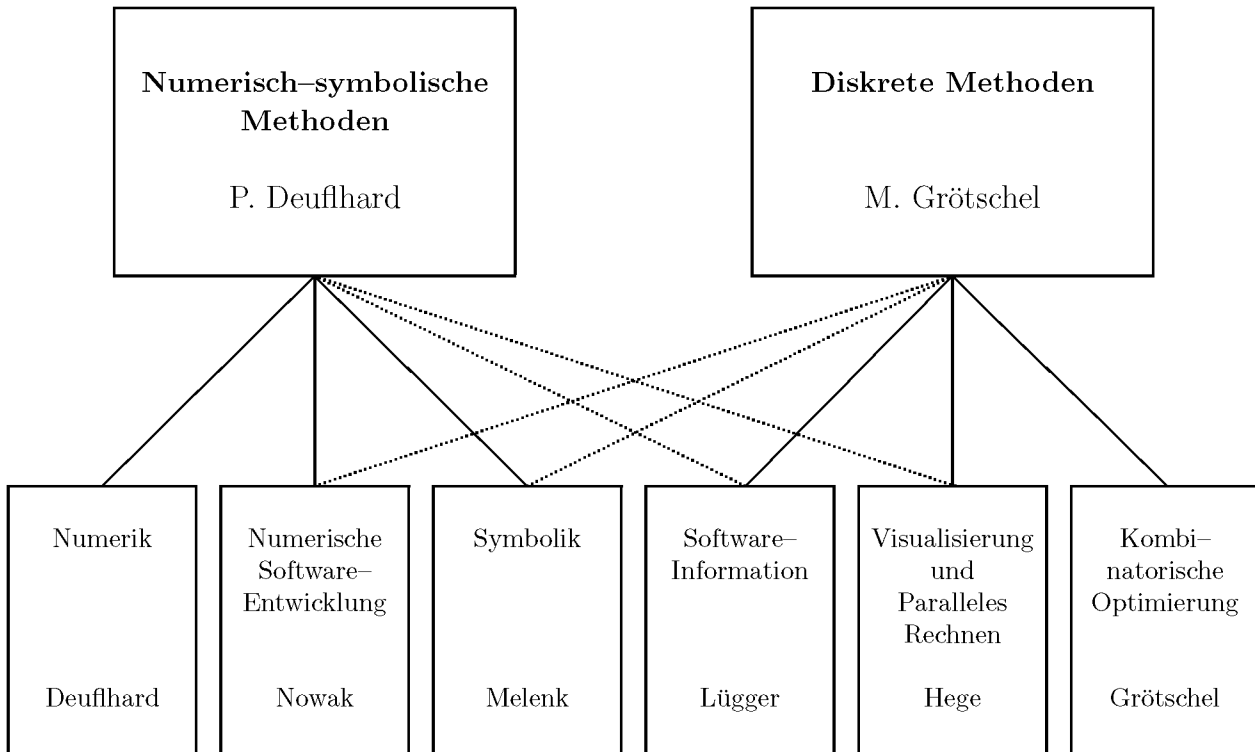
Diskrete Methoden

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 sowie algebraische Methoden. Diese werden durch Heuristiken – möglichst mit Gütegarantien – zur approximativen Lösung sehr großer Anwendungsfälle ergänzt.

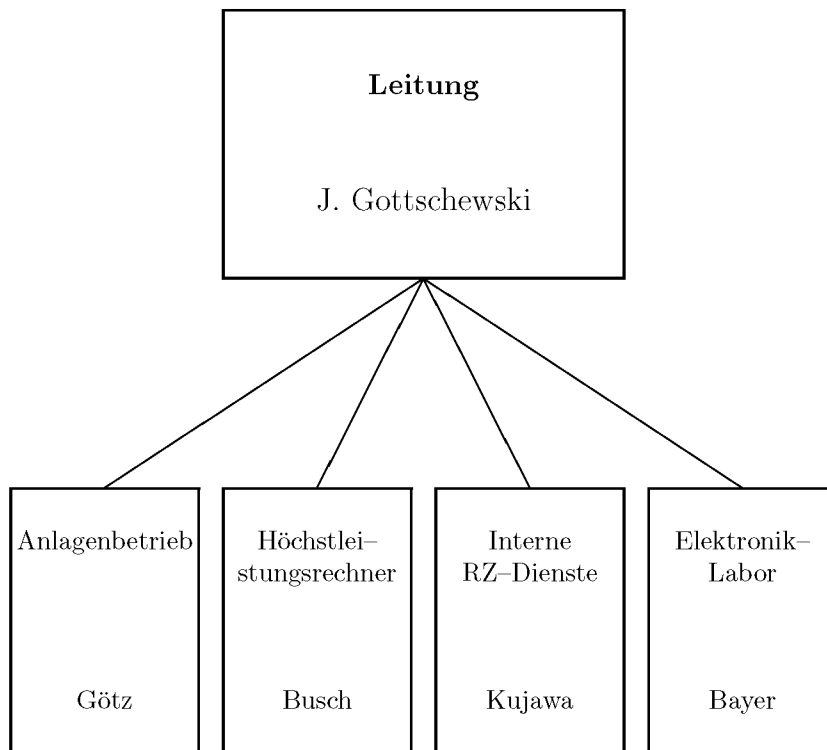
Abteilung Visualisierung und Paralleles Rechnen. Aufgabe der Gruppe Visualisierung ist die Entwicklung und Implementierung von Darstellungsmethoden der wissenschaftlichen Visualisierung, die Bereitstellung geeigneter Visualisierungs–Hardware und –Software sowie die Unterstützung hausinterner Anwender. 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 Konzeption, die Entwicklung und die Realisierung mathematischer Informationssysteme, insbesondere der elektronischen Bibliothek eLib für mathematische Software, Datensammlungen etc. bis hin zu mathematischen Diskussionslisten. Als Dienstleistung für die Mathematik wird im Auftrag der Deutschen Mathematiker–Vereinigung sowohl das Projekt “Fachinformation” durchgeführt, als auch das Projekt “Ein verteiltes Informationssystem für die Mathematik” vorbereitet.

Bereich Scientific Computing



Bereich Rechenzentrum



3 Forschung und Entwicklung

3.1 Zusammenfassung

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

Im Bereich **Numerisch-symbolische Methoden** — mit den Abteilungen *Numerik*, *Numerische Software-Entwicklung* und *Symbolik* — wurden im Berichtszeitraum die drei methodischen Schwerpunkte des Vorjahres

- Adaptive Multilevel-Finite-Methoden für partielle Differentialgleichungen
- Numerik dynamischer Systeme
- Computeranalysis

weiter bearbeitet. Aus Sicht der Anwendungen lagen die Schwerpunkte auf

- Chemie- und Verfahrenstechnik
- Molekülphysik
- Krebstherapie Hyperthermie
- Integrierte Optik

wobei die Molekülphysik gegenüber dem Vorjahr zusätzliches Gewicht erhielt.

In der Projektgruppe *Adaptive Multilevel-Finite-Elemente-Methoden* bei partiellen Differentialgleichungen kamen eine ganze Reihe neuer Algorithmen zu den bisherigen hinzu. Adaptive $h - p$ -Methoden erweitern das FE-Spektrum gerade mit Blick auf interessante Anwendungen, wobei neuartige finite Elemente zu konstruieren waren, die wünschenswerte Eigenschaften im Hinblick auf adaptive Verfeinerung in der Gitterweite h ebenso wie der lokalen Polynomordnung p besitzen. Eine erste Anwendung dieser Technik wurde in Kooperation mit Siemens für Probleme der Thermomechanik durchgeführt. Der im letzten Jahr neu eingeführte CCG-Algorithmus wurde im Berichtszeitraum vollends theoretisch befriedigend erklärt; Auswirkungen auf die medizinische Anwendung Hyperthermie, insbesondere bezüglich Parallelisierung, stehen für das folgende Jahr an. Der Sonderforschungsbereich "Hyperthermie: Methodik und Klinik", an dem das ZIB mit zwei Teilprojekten (Simulation und Visualisierung) beteiligt ist, wurde 1994 etabliert. Im Bereich der Integrierten Optik führten algorithmische Untersuchungen von Eigenwertproblemen der Helmholtz-Gleichung zu schnellen und robusten nichtlinearen cg-Varianten, die eine scharfe Trennung nahe beisammen liegender Spektrallinien sowie die stabile Berechnung niedriger Eigenmoden erlauben; diese

Arbeit wurde durch das BMBF gefördert. Für nichtglatte konvexe Probleme (Hindernisprobleme, Poröse-Medien-Gleichung, Stefan-Probleme) wurden in einer Habilitation neue besonders einfache und schnelle “monotone Mehrgitter-Verfahren” vorgeschlagen, die nun am Weierstraß-Institut Berlin (WIAS) weiterentwickelt werden. Mit Blick auf die Verfahrenstechnik entstanden im Berichtszeitraum schließlich die 2D-Varianten der adaptiven Multilevel-Algorithmen für Diffusions-Reaktions-Systeme, was mit einer eingehenden Beschäftigung mit nicht-symmetrischen iterativen Gleichungslösern sowie deren Vorkonditionierung einherging.

In der zweiten Projektgruppe *Numerik dynamischer Systeme* von gewöhnlichen Differentialgleichungen stand die Fertigstellung eines völlig neu konzipierten Lehrbuches zunächst im Vordergrund. Sichtbare Fortschritte bei der adaptiven Dimensionsanpassung von Galerkin-Orbit-Methoden für periodische Orbits oder für “approximative Inertialmannigfaltigkeiten” wurden erzielt. Erste Berechnungen nichtglatte Attraktoren wurden mit adaptiven Unterteilungsalgorithmen in schneller Weise möglich. Die beiden letztgenannten Projekte wurden innerhalb des vom ZIB mitinitiierten DFG-Schwerpunktes “Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme” gefördert, der 1994 seine Arbeit aufgenommen hat. Der Zusammenhang dynamischer Systeme mit Symmetrien wurde sowohl mit Mitteln der Computeralgebra als auch der Analysis und Numerik untersucht (Berechnung von Spiralwellen). Im Fall der Spiralwellen wurde der Einfachheit halber ein Zugang über die Linienmethode für partielle Differentialgleichungen gewählt. Ein solcher Zugang liegt auch den simultanen Raum-Zeit-Extrapolationsmethoden zugrunde, die 1994 zu neuer Reife entwickelt wurden, sowie den gewichteten Galerkin-Methoden für reaktive turbulente Strömungen, die als Erweiterung der üblichen PDF-Formulierung entstanden (Förderung durch Mittel des BMBF über das Projekt TECFLAM).

In der dritten Projektgruppe *Computeranalysis* wurde das vom ZIB an führender Stelle mitentwickelte Computeralgebra-System REDUCE, für welches das ZIB auch eine Vertriebslizenz hat, unter gezielter Einbeziehung neuer Anforderungen aus der Analysis erweitert. Bei der symbolischen Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme mit Zusatzeigenschaften (Symmetrien, Sparse-Struktur, Multiparameter) konnten neue Fortschritte erzielt werden. Nichtkommutative Operatoralgebren wurden effizient implementiert, was wiederum große Erleichterungen für die Berechnung unendlicher Reihen und spezieller Funktionen (Orthogonalpolynome) nach sich zog.

Die eben genannten Fortschritte in der Methodenentwicklung führten wiederum zu Fortschritten in den weiter oben aufgeführten Anwendungsfeldern. In der *Chemie- und Verfahrenstechnik* spielen die Software-Programme PDEX1M (Linienmethode, simultane Raum-Zeit-Extrapolation) für 1D-Probleme, das adaptive Multilevel-Programm KARDOS2 für 2D-Probleme mit komplizierter Geometrie sowie die Untersuchung approximativer Inertialmannigfaltigkeiten eine wichtige Rolle. Dies belegt eine Reihe von Kooperationen (Universität Stuttgart, Univer-

sität Heidelberg, RWTH Aachen, TU Berlin, chemische Industrie, Autoindustrie). Auch die dem Präsidenten durch den Dachverband der chemischen Industrie verliehene Gerhard–Damköhler–Medaille ist Ausdruck dieser Tatsache. Der in 1994 verstärkt aufgenommene Schwerpunkt *Molekülphysik* trägt der wissenschaftlichen Dichte zu diesem Themenkreis in der Berliner Region Rechnung. Es wurden drei Workshops zu dieser Thematik veranstaltet bzw. mitveranstaltet, zwei davon in Berlin, einer in Warschau in Kooperation mit dem dort neu gegründeten Interdisciplinary Centre for Mathematical and Computational Modelling (ICM) (weitere solche Workshops sollen folgen). Ein Arbeitskreis für die Simulation von Biomolekülen wurde initiiert. Die Kooperation in die Quantenchemie (J. Manz, FUB) wurde intensiviert durch die Weiterentwicklung schneller Simulationsmethoden für laserinduzierte Reaktionen (unter Einschluss von Optimierung) sowie die effiziente numerische Simulation ultrakurzer Laserpulse. Spezielle Kooperationen des für die Physik zuständigen Fachberaters des Rechenzentrums im Bereich der Quantenelektrodynamik sowie des für die Chemie zuständigen Fachberaters zeigten, daß das für diese Fachberater vorgesehene gemischte Beratungs- und Forschungsprofil erfolgversprechend ist.

Abschließend sei auf die doch recht stattliche Anzahl von *Lehrbüchern* hingewiesen, die gerade im vergangenen Jahr fertiggestellt wurden und die ganz sicher dazu beitragen werden, daß das im ZIB erarbeitete mathematische Wissen und algorithmische Know–How nicht nur an den Berliner Universitäten, sondern auch an anderen Universitäten und in der Industrie ankommt.

Der Bereich **Diskrete Methoden** — bestehend aus den Abteilungen *Kombinatorische Optimierung*, *Software–Information*, *Visualisierung und Paralleles Rechnen* — konnte im Berichtszeitraum das Spektrum seiner Forschungsaktivitäten auf neue Gebiete ausdehnen. Drittmittel der Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung des Landes Berlin, des DAAD, der DFG, des BMBF sowie von industriellen Partnern, wie beispielsweise Cray, E–PLUS, Siemens AG, Telekom AG oder Telenor Research, förderten die Weiterführung beziehungsweise Neuaufnahme einer Vielzahl von Forschungsprojekten und die Beschäftigung wissenschaftlicher Mitarbeiter.

Durch Mittel des BMBF und des DAAD unterstützt steht der Bereich Diskrete Methoden auf internationaler Ebene in bilateraler Zusammenarbeit mit Universitäten in Argentinien und Brasilien. Der Bereich beteiligte sich im Berichtszeitraum auf europäischer Ebene in dem von der EU geförderten Netzwerk DIMANET zur Kooperation auf dem Gebiet der Diskreten Mathematik. Ferner war der Bereich mit sechs Partner–Institutionen aktiv in einem Twinning–Projekt im SCIENCE–Programm der EU verbunden. Auf nationaler Ebene beteiligt er sich im Rahmen des DFG–Schwerpunktes “Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung” und leitet das durch das BMBF geförderte Projekt “Fachinformationen in der Mathematik”. Die Abteilungen des Bereichs Diskrete Methoden wirkten zudem bei der Gestaltung mehrerer Workshops über Fachinformationssy-

steme, bei der Gestaltung des Euler-Kolloquiums, des Graduiertenkollegs "Algorithmische Diskrete Mathematik" und der Tagungsreihe "Berliner Algorithmen-Tag", Veranstaltungen, die in Zusammenarbeit mit den Berliner Universitäten stattfinden, mit.

Eine aus Fördermitteln der Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung und Projektmitteln des ZIB eingerichtete Arbeitsgruppe zu dem Thema "Stochastische Optimierung und angewandte Wahrscheinlichkeitstheorie" hat sich im Berichtszeitraum am Konrad-Zuse-Zentrum fest etablieren können. Sie wirkt in Zusammenarbeit mit dem Bereich Diskrete Methoden und Kollegen der HU erfolgreich bei zahlreichen Projekten mit.

Die Forschungsaktivitäten der Abteilung *Kombinatorische Optimierung* konzentrieren sich auf drei Themenkreise. Einerseits beschäftigen sich zahlreiche Mitarbeiter mit der Erschließung und Modellierung praktischer Probleme. Daneben steht die theoretische Analyse solcher mathematischen Modelle und die Forschung an Grundlagenprojekten im Vordergrund. Abteilungsübergreifend findet sich als dritter Themenkreis die Entwicklung von Algorithmen zur Lösung realer Probleme. Ein wesentlicher Teil der Forschungsaktivitäten des Bereichs erstreckt sich auf die Modellierung praxisrelevanter Probleme, die theoretische Analyse der Modelle und anschließende algorithmische Umsetzung dieser Erkenntnisse zur Lösung realer Beispiele.

Im Berichtszeitraum wurden beispielsweise folgende Praxis-Probleme untersucht: Fahrzeugeinsatzplanungsprobleme im Rahmen des Behindertentransports, Fahrzeugumlaufplanungsprobleme für den öffentlichen Nahverkehr, die Kapazitätsplanung für kostengünstige und ausfallsichere Telekommunikationsnetzwerke, Routing in Telekommunikationsnetzwerken, die Dimensionierung von Mobilfunknetzen und die optimale Blockauswahl bei der Kraftwerkseinsatzplanung.

Zum Teil motiviert durch solche Fragestellungen wurden im Berichtszeitraum viele mathematische Grundlagenprojekte vorangetrieben. Dabei richteten sich die Hauptanstrengungen auf die Erschließung verschiedener Methodiken der ganzzahligen und stochastischen Optimierung, der algebraischen Zahlentheorie, der Kombinatorik und der Polyedertheorie für obige Fragestellungen. Untersucht wurden insbesondere folgende Themen: Gittermethoden in der ganzzahligen Optimierung, ganzzahlige und gemischt-ganzzahlige Rucksackprobleme, die Approximation und Stabilität stochastischer Optimierungsprobleme, die Bandweiten-selektion und die geometrische Analyse von Polyedern.

An der Entwicklung allgemeiner Algorithmen zur Lösung schwerer kombinatorischer oder stochastischer Optimierungsprobleme sind viele Mitarbeiter der Abteilungen *Kombinatorische Optimierung* und *Visualisierung und Paralleles Rechnen* beteiligt. Als Schwerpunkte sind die Entwicklung von Codes zur linearen Programmierung, welche auf Parallelrechnern bereitgestellt werden sollen, und die Ausarbeitung eines parallelen Frameworks für Schnittebenen- und Branch&Cut-Verfahren zu nennen. Daneben werden Algorithmen basierend auf Gröbner Basen, LP-basierte Heuristiken, Separationsalgorithmen und Einzelimplementie-

rungen von Schichtenverfahren für spezielle kombinatorische Optimierungsprobleme konzipiert, implementiert und praktisch erprobt.

Als bereichsübergreifende Aktivitäten der Abteilung *Visualisierung und Paralleles Rechnen* verdienen zwei Projekte besondere Beachtung. Das BRTB-Visualisierungsprojekt — vom BMBF gefördert — hat das Ziel, eine Infrastruktur zu schaffen, welche es Wissenschaftlern erlauben soll, netzweite Ressourcen unter Einsatz von Breitbandnetzen zur Visualisierung zu nutzen. Daneben stellte die Abteilung einen Film über die Aufgaben und Ziele des ZIB fertig, welcher auf der CEBIT 95 präsentiert wurde.

Die Arbeiten der Abteilung *Software-Information* konzentrierten sich im Berichtszeitraum auf zwei Projekte zur mathematischen Information und Kommunikation. Primäres Ziel des vom BMBF geförderten (ersten) DMV-Projekts “Fachinformation”, an dem 50 mathematische Fachbereiche und Forschungsinstitute teilnehmen, ist die Förderung der Nutzung mathematikrelevanter Online- und CD-ROM-Datenbanken. Aus dem laufenden Projekt entstand eine Initiative zur Errichtung eines “Verteilten Informationssystems für die Mathematik”, das die DMV und das ZIB als (zweites) Fachinformationsprojekt zur Förderung durch den BMBF vorbereiten. In diesem Zusammenhang stand auch der Aufbau der Startversion eines zentralen Hyper-G-Servers für die “International Mathematical Union (IMU)” sowie eines ersten Servers für die ICM’98, dem für 1998 geplanten “International Congress of Mathematicians” in Berlin.

3.2 Grundlagenprojekte

Kaskadische Mehrgitterverfahren

Bearbeiter: F. Bornemann, P. Deuffhard, R. Krause

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Berichtszeitraum wurde das in [1] eingeführte CCG-Verfahren weiter untersucht. Anfang 1994 führte Shaidurov (im Herbst 1993 Gast des ZIB) für die CCG-Iteration einen Optimalitätsbeweis im Falle uniformer Triangulierungen. Eine genaue Analyse des Beweises ergab, daß das CG-Verfahren durch andere Iterationsverfahren, welche im Kontext der Mehrgitterverfahren *Glättungsiterationen* heißen, ersetzt werden kann [3].

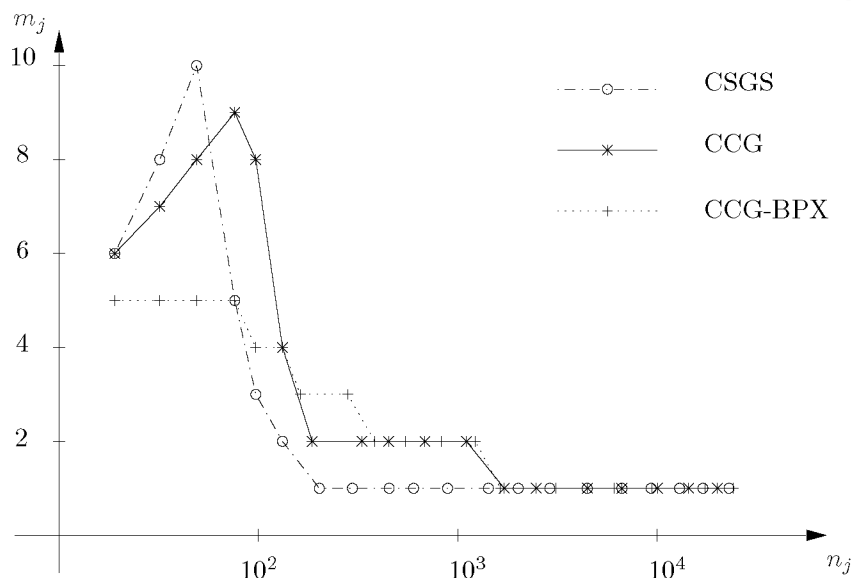


Abb. 1: Iterationszahlen in Abhängigkeit von den Freiheitsgraden

Das so entstehende Iterationsverfahren stellt eine Verbindung zwischen geschichteten Mehrgitterverfahren (nested multigrid) und Iterationsverfahren dar, welche auf dem Kaskadenprinzip [4] basieren. Es wurde daher *kaskadisches Mehrgitterverfahren* (cascadic multigrid) genannt. Die theoretische Diskussion des Verfahrens ergab für adaptive Gitter eine neue Steuerung des Iterationsverlaufes [5], welche robuster als die ursprünglich in [1] vorgeschlagene ist.

Wesentliches Merkmal der Steuerung dieses Verfahrens sowie des Beweises von Genauigkeit und Optimalität ist die Notwendigkeit, auf gröberen Gittern mehr Glättungsiterationen durchzuführen als auf feineren Gittern (Abb.1). Da letztlich nur die Kosten auf dem feinsten Gitter zählen und auf diesem typischerweise nur noch eine Glättungsiteration erforderlich ist, schlagen sich in der Gesamtrechnenzeit des iterativen Löser die Kosten *eines* Glättungsschrittes nieder (Abb.2). Für derartige Iterationsverläufe erweist sich das CG-Verfahren erneut als vorteilhaft.

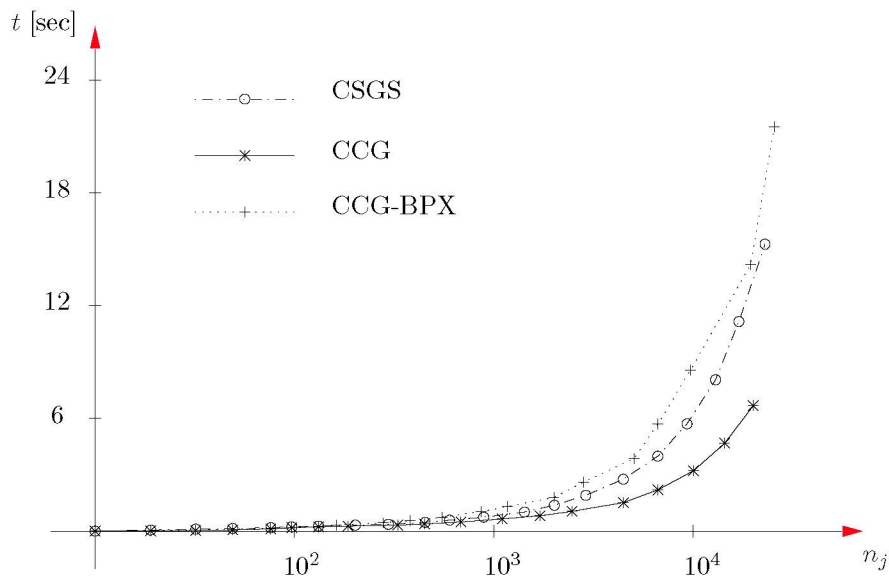


Abb. 2: Gesamte Iterationszeit über Freiheitsgraden

Gegenstand weiterer Untersuchungen ist die Anwendung des Verfahrens auf Probleme mit großen Sprüngen in den Koeffizienten. Hier dürfen für einen robusten Iterationsverlauf die Grobgitter nicht zu grob sein, was umgekehrt bedeutet, gegebenenfalls auf weiteren Gittern direkt zu lösen. Hierfür soll eine Steuerung entwickelt werden. Ferner wird über die Möglichkeit nachgedacht, die Gitterverfeinerung den Erfordernissen des kaskadischen Mehrgitterverfahrens für diese Problemklasse anzupassen.

Literatur

1. P. Deuffhard: *Cascadic conjugate gradient methods for elliptic partial differential equations. Algorithm and numerical results.* In: D. Keyes, J. Xu (eds.), Proceedings of the 7th International Conference on Domain Decomposition Methods 1993, AMS, Providence, pp. 29–42 (1994)
2. F. Bornemann: *On the convergence of cascadic iterations for elliptic problems.* Konrad-Zuse-Zentrum, Preprint SC 94–8 (1994)
3. P. Deuffhard, P. Leinen, H. Yserentant: *Concepts of an adaptive hierarchical finite element code.* IMPACT Compt. Sci. Engrg., pp. 3–35 (1989)
4. F. Bornemann, P. Deuffhard: *Cascadic multigrid method for elliptic problems.* Eingereicht bei Numer. Math. (Oktober 1994)

Monotone Mehrgittermethoden

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

Kooperation: R.H.W. Hoppe (Mathematisches Institut, TU München), H. Ysernant (Mathematisches Institut, Universität Tübingen)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Projekt ist die Fortsetzung des gleichnamigen Vorhabens aus dem Berichtsjahr 1993.

Die Entwicklung von monotonen Mehrgittermethoden im Berichtsjahr 1993 bedeutete einen Durchbruch bei der schnellen Lösung von Hindernisproblemen. Die Grundidee besteht in der Erweiterung des klassischen nichtlinearen Gauss–Seidel Verfahrens durch zusätzliche Grobgitterkorrekturen, die sich aus der Optimierung des Energiefunktional in zusätzliche “niederfrequente” Suchrichtungen ergeben. Da die direkte Anwendung des so entstandenen Iterationsverfahren zu aufwendig ist, ersetzt man die entsprechenden Grobgitterprobleme durch *quasioptimale* Approximationen. Diese Approximationen sind in lokal exakt und erhalten zusammen mit der Monotonie auch die globale Konvergenz des ursprünglichen Verfahrens, ermöglichen aber auf der anderen Seite die effiziente Implementierung als V–Zyklus. Eine zusätzliche Anpassung (Abschneiden) der Suchrichtungen am freien Rand führt darüberhinaus zu drastischen Verbesserungen der Konvergenzgeschwindigkeit. Durch Verfeinerung der lineare Theorie erhält man logarithmische a priori Schranken für die asymptotischen Konvergenzraten. Wie schon früher angedeutet, lässt sich diese Vorgehensweise grundsätzlich auf alle diskreten Optimierungsprobleme übertragen, für die das (nichtlineare) Gauss–Seidel Verfahren konvergiert.

Im Berichtsjahr wurden konvexe, stückweise quadratische Optimierungsprobleme betrachtet, wie sie etwa bei der impliziten Zeitdiskretisierung von Stefan–Problemen in Enthalpie–Formulierung entstehen. In diesem Fall führt man die quasioptimale Approximation der Grobgitterprobleme durch die Forderung nach Invarianz des aktuellen freien Randes unter der Grobgitterkorrektur auf entsprechende Resultate für Hindernisprobleme zurück. Das aktuelle Hindernis wird zusammen mit dem aktuellen freien Rand durch die Feingitterglättung eingestellt. Die resultierenden monotonen Mehrgittermethoden sind nach wie vor global konvergent und es gelten dieselben Abschätzungen der asymptotischen Konvergenzraten wie für Hindernisprobleme. Auch die numerischen Ergebnisse sind vergleichbar [1].

Im Unterschied zu bisher bekannten Mehrgittermethoden für Stefan–artige Probleme erlaubt unser neuer Zugang die Kopplung der unterschiedlichen Phasen über die Grobgitterkorrektur. So erhält man nicht nur bessere Konvergenzraten sondern auch ein robustes Verhalten gegenüber der Anzahl der Phasen. Diese Eigenschaft motiviert die stückweise *lineare* Approximation stückweise glatter Enthalpiefunktionen, wie sie zum Beispiel bei der Poröse–Medien–Gleichung auftreten. Auf diese Weise lassen sich einerseits wesentliche Eigenschaften des kon-

tinuierlichen Problems bei der Diskretisierung erhalten und andererseits die resultierenden diskreten Probleme schnell lösen [2].

Adaptive Techniken zur Konstruktion einer geeigneten Hierarchie von Gittern basieren wesentlich auf zuverlässigen a posteriori Schätzungen des Diskretisierungsfehlers. Zu diesem Zweck wurden hierarchische Fehlerschätzer für Variationsungleichungen entwickelt und analysiert [2]. Insbesondere erhält man eine Einschließung des Diskretisierungsfehlers, bei der die auftretenden Konstanten von einer Saturationsbedingung, einer Genauigkeitsbedingung an die iterative Lösung und vom Verhalten des diskreten freien Randes abhängen.

Die Abbildungen 1 und 2 illustrieren die approximative Lösung der Poröse-Medien-Gleichung für eine Anfangsbedingung mit fingerförmigem, kompaktem Träger [2]. Das linke Bild in Abb. 1 zeigt den freien Rand nach dem ersten und dem vierzigsten Zeitschritt während das rechte Bild die zugehörigen Approximationen entlang eines diagonalen Schnittes darstellt. Wie oben angedeutet ist dabei die als Enthalpie auftretende Wurzelfunktion unter Erhaltung der endlichen Ausbreitungsgeschwindigkeit stückweise linear approximiert worden. Abb. 2 zeigt die entsprechenden adaptiv erzeugten Gitter.

Literatur

1. R. Kornhuber: *Monotone Multigrid Methods for Elliptic Variational Inequalities II*. Preprint SC 93-19, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (1994)
2. R. Kornhuber: *Adaptive Monotone Multigrid Methods for Nonlinear Elliptic Problems*. Habilitationsschrift, eingereicht bei der FU Berlin (1994)

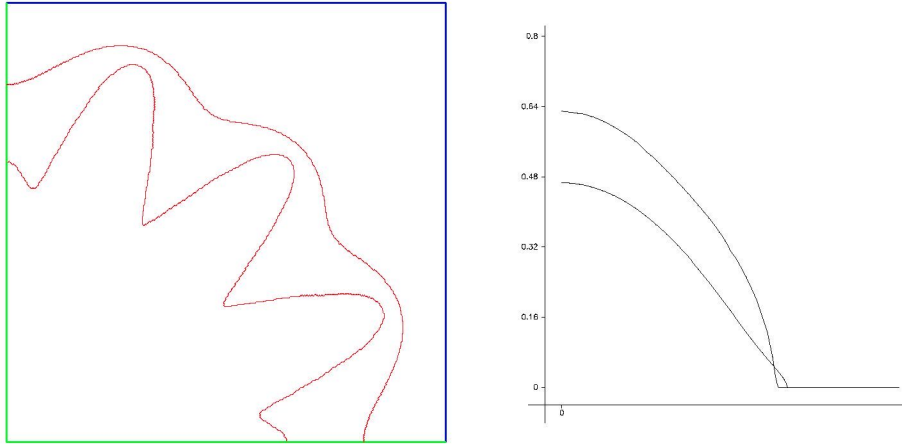


Abb. 1: Diskrete freie Ränder und Diagonalschnitte für den ersten und den letzten Zeitschritt

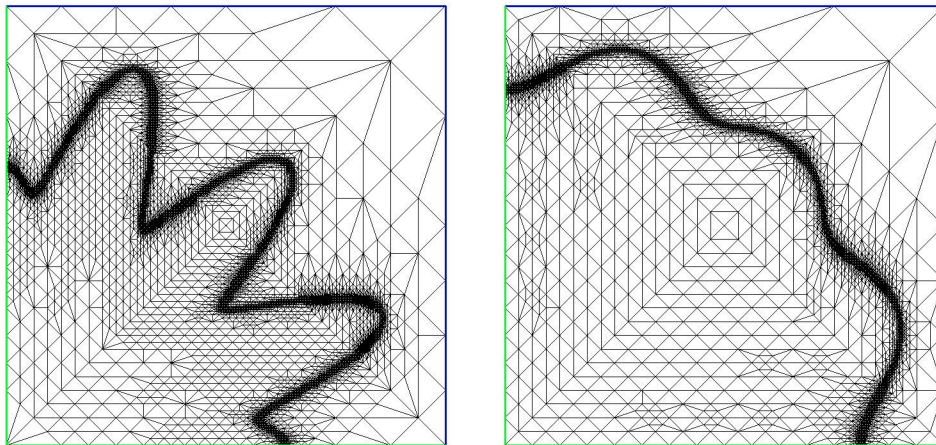


Abb. 2: Endtriangulierung für den ersten und den letzten Zeitschritt

Adaptive Multilevel-Methoden für die Kirchhoff-Platte

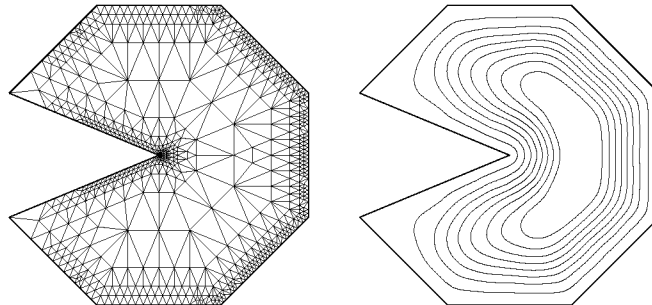
Bearbeiter: A. Fischer, R. Kornhuber

Beschreibung der Forschungsarbeit: Ausgehend von den Grundgleichungen der linearen Elastizität führen die Hypothesen von Mindlin und Reissner zusammen mit der Normalenhypothese von Kirchhoff-Love zu einem elliptischen Problem vierter Ordnung für die sogenannte Kirchhoff-Platte. Die konforme Diskretisierung der zugehörigen Variationsgleichung erfordert stetig differenzierbare Ansatzfunktionen. Im Berichtsjahr wurde die Frage untersucht in welcher Weise sich adaptive Multilevel-Techniken für elliptische Probleme zweiter Ordnung auf die konforme Diskretisierung der Plattengleichung mit dem Argyris-Element übertragen lassen.

Eine besondere Rolle spielte dabei die Assemblierung der Steifigkeitsmatrix. Als besonders effizient erwies sich ein hierarchischer Ansatz, bei dem die lokalen Steifigkeitsmatrizen nur auf dem groben Gitter ausgewertet und in jedem Verfeinerungsschritt lokal vererbt werden. Zur Lösung der diskreten Probleme wurde das ccg-Verfahren verwendet (siehe entsprechendes Projekt in diesem Jahresbericht). Dabei ergaben sich einige Schwierigkeiten, die sich durch die Tatsache erklären lassen, daß die Ansatzräume im vorliegenden Fall nicht mehr geschachtelt sind. Die Behandlung der daraus resultierenden niederfrequenten Störungen machen weitere Untersuchungen erforderlich. Zur adaptiven Steuerung der Gitter wurden hierarchische a posteriori Fehlerschätzer entwickelt. Der Ansatz gündete sich auf entsprechende Untersuchungen von Bornemann, Erdmann und Kornhuber (siehe Projekt "Adaptive Multilevel-Finite-Elemente-Methoden in drei Raumdimensionen" im Jahresbericht 1993). Die Figuren 1 und 2 zeigen die Ausgangstriangulierung \mathcal{T}_0 zusammen mit der adaptiv verfeinerten Triangulierung \mathcal{T}_7 und den Höhenlinien der zugehörigen Finite-Elemente-Approximation. Man beachte die richtige Gewichtung der Verfeinerungen am Rand und in der Singularität an der einspringenden Ecke.

Literatur

1. A. Fischer: *Adaptive Multilevel-Methoden für die Kirchhoff-Platte*. Diplomarbeit, eingereicht bei der Freien Universität Berlin (1994)



Triangulierung und Lösung

Adaptive Multilevel–Methoden für Helmholtz–Eigenwertprobleme

Bearbeiter: F. Schmidt, P. Deuffhard

Kooperation: Dr. H. -P. Nolting (Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin GmbH), Dr. R. März (Siemens AG, München)

Förderung: Das Projekt wird durch das BMBF gefördert innerhalb des Programms *Anwendungsorientierte Verbundvorhaben auf dem Gebiet der Mathematik*

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die Kenntnis der Eigenlösungen integriert-optischer Bauelemente wie Schalter (s. Abb. 1), Koppler, Modulatoren oder Laser ist eine wesentliche Voraussetzung beim Entwurf optischer Schaltungen. Die in den letzten Jahren entwickelte Halbleitertechnologie gestattet die technische Beherrschung von Strukturen hoher geometrischer Komplexität. Das Ziel dieses Projektes ist es, effektive Algorithmen zur Berechnung der niedrigsten Eigenlösungen der entstehenden Multiskalen-Probleme bereitzustellen. In dem hier behandelten Kontext wird das physikalische Problem durch eine Helmholtzgleichung in zwei Raumdimensionen beschrieben. Ausgangspunkt des gewählten Zugangs ist die Charakterisierung des kleinsten Eigenwertes als Minimum des Rayleigh-Quotienten. Diese Darstellung erlaubt eine natürliche Einbettung des diskreten Problems in das kontinuierliche, was insbesondere für eine adaptive Realisierung von entscheidender Bedeutung ist. Die vorgeschlagene Mehrgitterformulierung des Minimierungsproblems konnte algorithmisch vereinfacht werden, so daß ein V-Zyklus jetzt nur etwa den doppelten Aufwand im Vergleich zum äquivalenten linearen Problem erfordert.

Bereits bei der Untersuchung typischer eindimensionaler Beispiele stellte sich heraus, daß die Minimierung in Richtung der Knotenbasisfunktionen bei dicht zusammenliegenden Eigenwerten zu extrem schlechter Konvergenz führt. Als Beispiel sei das Resultat einer Iteration bzgl. einer Kopplerstruktur angegeben, wobei als Startwert eine Funktion mit gleichverteiltem Spektrum verwendet wurde. Abb. 2 zeigt den unteren Teil des Spektrums der Lösung nach 200 Iterationschritten. Die niedrigsten beiden Eigenlösungen sind trotz der großen Iterationszahl mit noch nahezu gleichem Betrag enthalten, d.h. das Verfahren kann eine solche Situation nicht effizient behandeln. Dieses unerwünschte Verhalten konnte durch den Einsatz eines nichtlinearen cg-Verfahrens vermieden werden. Die damit im Mehrgitterkontext erzielten Konvergenzraten für die eindimensionalen Beispiele lassen die Kombination Rayleigh-Quotient-Minimierung / nichtlineares cg-Verfahren auch für die Behandlung der 2D-Probleme als geeignet erscheinen. Eine erste Publikation ist für 1995 in Vorbereitung.

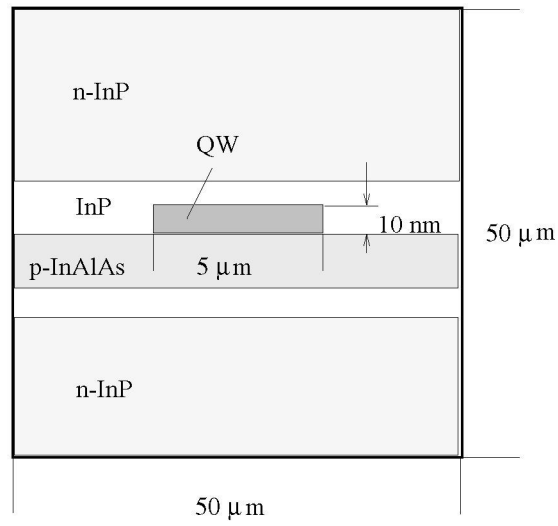


Abb. 1 Integriert-optischer Quantum-Well Schalter

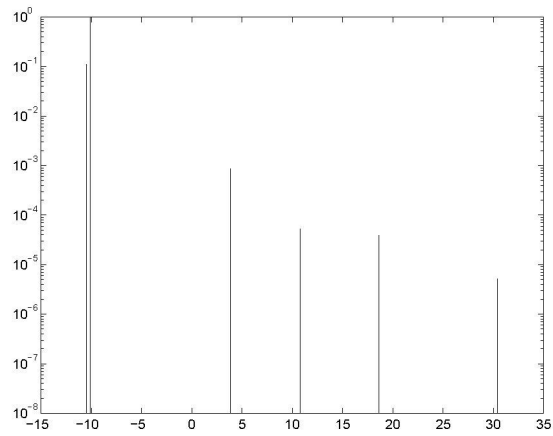


Abb. 2 Spektrum nach 200 Iterationsschritten der knotenorientierten Minimierung

Bestimmung des Referenz-Wellenvektors bei der paraxialen Approximation von Wellengleichungen

Bearbeiter: F. Schmidt

Kooperation: R. März (Siemens AG, Zentralabteilung Forschung und Entwicklung, Systemtechnologien Komponenten und Module, Photonik)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die Simulation von Wellenausbreitungen fester (zeitlicher) Frequenz ist wichtiger Bestandteil von Untersuchungen z.B. in der Quantenmechanik, der Optik oder der Akustik. Ein insbesondere in der Technik häufig auftretender Spezialfall allgemeiner Wellenausbreitung ist dadurch gekennzeichnet, daß die Wellenausbreitung nur in einer Richtung bzgl. einer gedachten Geraden auftritt. Bei der Approximation des allgemeinen Modells durch entsprechend einfacher behandelbare “one way” – oder paraxialen Wellengleichungen stellt sich, unabhängig von der verwendeten Approximationstechnik, immer die Frage nach der Wahl einer geeigneten Referenz-Wellenvektors. Dieser Referenz-Wellenvektor gibt die mittlere Geschwindigkeit und Richtung des sich ausbreitenden Wellenpaketes an. Üblicherweise wird der Referenz-Wellenvektor empirisch ermittelt oder es wird eine Eigenmodenanalyse durchgeführt. Ein algorithmisch einfacher und zuverlässiger Zugang wurde in [1] vorgeschlagen und im Berichtszeitraum zu einem in einer großen Problemklasse anwendbaren Werkzeug entwickelt [2]. Die Grundidee besteht darin, eine Fehlerfunktion zu definieren und deren Norm in Abhängigkeit vom Referenz-Wellenvektor zu minimieren. Bei geeigneter Definition der Fehlerfunktion kann die Lösung des Minimalproblems explizit angegeben werden. Zur Berechnung der Koeffizienten des Referenz-Wellenvektors müssen dann nur Skalarprodukte ausgewertet werden, was die Implementierung des Algorithmus in bereits bestehende Software einfach macht. Als Nebenprodukt dieses Zugangs erhält man die mittlere Gruppengeschwindigkeit des Wellenpakets. Über den Approximationsaspekt hinaus kann diese Kenntnis dazu verwendet werden (z.B. bei der zeitabhängigen Simulation der Schrödingergleichung), um ein Wellenpaket mit hoher Gruppengeschwindigkeit in quasi ruhendes Wellenpaket zu transformieren. Dadurch kann in vielen Fällen eine erhebliche Verbesserung der numerischen Effizienz erreicht werden.

Literatur

1. F. Schmidt: *An Adaptive Approach to the Numerical Solution of Fresnel's Wave Equation*. IEEE Journal of Lightwave Technology, **11**, 1425–1435 (1993)
2. F. Schmidt, R. März: *On the Reference Wave Vector of Paraxial Helmholtz Equations*. Preprint SC 94–38, Konrad-Zuse-Zentrum (1994)

Adaptive h - p -Methoden für elliptische Randwertprobleme

Bearbeiter: G.W. Zumbusch, R. Beck, P. Deuffhard

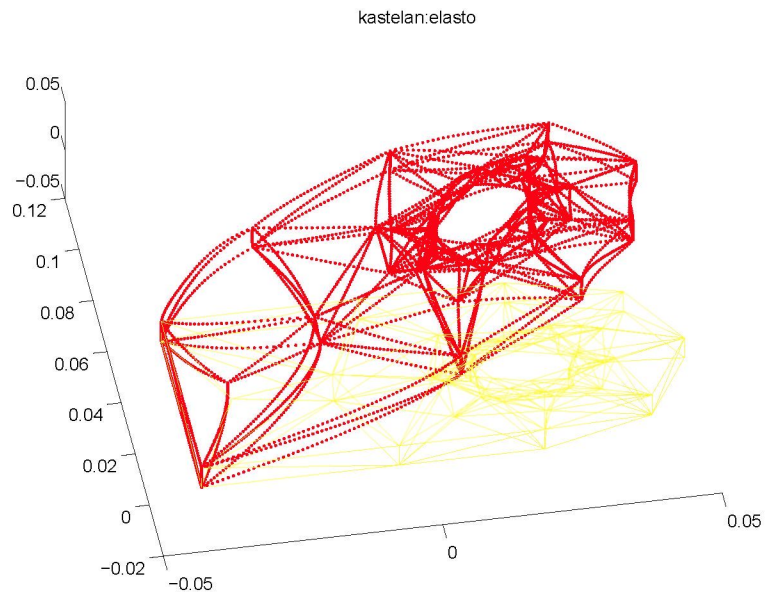
Kooperation: A. Hohmann (University of Houston/USA), M. Wulkow (CiT GmbH, Rastede)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Projekt ist eine Fortsetzung der im Vorjahr begonnenen Arbeiten zu h - p Finite-Elemente-Methoden (FEM). Nach einer vollständigen Neuimplementierung der bestehenden FEM-Fassung auf Basis einer objektorientierten, in C++ geschriebenen, adaptiven Multilevel FEM-Version in 3D aus dem Berichtszeitraum konnten einige Neuerungen eingebracht werden.

Zunächst wurde die Konstruktion der polynomialen Ansatzfunktionen für Simplex-Elemente so modifiziert, daß nicht mehr die Kondition des linearen Gleichungssystems optimiert wurde, sondern die Kondition des mit einer Zwei-Level-Gebietszerlegungsmethode vorkonditionierten Gleichungssystems. Das bedeutete gleichzeitig eine neue Klasse von iterativen Gleichungssystem-Lösern in das Projekt einzubringen, die aus einem Multilevel-Verfahren in Kombination mit Blockglättern und einer Reihe von Blocklösern besteht. Damit konnten diese neuen Löser mit den bestehenden Multilevel-Lösern und verschiedenen Abbruchkriterien wie dem neuentwickelten CCG (siehe auch Grundlagenprojekt Kaskadische Mehrgitterverfahren) verglichen werden.

Nach einer Übertragung der Idee des kantenorientierten Fehlerschätzers (DLY) auf höhere polynomiale Ansätze in 3D mit Hilfe der gerade konstruierten Ansatzfunktionen waren damit bereits adaptive Multilevel-Fassungen der h -Version, höhere Ordnungs h -Versionen und adaptive und uniforme Multilevel p -Versionen möglich. Der Schritt zur adaptiven h - p -Version konnte dann mit verschiedenen h - p -Heuristiken vollzogen werden.

Der nächste Schritt bestand in der Erweiterung des ursprünglich skalaren Programms auf Systeme von drei Unbekannten. Dabei mußten im wesentlichen Fehlerschätzer und iterative Löser angepaßt und verallgemeinert werden. Darauf aufbauend wurden die Laméschen Differentialgleichungen der Elasto-Mechanik im linearen Verschiebungsansatz implementiert.



p -Version Lösung aus der Elasto-Mechanik

Literatur

- [1] F. Bornemann, P. Deuffhard: *Cascadic multigrid method for elliptic problems*. Eingereicht bei Numer. Math. (Oktober 1994)
- [2] G.W. Zumbusch: *Simultaneous h-p adaptation in multilevel finite elements*. Dissertation in Vorbereitung

Iterative Lösung nichtsymmetrischer, linearer Gleichungssysteme

Bearbeiter: P. Deuffhard, J. Lang, A. Schmidt

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Berichtsjahr 1994 wurde mit der systematischen Analyse iterativer Löser für nichtsymmetrische lineare Gleichungssysteme $Ax = b$, $A \neq A^T$ begonnen. Ziel dieser Grundlagenforschung ist die Erarbeitung von effektiven Multilevel-Algorithmien für partielle Differentialgleichungen mit *nicht-selbstadjungierten* Differentialoperatoren, wie sie in vielen Anwendungen auftreten, z.B. bei Navier-Stokes Gleichungen der Hydrodynamik und Gleichungen der chemischen Reaktionstechnik.

Zunächst wurde eine Reihe klassischer Derivate des CG-Verfahrens auf der Basis der Konvergenztheorie von Trefethen et al. [1] auf ihre Eignung innerhalb von Multilevel-Verfahren für unterschiedliche Differentialoperatoren gesichtet. Nebenbei entstand aufgrund einer Herleitung als bidiagonale Lanczos-Methode eine neue Fassung eines Iterationsverfahrens DCG ("Dual Conjugate Gradient"), welches sich als verkürzte Version des schon bekannten CGNE-Verfahrens erwies.

Im Kontext von Multilevel-Methoden für zeitabhängige nichtlineare Reaktion-Diffusions-Systeme erfolgten umfangreiche, vergleichende Testläufe. Für diese Aufgabenklasse hat sich die Kombination BiCG-STAB [2] mit SSOR-Vorkonditionierung als die beste erwiesen: Unabhängig von der Verfeinerung ergaben sich nie mehr als drei Iterationen pro Level! Ein Beweis für dieses optimale Verhalten steht noch aus.

Weitere Fragestellungen betrafen die Untersuchung der Konzepte Fehlerminimierung versus Residuenminimierung sowie ihre Einbettung in affinkovariante bzw. affinkontravariante Newtonverfahren.

Literatur

1. N.M. Nachtigal, S.C. Reddy, L.N. Trefethen: *How fast are nonsymmetric matrix iterations?* SIAM J. Matrix Anal. Appl., **13**, No. 3, pp. 778–795 (1992)
2. H.A. van der Vorst: *Bi-cgstab: A fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of nonsymmetric linear systems.* SIAM J. Sci. Statist. Comput., **13**, pp. 631–644 (1992)
3. P. Deuffhard: *A dual cg-method based on a bidiagonal Lanczos process for nonsymmetric linear systems.* Unpublished Manuscript (1994)

Entwicklung adaptiver Multilevelverfahren zur Berechnung von Reaktions–Diffusionsgleichungen

Bearbeiter: P. Deuffhard, J. Lang

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

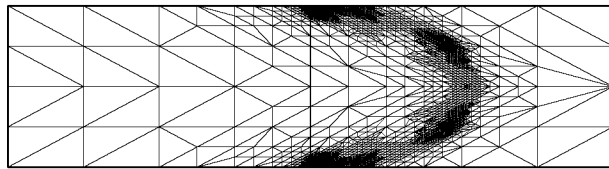
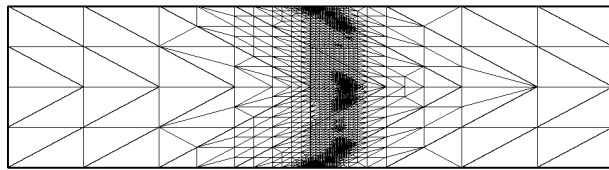
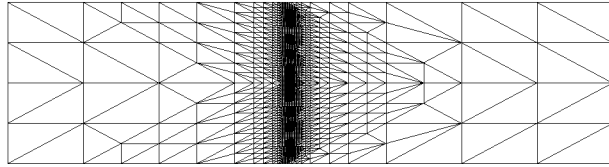
Förderung: Das Projekt wurde durch das BMBF innerhalb der Arbeitsgemeinschaft TECFLAM gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Mittelpunkt stand die Entwicklung eines adaptiven Multilevel–Verfahrens zur Lösung von zweidimensionalen Systemen von Reaktions–Diffusions–Gleichungen. Dabei konnte auf zahlreiche algorithmische Vorarbeiten für den eindimensionalen Fall, die im Programmpaket KARDOS realisiert wurden, zurückgegriffen werden. So wurde der Zeitintegrator fast vollständig übernommen. Das Einbringen einer neuen Schrittweitensteuerung, die vorwiegend auf Ideen von Deuffhard/Bornemann [1] und Gustafsson zurückgeht, führte vor allem für Probleme mit starker Dynamik zu einer drastischen Reduzierung der verworfenen Zeitschritte. Die Realisierung einer adaptiven räumlichen Diskretisierung bildete den eigentlichen Schwerpunkt der Arbeit. Ein erster robuster Fehlerschätzer für die auftretenden nichtsymmetrischen elliptischen Teilprobleme wurde entwickelt und ist in [2] dokumentiert. Für die Lösung der großen linearen Gleichungssysteme wurden zahlreiche vorkonditionierte Iterationsverfahren getestet. Dabei erwies sich die Löser–Kombination BICGSTAB und SSOR als besonders robust und schnell für die obige Aufgabenklasse. An einer tieferen theoretischen Einsicht für dieses gute Verhalten wird derzeit gearbeitet (siehe auch Grundlagenprojekt *Konvergenztheorie für die iterative Lösung nichtsymmetrischer, linearer Gleichungssysteme*).

Die Abbildungen zeigen adaptive Ortsgitter, wie sie typischerweise bei der zeitlichen Simulation einer Flammenausbreitung in einem Kanal entstehen.

Literatur

1. P. Deuffhard, F. Bornemann: *Numerische Mathematik II*, de Gruyter Lehrbuch 1994
2. J. Lang: *Two–dimensional Fully Adaptive Solutions of Reaction–Diffusion Equations* Preprint SC 94–34, Konrad–Zuse–Zentrum Berlin (1994), special issue of Appl. Numer. Math., angenommen zur Veröffentlichung



Adaptive Ortsgitter für die zeitliche Ausbreitung einer thermisch gehaltenen Flamme in einem Reaktionskanal

Entwicklung von FD-basierten Linienmethoden

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

Beschreibung der Forschungsarbeit: An dem Programmpaket PDEX1M, einem adaptiven Verfahren zur Lösung von parabolischen 1D-Systemen mit Hilfe von Extrapolationstechniken in Raum und Zeit, wurden umfangreiche Erweiterungen vorgenommen. Diese sind insbesondere für praxisnahe Anwendungen von großer Bedeutung. Basierend auf den von Hairer/Ostmann vorgeschlagenen Techniken zur globalen Lösungsdarstellung bei Extrapolationsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen, wurde eine spezielle Variante für den parabolischen Löser PDEX1M entwickelt, die z.B. auch den Fall von mitbewegten Gittern abdeckt. Zusammen mit der bereits vorhandenen Interpolationsvorschrift für die globale Darstellung im Ort, ist nun eine Darstellung der Lösung auf beliebigen Raum/Zeit-Gittern möglich, unabhängig von den intern verwendeten Rechengittern bzw. Zeitschrittweiten. Diese Möglichkeit des "dense output" in Raum und Zeit ist u.a. auch für die Visualisierung der Lösung von wesentlicher Bedeutung.

Die globale, stückweise differenzierbare Lösungsdarstellung ist eine notwendige Voraussetzung für eine effiziente Nullstellensuche in vorgegebenen, evtl. nicht-linearen Schaltfunktionen. Es wurde ein spezielles, skalares Newton-Verfahren entwickelt, das derartige Nullstellen wahlweise auf dem aktuellen Rechengitter oder auf einem vom Anwender definierten Gitter sucht.

Für den Bereich von räumlich zweidimensionalen Problemen wurde ein Programmpaket für die effiziente Diskretisierung von finiten Differenzen-Approximationen auf Tensorproduktgittern und zu ihrer automatischen numerischen Differentiation implementiert. Gleichzeitig wurden die Untersuchungen über eine möglichst effiziente Kopplung von Extrapolationsverfahren zur Zeitintegration mit iterativen Lösern für die auftretenden großen linearen Gleichungssysteme fortgeführt. Darüber hinaus wurden erste experimentell getestet, ob durch eine Manipulation an den Jacobimatrizen der benötigte Aufwand im Bereich der linearen Algebra reduziert werden kann, ohne dabei den Stabilitätsbereich des Verfahrens drastisch einzuschränken.

Literatur

1. U. Nowak: *Adaptive Linienmethoden für nichtlineare parabolische Systeme in einer Raumdimension*. Dissertation, FU Berlin (1994)

Adaptive Galerkinmethoden turbulenter reaktiver Strömungen

Bearbeiter: J. Fröhlich, P. Deuffhard

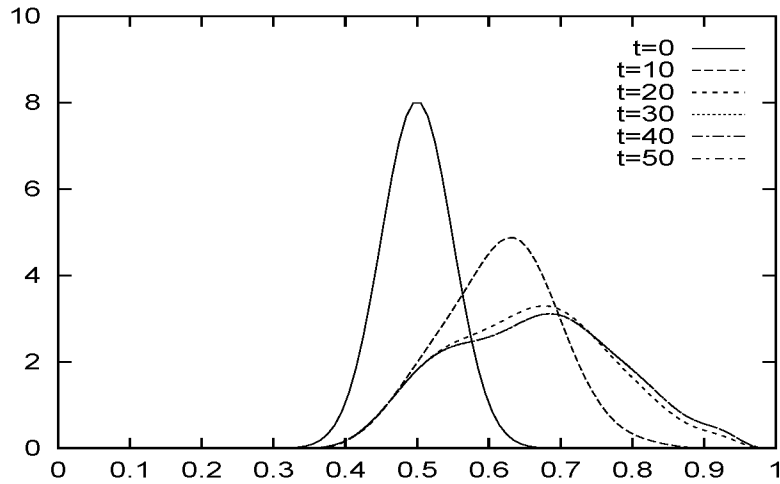
Kooperation: J. Warnatz (IWR, Heidelberg)

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

Beschreibung der Forschungsarbeit: Technische Verbrennungsprozesse sind i.a. durch komplexe, insbesondere turbulente Strömungsvorgänge gekennzeichnet. Von besonderem Interesse ist dabei die Wechselwirkung der Transportphänomene mit dem Ablauf der chemischen Reaktionen. Um sie im Rahmen eines statistischen Ansatzes zu beschreiben, ist die Kenntnis der Wahrscheinlichkeitsdichte (PDF) für den thermo-chemischen Zustand des Gases erforderlich. Für die Beschreibung dieses Zustandes existieren eine ganze Reihe verschiedener Parametrisierungen. Sie reichen von Ein-Parametermodellen bis hin zur vollständigen Berücksichtigung aller Zwischenprodukte mit oft mehreren hundert Reaktionen. Die Dimension der PDF entspricht jedoch der Zahl der chemischen Parameter, so daß komplexe Chemie allein für akademische Probleme sinnvoll und realisierbar bleibt. Die Verwendung eines geeigneten reduzierten Mechanismus' ist daher unumgänglich. Hat man ein solches Reaktionsmodell, so gibt es zwei Wege, die entsprechende PDF darzustellen. Der Einsatz einer Monte Carlo Methode läßt beliebige Dimension und Form der PDF zu, ist aber relativ teuer. Andererseits kann man auch die Form der PDF durch Annahme einer Funktionenfamilie parametrisieren ("presumed shape closure"). Für diese Ansätze gab es bisher nur heuristische Lösungen, die i.a. auch keine Korrelationen berücksichtigen.

Im Berichtszeitraum wurden die im Vorjahr begonnenen Untersuchungen fortgesetzt, bei denen ein mathematisch abstrakter Zugang für die Behandlung der geschilderten Fragestellung gewählt wurde. Die PDF wird dabei in einem geeigneten Hilbertraum mit einer adaptiv gewählten Basis dargestellt. Dies kann mit dem kontinuierlichen Pendant der von Deuffhard und Wulkow entwickelten Moving Weight Basis geschehen, wenn man die entsprechenden Orthogonalpolynome verwendet. Im vorliegenden Fall leisten dies die Jacobi-Polynome. Die Ableitung dieser Polynome nach ihren Parametern wurde in [1] berechnet. Darüber hinaus wurde eine Variante des Moving Weight Ansatzes entwickelt, die besser konditioniert ist und keinen Wechsel des Hilbertraumes durch die Adaption impliziert [2]. Dies resultiert in einer Basis vom Gram-Charlier Typ. Die PDF-Transportgleichung, die gegenwärtig Grundlage aller Monte Carlo Verfahren ist, kann dann mit Hilfe einer Galerkin-Methode im Wahrscheinlichkeitsdichteraum diskretisiert werden. Bei gegebenem Reaktionsmodell erlaubt dies, die PDF durch die Komponenten der adaptiven Hilbertbasis darzustellen. Die Orthogonalität der Basis ermöglicht außerdem Fehlerschätzung in der entsprechenden Norm. In

[2] wurde das Verfahren im Detail ausgearbeitet, hinsichtlich der Approximationseigenschaften untersucht und auf den räumlich homogenen Fall angewendet. Durch die Adaption der Basis wird bereits mit wenigen Freiheitsgraden eine gute Approximation typischer PDFs erzielt.



Zeitliche Evolution der PDF für einen homogenen Rührreaktor berechnet mit 10 Freiheitsgraden [2].

Literatur

1. J. Fröhlich: *Parameter Derivatives of the Jacobi Polynomials and the Gaussian Hypergeometric Function*. *Integral Transforms and Special Functions* **2**, 252–266 (1994)
2. J. Fröhlich, P. Deuffhard: *Moving Weight Galerkin Methods for Turbulent Reactive Flows*. ZIB–Berlin, Preprint SC 94–36 (1994)

Parameter–Ableitungen der Jacobi–Polynome

Bearbeiter: J. Fröhlich

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Projekt *Adaptive Galerkinmethoden für die PDF–Transportgleichung turbulenter, reaktiver Strömungen* wird zur Diskretisierung einer partiellen Differentialgleichung ein adaptiver Moving-Weight Ansatz auf der Basis der Jacobi-Polynome $P_k^{\alpha,\beta}(x)$ verwendet. Da Gewicht und Polynome über die Parameter α und β gesteuert werden, tauchte die Frage nach einer geschlossenen Darstellung der Ableitungen dieser Polynome nach den Parametern auf. Überraschenderweise verlief ein einschlägiges Literaturstudium ergebnislos. Ein einfaches Argument zeigt jedoch, daß diese Terme polynomiale Gestalt haben müssen. Eine geeignete Darstellung der Jacobi–Polynome mittels der Gaußschen Hypergeometrischen Funktion führte schließlich zum Ziel [1]. Die in einem Zwischenschritt entwickelten Zusammenhänge für die Gaußsche Hypergeometrische Funktion wurden inzwischen von Wolfram Koepf aufgegriffen und zur Konstruktion weiterer Parameterableitungen verwendet [2].

Literatur

1. J. Fröhlich: *Parameter Derivatives of the Jacobi Polynomials and the Gaussian Hypergeometric Function*. *Integral Transforms and Special Functions*, **2**, 252–266 (1994)
2. W. Koepf: *Identities for Families of Orthogonal Polynomials and Special Functions*. In Vorbereitung.

Numerische Mathematik II — Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen

Bearbeiter: F. Bornemann, P. Deuffhard

Beschreibung der Forschungsarbeit: In der ersten Hälfte des Berichtszeitraums wurde die zweijährige Arbeit an dem Lehrbuch abgeschlossen. Wir geben hier den Klappentext des Buches sowie das Inhaltsverzeichnis wieder:

“Zeitabhängige Prozesse endlichdimensionaler Zustandsgrößen werden durch Anfangswertprobleme gewöhnlicher Differentialgleichungen oder durch differentiell-algebraische Probleme mathematisch beschrieben. Der vorliegende Band Numerische Mathematik II behandelt Methoden zu ihrer effizienten numerischen Lösung im interdisziplinären Kontext des Gebietes Scientific Computing (Wissenschaftliches Rechnen). Die Darstellung der Lösungsmethoden orientiert sich an einer möglichst eingängigen begrifflichen Abstimmung der Gebiete Numerik von Differentialgleichungen und Analysis dynamischer Systeme. Die Vererbung von Eigenschaften kontinuierlicher Differentialgleichungen auf ihre Diskretisierungen zieht sich wie ein roter Faden durch das ganze Buch. Der Inhalt umfaßt Differentialgleichungsmodelle, die Existenz- und Eindeigkeitstheorie sowie die Herleitung, Analyse und Implementierung effizienter adaptiver Integratoren bis hin zur Angabe von öffentlich verfügbarer Software. Das Buch richtet sich an Studierende der Mathematik und der Naturwissenschaften. Vorausgesetzt werden grundlegende Kenntnisse der Numerischen Mathematik sowie elementare Kenntnisse der Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen. Konzeptionell schließt Band II unmittelbar an den einführenden Band Numerische Mathematik I an.”

- 1 **Mathematische Modelle zeitabhängiger Prozesse**
 - 2 **Existenz und Eindeutigkeit**
 - 3 **Kondition und Stabilität**
 - 4 **Einschrittverfahren für nichtsteife Probleme**
 - 5 **Schrittweitensteuerung bei Einschrittverfahren**
 - 6 **Einschrittverfahren für steife und differentiell-algebraische Probleme**
 - 7 **Mehrschrittverfahren**
- Softwareverzeichnis
Literaturverzeichnis
Symbolverzeichnis
Namen- und Sachverzeichnis

Literatur

1. P. Deuffhard, F. Bornemann: *Numerische Mathematik II. Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen*. Walter de Gruyter, Berlin, New York (1994), ISBN 3-11-013937-5

Adaptive Dimensionsreduktion

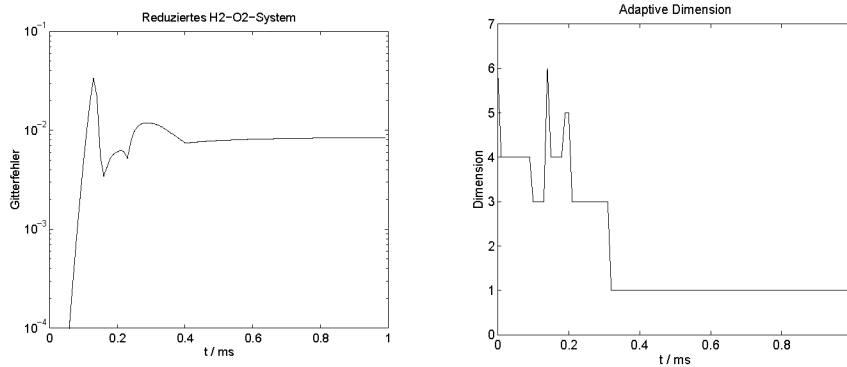
Bearbeiter: P. Deuffhard, F. Bornemann, J. Heroth

Kooperation: U. Maas (Institut für Technische Verbrennung, Universität Stuttgart), Vorarbeit im Rahmen des Schwerpunktprogramms “Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme” der DFG

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die mathematische Formulierung aktueller Probleme führt häufig auf hochdimensionale dynamische Systeme. Diese können dann aufgrund der großen Zahl an Freiheitsgraden nicht mit gängigen numerischen Methoden gelöst werden. Um dennoch Ergebnisse zu bekommen, werden die Modelle reduziert und vereinfacht. Ein übliches Mittel zur Vereinfachung ist die sogenannte “Quasi–Steady–State–Approximation” (QSSA). Hierbei werden in einem analytischen Verfahren diejenigen Variablen eliminiert, die schon nach kurzer Zeit einen stationären Wert annehmen oder sich aus den übrigen algebraisch berechnen lassen. Man erhält dann kleinere Modelle, die sich gegebenenfalls numerisch simulieren lassen. Es kann allerdings vorkommen, daß das reduzierte Modell nur in einem kleinen Bereich des Zustandsraumes brauchbar ist und die Lösung des reduzierten Modells mit der des ursprünglichen nicht viel zu tun hat. Im Extremfall besitzt das reduzierte Modell gar keine Lösung mehr. Daher ist eine Dimensionsreduktion wünschenswert, bei der abhängig vom Punkt im Zustandsraum ein reduziertes Modell angegeben wird, das den Gegebenheiten in einer Umgebung dieses Punktes Rechnung trägt. Der Chemiker U. Maas hat ein numerisches Verfahren entwickelt, das dies leisten soll. Sein numerisches QSSA benötigt aber eine fest gewählte Approximationsdimension und gibt keinen Aufschluß über den Approximationsfehler. Damit lassen sich viele Aspekte immer noch nicht genau genug beschreiben.

Das Ziel des Projektes war es, die Möglichkeiten und Grenzen des numerischen QSSA von U. Maas zu untersuchen. Das Verfahren beruht darauf, daß der Startwert auf eine lokale Mannigfaltigkeit projiziert wird (approximate inertial manifold). Das dynamische System wird dann durch ein differentiell algebraisches System auf der Mannigfaltigkeit ersetzt. Es zeigt sich, daß es tatsächlich möglich ist, das gegebene Modell numerisch zu reduzieren, falls die Linearisierung um den Anfangswert genügend Auskunft über den Verlauf der Lösung gibt. Dabei muß aber die Dimension des vereinfachten Modells lokal adaptiv gewählt werden, wenn man hinreichend genau bleiben will. Ebenso muß der Approximationsfehler zuverlässig geschätzt werden, um den Wert des einfachen Modells zu beurteilen. Dies konnte für gewöhnliche Differentialgleichungen realisiert werden, was Modellrechnungen an einem Knallgassystem mit Dimension 6 belegen (siehe Abbildung).

Es sind aber noch viele Fragen offen. So gibt es noch keine zuverlässige Schrittweitensteuerung für das numerische QSSA, was im Hinblick auf Effizienz und Robustheit notwendig ist. Ebenso ist der Aufwand des Algorithmus noch sehr hoch und die Einbindung in den Kontext reaktiver Strömungen unklar.



Das linke Bild zeigt die Entwicklung des Fehlers, der unterhalb der geforderten Genauigkeit von 10^{-2} bleibt. Das rechte Bild zeigt, daß schon nach kurzer Zeit ein im wesentlichen eindimensionales System vorliegt.

Literatur

1. U. Maas: *Automatische Reduktion von Reaktionsmechanismen zur Simulation reaktiver Strömungen*. Institut für Technische Verbrennung der Universität Stuttgart (1993)
2. J. Heroth: *Adaptive Dimensionsreduktion chemischer Reaktionssysteme*. Vorarbeiten zu einer Diplomarbeit (abgeschlossen 1995)

Eine adaptive Spektralmethode zur Berechnung periodischer Orbits

Bearbeiter: P. Deuffhard, A. Hohmann, T. Friese

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die Berechnung periodischer Lösungen einer gewöhnlichen, nichtlinearen, autonomen Differentialgleichung

$$x' = f(x)$$

tritt in vielen wissenschaftlichen und technischen Bereichen, beispielsweise in der Chemie und der Elektronik, auf. In der Chemie wird dabei der Verlauf chemischer Reaktionen untersucht, in der Elektronik werden Algorithmen zur Bestimmung periodischer Lösungen in Schaltkreis-Simulatoren benutzt, die ein Standardwerkzeug zum Entwurf von elektronischen Schaltungen sind.

Das Anliegen dieser Diplomarbeit ist die Darstellung eines Zugangs, der in den Ingenieurwissenschaften und der Industrie recht häufig benutzt wird. Dabei wird die Funktion x als Fourierreihe angesetzt, wobei die Fourierkoeffizienten dann so zu bestimmen sind, daß x obige Differentialgleichung löst. Dies geschieht mit einem Galerkin-Verfahren, d. h. man berücksichtigt bei der Rechnung nur endlich viele Koeffizienten. Das dabei entstehende einfach unterbestimmte, nichtlineare Gleichungssystem wird mit einem Gauß-Newton-Verfahren gelöst.

Ein zentraler Aspekt dieser Arbeit ist die Ausarbeitung eines adaptiven Konzepts. Die Güte der Approximation wird durch die Anzahl der verwendeten Fourierkoeffizienten bestimmt, die aufbauend auf eine Abschätzung des Fehlers automatisch während der Rechnung ermittelt wird.

Oft hängt die rechte Seite der Differentialgleichung noch von einem reellen Parameter λ ab, so daß man es also mit Systemen der Form

$$x' = f(x, \lambda)$$

zu tun hat. Hier möchte man dann periodische Lösungen in Abhängigkeit von λ bestimmen. Dazu bietet sich die tangentielle Fortsetzungsmethode an, die ausgehend von einer bekannten Lösung eine nächste berechnet.

Beispiel: Simulation der Schwingungen eines RC -Generators

Dabei wird man auf das folgende Differentialgleichungssystem mit dem Fortsetzungsparameter λ geführt:

$$\begin{aligned} x_1' &= \frac{\arctan(\lambda x_1) - (x_1 + x_2)}{R_1 C_2} - \frac{x_1}{R_2 C_2} \\ x_2' &= \frac{\arctan(\lambda x_1) - (x_1 + x_2)}{R_1 C_1}, \end{aligned}$$

wobei R_1, R_2 Widerstände und C_1, C_2 Kapazitäten bezeichnen. Für die Wertepaare $(C_1, C_2) = (1, 3), (1, 1), (3, 1)$ und $(R_1, R_2) = (1, 1)$ sowie einem in der L^2 -Norm gemessenen Approximationsfehler von 10^{-5} ergibt sich die in Abbildung 1

links dargestellte Abhängigkeit der Anzahl der Fourierkoeffizienten m vom Parameter λ . In Abbildung 1 rechts sind die Graphen der Lösung für das Wertepaar $(C_1, C_2) = (3, 1)$ nach dem 4. Schritt des Fortsetzungsverfahrens aufgetragen.

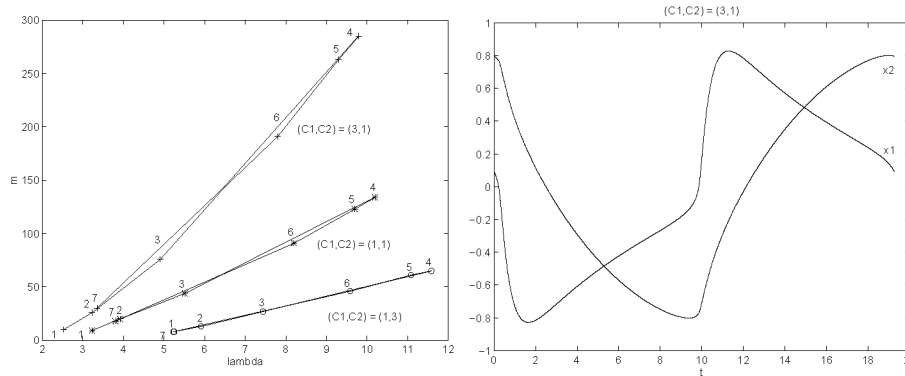


Abbildung 1. Links: Anzahl m der benötigten Fourierkoeffizienten pro Fortsetzungsschritt. Rechts: Schwingung des RC -Generators.

In Tabelle I ist die Anzahl der Gauß–Newton–Iterationen pro Schritt zusammengestellt.

Schritt	$(C_1, C_2) = (1, 3)$	$(C_1, C_2) = (1, 1)$	$(C_1, C_2) = (3, 1)$
1	6	6	6
2	4	4	4
3	3	4	3
4	3	3	5
5	1	1	2
6	3	3	3
7	6	6	5

Tabelle I. Anzahl der Gauß–Newton–Iterationen pro Schritt

Literatur

1. Friese, T.: *Eine adaptive Spektralmethode zur Berechnung periodischer Orbits*. Diplomarbeit, Freie Universität Berlin (1994)

Energieerhaltende Verfahren für Hamiltonsche Systeme

Bearbeiter: S. Reich, Ch. Schütte

Kooperation: U. Hansmann (ETH Zürich/Schweiz)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Es wurde ein implizites Diskretisierungsverfahren für Hamiltonische Differentialgleichungen entwickelt, das sowohl die Gesamtenergie als auch den Gesamtdrehimpuls erhält. Das Verfahren ist insbesondere zur Integration von Systemen mit hochfrequenten Lösungsanteilen geeignet, wie sie z.B. in der Molekulardynamik auftreten. Für derartige Systeme führen Standardverfahren entweder zu extrem kleinen Schrittweiten oder zu numerischen Instabilitäten. Im Gegensatz zu bereits bekannten energieerhaltenden Verfahren, die auf einer globalen Skalierung der Kräfte oder Geschwindigkeiten beruhen, wird in der neuen Methode die Energieerhaltung durch lokales Skalieren erreicht. Damit wird eine künstliche globale Kopplung aller Freiheitsgrade vermieden. Das Verfahren wurde an einem einfachen Argongitter getestet. Die Resultate bezüglich der mittleren Temperatur und der mittleren Fluktuation in den Positionen der Atome sind auch für sehr große Schrittweiten äußerst befriedigend. Eine effiziente Implementierung ist noch in Arbeit.

Energieerhaltende Diskretisierungen sind für eine effiziente Realisierung von Hybrid-Monte-Carlo-Verfahren zur Energieminimierung bei Makromolekülen unverzichtbar. In diesen Verfahren wird die Bestimmung der Trajektorien der Bewegungsgleichungen über längere Zeiten für sogenannte "global updates" (nächster Vorschlag ist "wenig korreliert" mit dem letzten) im Monte-Carlo-Algorithmus verwendet. Dabei kann die Schrittweite bei der numerischen Integration oft groß gewählt werden, da nicht die Genauigkeit der Trajektorie, sondern das statistisch signifikante Abtasten des Zustandsraumes wesentlich ist. Dieses Vorgehen führt allerdings nur dann zu ausreichend hoher Akzeptanz des Vorschlags, wenn die Energie hinreichend genau erhalten bleibt. Wie sich gezeigt hat, kann aber gerade das mit Standardmethoden für große Schrittweiten nicht gewährleistet werden.

Literatur

1. S. Reich: *Enhancing energy conserving methods*. Submitted to *BIT* (1994)

Nichtlineare Glättung hochoszillatorischer Hamiltonscher Systeme

Bearbeiter: Ch. Schütte, S. Reich

Kooperation: J. Manz (FU Berlin, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie), B.R. Brooks (National Institute of Health, Bethesda/USA)

Beschreibung der Forschungsarbeit: In vielen physikalischen, (bio)chemischen und medizinischen Anwendungen besteht zentrales Interesse an der Simulation der Dynamik von Molekülen. Die Modellierung der Moleküle erfolgt dabei typischerweise durch Hamiltonische Systeme, insbesondere durch die klassisch-mechanische Hamiltonischen Bewegungsgleichungen und durch die zeitabhängige Schrödingergleichung. Eine wesentliche Eigenschaft der Lösungen dieser Grundgleichungen ist ihr hochoszillatorischer Charakter. Diese Eigenschaft bewirkt aber einen sehr hohen Rechenaufwand bei Simulationsrechnungen, weil die Auflösung der schnellen Zeitskalen der Oszillationen sehr kleine Zeitschrittweiten erfordert. Allerdings ist man typischerweise gar nicht an der Auflösung der schnellsten Oszillationen interessiert, da sie nur "kleine Ablenkungen" um den physikalisch wesentlichen Zeitverlauf darstellen. In diesem Fall sollten Simulationsalgorithmen *glätten*, d.h. nur den auf den schnellen Zeitskalen gemittelten Lösungsverlauf bestimmen. Für zwei typische Problemstellungen wurden solche "Glättungsalgorithmen" entwickelt:

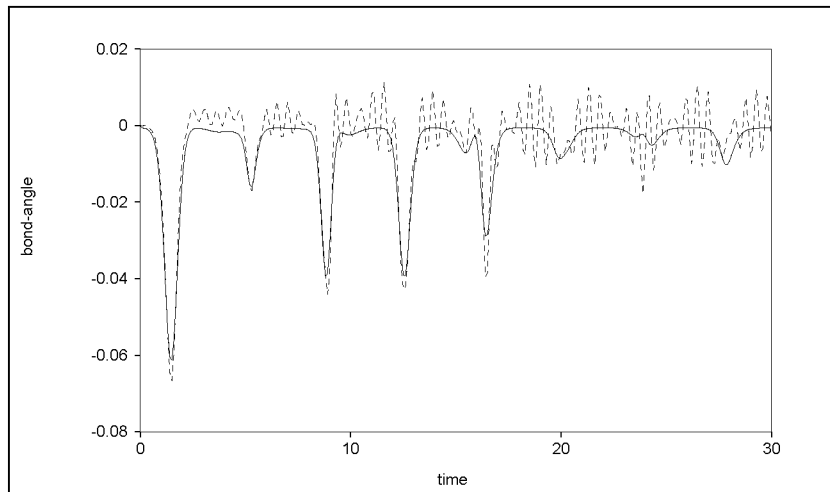
Die Anregungen der Schwingungsfreiheitsgrade eines Moleküls mittels ultrakurzer Laserpulse wird auf der Basis der zeitabhängigen Schrödingergleichung modelliert. Im vergangenen Berichtsjahr wurde ein Algorithmus zur "quasiresonanten Glättung" für diese Gleichungsklasse erstellt. In Verbindung mit einer adaptiven Steuerung stellte sich diese Methode als verlässlich und sehr effizient heraus [1]. Die Grundidee des Algorithmus und die der Steuerung lassen sich auf andere Gleichungsklassen übertragen, insbesondere auf im Molecular Modelling auftretende klassisch-mechanische Hamiltonischen Bewegungsgleichungen. Erste Ergebnisse werden in Kürze publiziert.

Die klassischen Bewegungsgleichungen für Makromoleküle enthalten Potentialterme, die sehr stark anwachsen, wenn das System die Gleichgewichtslage der entsprechenden Potentiale verläßt, was zu hochfrequenten Lösungsanteilen führt. Um den damit verbundenen Rechenaufwand zu senken, werden die starken Potentiale häufig durch holonome Zwangsbedingungen ersetzt, die die Lösungen zwingen, in der Gleichgewichtslage des entsprechenden Potentials zu verbleiben. Diese Vorgehensweise führt jedoch häufig auf eine zu starke Versteifung des Moleküls.

Aus diesem Grunde wurde von uns eine neue Klasse von holonomen Nebenbedingungen abgeleitet, die die hochfrequenten Lösungsanteile eliminieren, aber gleichzeitig die Flexibilität des Moleküles erhalten [2]. Der neue Algorithmus wird gegenwärtig von B.R. Brooks innerhalb des Programmpackets CHARMM getestet.

Literatur

1. Ch. Schütte: *A Quasiresonant Smoothing Algorithm for Solving Large Highly Oscillatory Differential Equations from Quantum Chemistry*. Berichte aus der Mathematik, Verlag Shaker, Aachen (1994). Dissertation an der Freien Universität Berlin (1994)
2. S. Reich. *Smoothed Dynamics of Highly Oscillatory Hamiltonian Systems*. Submitted to *Physica D* (1994)



Trajektorie eines Bondwinkels für die Bewegung eines Wassermoleküles ohne Nebenbedingungen (gepunktete Linie) und für die Bewegung mit flexiblen holonomen Zwangsbedingungen in den Bondstreckungen und Bondwinkeln.

Optimierung ultrakurzer Laser-Pulse zur Stimulanz definierter Übergänge in Molekülen

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

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

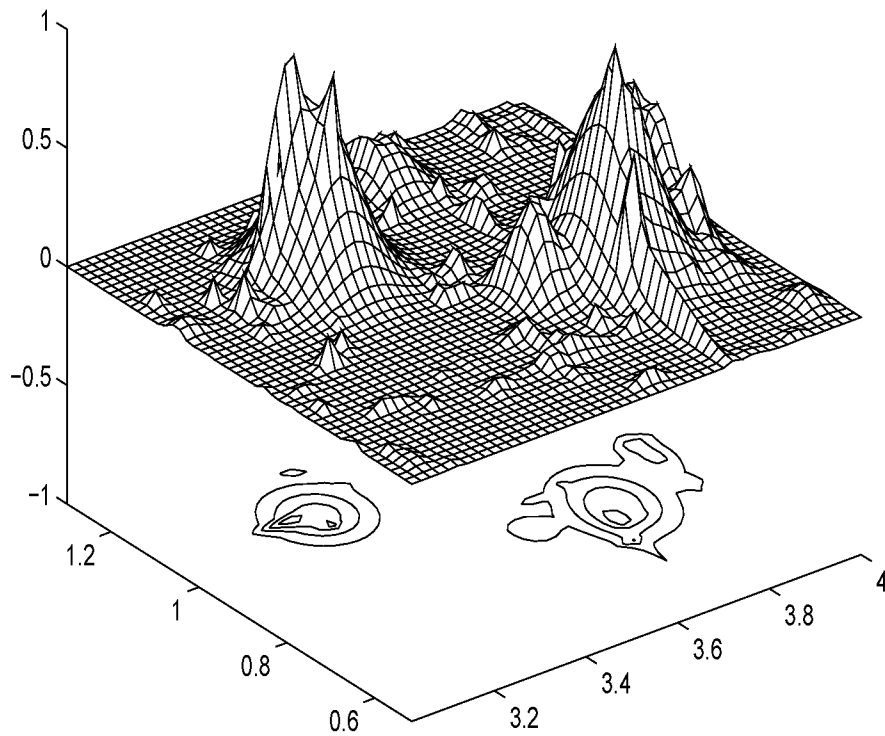
Beschreibung der Forschungsarbeit: Unter dem Namen “Femtochemie” werden Techniken entwickelt, die es erlauben, chemische Reaktionen auf molekularer Ebene zu kontrollieren. Man benutzt ultrakurze Laserpulse, um die Ausbeute von Reaktionen zu optimieren bzw. sonst nicht stattfindende Reaktionen gezielt zu induzieren. Die theoretische Beschreibung der Wechselwirkung zwischen Laser und Molekül muß hier im Rahmen der Quantenmechanik erfolgen, d.h. man formuliert eine Populationsdynamik auf Basis der zeitabhängigen Schrödingergleichung. Im vergangenen Berichtsjahr war eine effiziente Methode zur Simulation dieser Besetzungsdynamik vorgestellt worden. In der Fortführung des Projektes beschäftigen wir uns mit der Aufgabe, leistungsfähige Algorithmen zur Bestimmung der für die gewünschte Reaktion “optimalen” Laser-Parameter zu entwerfen. Hierbei ist eine “Populationsfunktion” Φ zu optimieren, welche über die Lösungen der Schrödingergleichung den Laser-Parametern die Besetzungswahrscheinlichkeiten der diskreten Zustände am Ende des Laserpulses zuordnet. Dieses Optimierungsproblem hat im wesentlichen drei Charakteristika:

- Jede Auswertung von Φ ist sehr rechenaufwendig, da sie eine Integration der zeitabhängigen Schrödingergleichung für gegebene Laserparameter bedeutet.
- Φ ist extrem vielgestaltig, vor allem in der Umgebung des Hauptmaximums.
- Für nichttriviale Anwendungen existiert zur Zeit keine Methode, a priori einen ”guten” Startwert für die Optimierung anzugeben (Startwertproblem).

Die beiden letztgenannten Anforderungen an den Optimierungsalgorithmus lassen die klassischen Verfahren, wie z.B. Newton-, Levenberg-Marquardt- oder Penalty-Verfahren, ausscheiden. Monte-Carlo-Methoden (beispielsweise Simulated Annealing) erwiesen sich als prinzipiell brauchbar, aber aufgrund der von ihnen geforderten hohen Anzahl von Funktionsauswertungen als ineffizient. Die Nutzung vereinfachter Modelle (z.B. auf Basis des Floquet-Theorems) zur analytischen Vorbehandlung des Startwertproblems führte zu keinem zufriedenstellenden Ergebnis, zumal die betrachtete Molekülklasse grundlegende Voraussetzungen nicht erfüllt. Aus diesen Gründen sind physikalisch motivierte Homotopien am erfolgversprechendsten, zugleich müssen sie jedoch auch den oben genannten

Anforderungen entsprechen. So führt eine Einbettung in die Ausdünnung der Wechselwirkungs-Matrix zu einem schlecht zu lösenden Startproblem, eine Diffusionseinbettung zu einem zu hohen Aufwand bei der Berechnung der zweiten Ableitungen.

Im Zentrum des Projektes steht somit weiterhin die Erarbeitung physikalisch begründeter Einbettungen, die zu "gutartigen" Startwertproblemen führen, deren Verfolgung geringen Aufwand verursacht, und die daher gegenüber Monte-Carlo-artigen oder Gitter-Suchverfahren eine deutliche Aufwandsreduktion erlauben.



Beispielhafte Populationsfunktion und deren Höhenlinien.

Literatur

1. C. Schütte: *A Quasiresonant Smoothing Algorithm for Solving Large Highly Oscillatory Differential Equations from Quantum Chemistry*. Shaker Verlag, Aachen (1994)

Unterteilungsalgorithmen zur Berechnung instabiler Mannigfaltigkeiten und globaler Attraktoren

Bearbeiter: A. Hohmann (ab 1.10.94 University of Houston/USA)

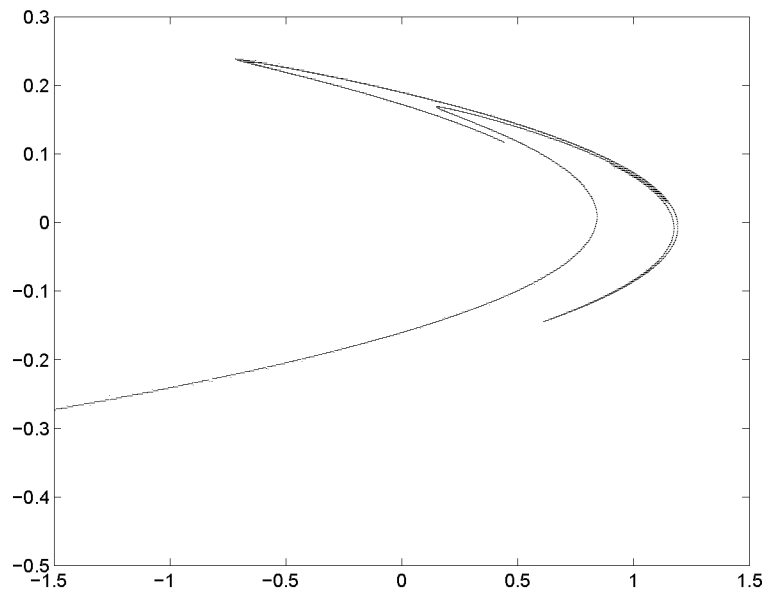
Kooperation: M. Dellnitz (Universität Hamburg, z.Zt. University of Houston/USA)

Förderung: Das Projekt wurde innerhalb des DFG–Schwerpunktes “Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme” gefördert.

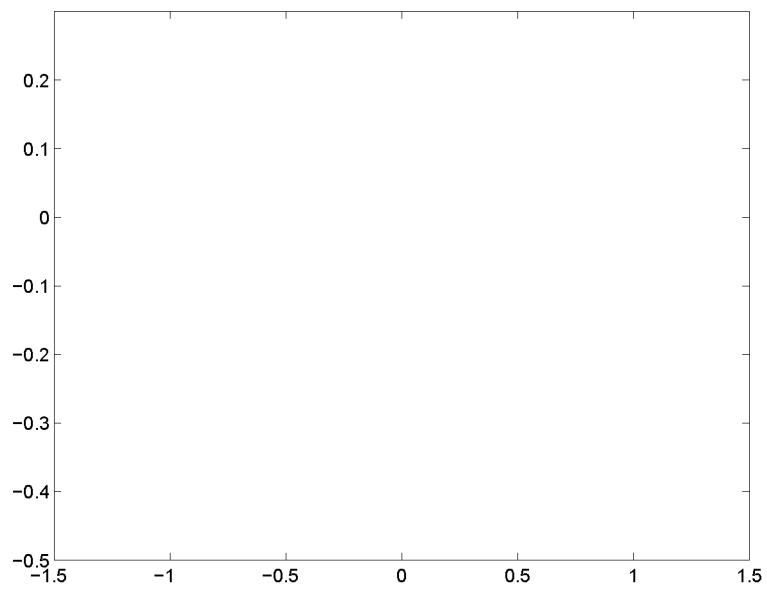
Beschreibung der Forschungsarbeit: Aus der Theorie Dynamischer Systeme ist wohlbekannt, daß die Lokalisierung und die Komplexität des dynamischen Verhaltens eng mit der Struktur und der Interaktion invarianter Mannigfaltigkeiten verbunden ist. So ist etwa in der Nähe von Schnittpunkten stabiler und instabiler Mannigfaltigkeiten eine komplexe Dynamik (“chaotisches Verhalten”) anzutreffen. Ferner kann in vielen Fällen gezeigt werden, daß das beobachtbare dynamische Verhalten im Abschluß der Vereinigung aller instabilen Mannigfaltigkeiten enthalten sein muß. Diese Ergebnisse verdeutlichen, daß der *globale Attraktor* — eine Menge, die im wesentlichen aus der Vereinigung aller instabilen Mannigfaltigkeiten besteht — vom dynamischen Gesichtspunkt her von besonderem Interesse ist.

Im vorliegenden Projekt werden numerische Methoden entwickelt, die es ermöglichen, beliebige Teilmengen des globalen Attraktors zu approximieren. Bemerkenswert ist hierbei, daß es aufgrund des konzeptionellen Aufbaus der Verfahren möglich ist, Fehlerabschätzungen für die berechnete Approximation in der Hausdorff-Metrik anzugeben. Insbesondere können auch höherdimensionale instabile Mannigfaltigkeiten mit einer vorgegebenen Fehlerschranke berechnet werden.

Zur Illustration ein niedrigdimensionales Beispiel: in Abbildung 1 zeigen wir eine Überdeckung eines Teils des globalen Attraktors der Henon-Abbildung $f : \mathbf{R}^2 \rightarrow \mathbf{R}^2$, $f(x, y) = (1 - 1.2x^2 + y, 0.2x)$. Der Hausdorff-Abstand zum globalen Attraktor ist geringer als 10^{-3} . Die durch direkte Simulation ermittelte Dynamik (siehe Abbildung 2) ist eine Teilmenge des globalen Attraktors.



Teilmenge des *globalen* Attraktors der Henon-Abbildung



Der durch direkte Simulation ermittelte Henon-Attraktor

Musterbildung in Reaktions–Diffusions–Gleichungen

Bearbeiter: A. Hohmann (ab 1.10.94 University of Houston/USA)

Kooperation: M. Dellnitz (Universität Hamburg, z.Zt. University of Houston/USA), M. Golubitsky (University of Houston/USA), I. Stewart (University of Warwick/USA)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Spiralförmige Muster gehören zu den häufig zu beobachtenden Phänomenen in chemischen Experimenten, wie zum Beispiel der Belousov–Zhabotinskii–Reaktion. Die bisherigen mathematischen Modelle basieren auf *Systemen* von Reaktions–Diffusions–Gleichungen. Hier wurde erstmalig eine *skalare* Modellgleichung aufgestellt, wobei eine Reaktions–Diffusions–Gleichung auf der Kreisscheibe mit einer “spiralförmigen” Randbedingung gekoppelt wird (nicht selbst–adjungierter Operator!). Das so definierte Problem ist $SO(2)$ –symmetrisch, so daß an Hopf–Punkten rotierende Wellen abzweigen. Die Modellgleichung wurde mit einer Kombination von äquivarianter Verzweigungstheorie und numerischer Simulation studiert, insbesondere die Stabilität der rotierenden Wellen in Abhängigkeit eines Kontrollparameters berechnet.



Spiralförmige rotierende Lösung der Modellgleichung

Literatur

1. M. Dellnitz, M. Golubitsky, A. Hohmann, I. Stewart: *Spirals in Scalar Reaction–Diffusion Equations*. Research Report UH/MD–192 University of Houston/USA

Symmetrie dynamischer Systeme

Bearbeiter: K. Gatermann

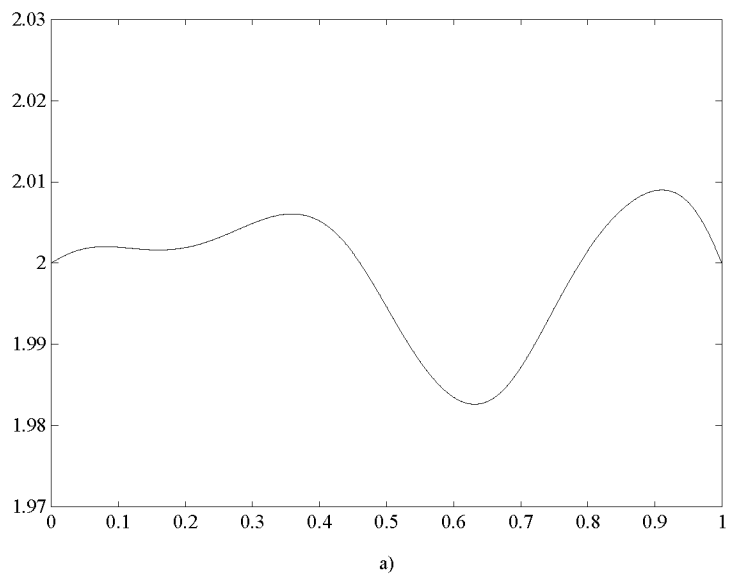
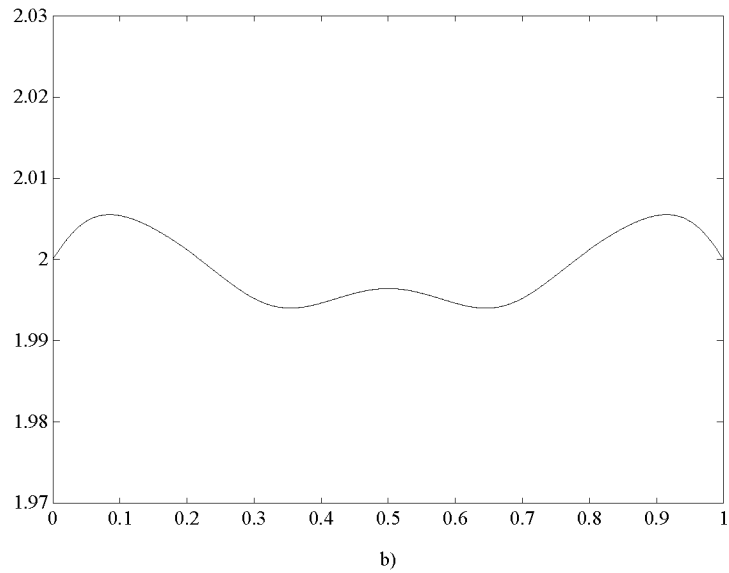
Kooperation: M. Dellnitz (Institut für Angewandte Mathematik der Universität Hamburg, z.Z. Department of Mathematics, University of Houston/USA)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Oftmals besitzen dynamische Systeme Symmetrien, die in der Regel durch spezifische Strukturen der zugrundeliegenden Modelle hervorgerufen sind. Aufgrund dieser Symmetrien können auch dynamische Grenzzustände (Attraktoren) nichttriviale Symmetrieeigenschaften besitzen. Für statische und periodische Zustände ist dies seit langem bekannt. In den letzten Jahren wurden jedoch auch für kompliziertere Grenzzustände — etwa für chaotische Attraktoren — zahlreiche Untersuchungen zu deren Symmetriotyp durchgeführt. Ein Charakteristikum ist hierbei, daß sich die Symmetrie lediglich im zeitlichen Mittel manifestiert. Bei diesen theoretischen Untersuchungen wurde unter anderem gezeigt, daß es sowohl in Bezug auf die Symmetriotypen einzelner Attraktoren als auch in Bezug auf die durch Kollisionen von Attraktoren bedingten Symmetrieübergänge Restriktionen gibt.

Im vorliegenden Projekt wurden unter Einbeziehung von algebraischen Methoden numerische Verfahren entwickelt, die es erlauben, effizient den Symmetriotyp von Attraktoren zu detektieren. Ferner können mit Hilfe dieser Verfahren Näherungswerte für Parameterwerte ermittelt werden, für die Kollisionen von Attraktoren stattfinden. Die entwickelten Methoden wurden sowohl in gewöhnlichen als auch in partiellen Differentialgleichungen eingesetzt; sie können prinzipiell jedoch auch direkt in physikalischen Experimenten Anwendung finden.

Literatur

1. K. Gatermann: *A remark on the detection of symmetry of attractors*. In: P. Chossat (Ed.), *Dynamics, Bifurcation and Symmetry, New Trends and New Tools*, S. 123, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (1994)
2. M. Dellnitz, M. Golubitsky, M. Nicol: *Symmetry of attractors and the Karhunen-Loève decomposition*. In *Trends and Perspectives in Applied Mathematics* (L. Sirovich, Hrg.). *Applied Mathematical Sciences* **100**, 73–108, Springer (1994)



Der zeitliche Mittelwert $F(x) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T u(x, t) dt$ detektiert für den Brusselator ($x \in [0, 1]$ und $t \geq 0$ mit symmetrischen Randbedingungen $u(0, t) = u(1, t) = 2$) die Symmetrie der Lösung $u(x, t)$. Im Bild sieht man ein symmetrisches und ein unsymmetrisches $F(x)$ für zwei verschiedene Lösungen zugehörig zu zwei verschiedenen Parameterwerten.

Dünnbesetzte Gleichungssysteme

Bearbeiter: K. Gatermann

Kooperation: J. Verschelde (Katholieke Universiteit Leuven, Niederlande)

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

Huber, Sturmfels haben eine problemangepaßte Homotopie vorgeschlagen, die von der Analyse der Newton Polytope bestimmt wird. Dieser Ansatz beinhaltet sowohl diskret-algebraische als auch numerische Rechnungen. Dieses Verfahren wurde auf seine Eigenschaften bzgl. Symmetrie untersucht und durch die Symmetrienausnutzung seine Effizienz gesteigert [1].

Die Hauptarbeit in diesem Algorithmus liegt in der Bestimmung der gemischten Unterteilung. Durch ein dynamisches Vorgehen (sukzessives Liften der Momome mit einer konservativen Liftingfunktion) konnte ein effizienter Zugang beschritten werden, der im Fall unterschiedlicher Monome in den Polynomen neu ist. Im Fall gleicher Monome liefert die konservative Liftingfunktion eine systematische Erklärung bestehender Ansätze. Als Beispiele wurden Probleme aus der Robotik und den Ingenieurwissenschaften gerechnet.

Literatur

1. J. Verschelde, K. Gatermann: *Symmetric Newton Polytopes for Solving Sparse Polynomial Systems*. Preprint SC 94-3, Konrad-Zuse-Zentrum (1994)
Erscheint in *Advances in Applied Mathematics* 1995.

Mehrparametrische Gleichungssysteme

Bearbeiter: K. Gatermann

Kooperation: R. Lauterbach (WIAS Berlin)

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

Kompliziertere Phänomene können mit Hilfe der Singularitätentheorie (Golubitsky, Stewart, Schaeffer) untersucht werden. In der Literatur wurden allerdings damit erst wenige Beispiele und Gruppen analysiert, da umfangreiche algebraische Rechnungen erforderlich sind. Mit Hilfe der Computer Algebra wird hier ein systematischer Zugang möglich. Das Ziel ist dabei nicht, Probleme höherer Kodimension zu betrachten, sondern ein Konzept zu entwickeln, das unabhängig von der Gruppe ist. Es wird in neuen Koordinaten, den sogenannten fundamentalen Invarianten und fundamentalen Equivarianten gerechnet. Die erste Aufgabe bestand also darin, die Idee der Berechnung der fundamentalen Invarianten nach Sturmfels auf die Berechnung der fundamentalen Equivarianten zu übertragen, was in einer Veröffentlichung dokumentiert wurde, siehe [1]. Die Klassifikation von Normalformen basiert auf Gröbner Basen bzgl. induzierter gewichteter Ordnungen. Terme höherer Ordnung werden mit besonderen Kriterien eliminiert. Die Theorien wurden vollständig in REDUCE implementiert und funktionieren für beliebige Gruppen. Die Resultate dieser Arbeit werden in einem Preprint 1995 erscheinen. Als Nebeneffekt dieses Projektes ergaben sich Verallgemeinerungen des Gröbner-Paketes in REDUCE für gradierte Gröbner Basen und Gröbner Basen für Modulen [REDUCE: Gröbner Paket].

Literatur

1. K. Gatermann: *Semi-invariants, equivariants and algorithms*. Preprint SC 94-11, Konrad-Zuse-Zentrum (1994) Erscheint in AAEECC.

D_3 -äquivalente Verzweigungsprobleme: Lösungen in $\text{Fix}(Z_2)$ wurden x_1 über dem Verzweigungsparameter λ geplottet, wobei nicht-konjugierte Lösungen weggelassen wurden.

Nichtkommutative Operatorenalgebren

Bearbeiter: H. Melenk, W. Koepf

Kooperation: J. Apel (Universität Leipzig)

Beschreibung der Forschungsarbeit: In den Projekten “Algorithmische Methoden für orthogonale Polynome” und “Unendliche Reihen in der Computeralgebra” treten als wesentliche Objekte holonome Differential- und Rekursionsgleichungen, d.h. homogene lineare Gleichungen mit Polynomkoeffizienten auf. Diese lassen sich in Operatornotation als Elemente eines nichtkommutativen Polynomrings auffassen [1], bei dem die Vertauschungsregeln explizit durch Lie-Klammern angegeben werden.

Im vorliegenden Forschungsprojekt werden auf der Basis des Computeralgebra-Systems REDUCE erarbeitet:

- ein Environment, das eine Algebra mit nichtkommutativer Multiplikation bereitstellt und die Vertauschungsregeln automatisch in Steuerstrukturen für die Polynomarithmetik umsetzt,
- ein Satz von Methoden zum Errechnen kanonischer Formen, insbesondere Gröbnerbasen beliebiger Termordnung,
- Algorithmen zum Zerlegen und Umformen nichtkommutativer Polynome wie Faktorisierung, Umordnung, Zusammenfassung von Termen.

Diese stellen eine (in sich geschlossene) Erweiterung [2] des im ZIB erstellten Gröbnerpaketes dar.

In bezug auf holonome Differential- und Rekursionsgleichungen lassen sich folgende Typen von Fragen mit dem Paket [2] behandeln:

- Ist für f eine Differential/Rekursionsgleichung gegeben, gilt bereits eine Differential/Rekursionsgleichung kleinerer Ordnung? Falls ja, ist eine Lösung sehr viel leichter zu finden.
- Ist ein System gemischter (partieller) Differential-Rekursionsgleichungen gegeben, so lassen sich weitere Differential-Rekursionsgleichungen herleiten, insbesondere gewöhnliche Differentialgleichungen und reine Rekursionen.
- Sind für $f_n(x)$ eine Differentialgleichung bzgl. x und eine Rekursionsgleichung bzgl. n gegeben, gilt dann auch eine Ableitungsregel?

Beispiel (Legendre-Polynome $P_n(x)$):

Algebra: Linksideal mit $[N, n] = N$, $[D, x] = 1$.
Differentialgleichung: $p_1 = (x^2 - 1) D^2 + 2x D - n(1 + n)$
Rekursionsgleichung: $p_2 = (n + 2) N^2 - (3 + 2n) x N + (n + 1)$

lexikographische
Gröbnerbasis von $\{p_1, p_2\}$
über $\{D, N, n, x\}$:

$$\left(\begin{array}{l} D^2 x^2 - D^2 - 2 D x - n^2 - n \\ D N n - D n x - D x - n^2 - n \\ D N x^2 - D N - N n x - 2 N x + n + 1 \\ D n x^2 - D n + D x^2 - D - N n^2 + n^2 x - x \\ N^2 n - 2 N n x - N x + n + 1 \end{array} \right)$$

Das Interessante hierbei ist, daß die Gröbnerbasis zwei Polynome enthält, die den beiden Beziehungen

$$(x^2 - 1)P'_{n+1}(x) = (1 + n)(xP_{n+1}(x) - P_n(x))$$

sowie

$$(x^2 - 1)P'_n(x) = (1 + n)(P_{n+1}(x) - xP_n(x)) ,$$

also Ableitungsregeln, entsprechen.

Literatur

1. W. Koepf: *Algebraische Darstellung transzendenter Funktionen*. Preprint SC 94-24, Konrad-Zuse-Zentrum (1994)
2. H. Melenk, J. Apel: *NCPOLY: Computation in non-commutative polynomial ideals*. REDUCE Network Library (1994)

Unendliche Reihen in der Computeralgebra

Bearbeiter: W. Koepf, W. Neun, G. Stöling

Beschreibung der Forschungsarbeit: Unendliche Laurent–Puiseux-Reihen spielen eine wesentliche Rolle in Analysis, Kombinatorik und Physik. Nun können zwar Computeralgebrasysteme wie MACSYMA, MAPLE, MATHEMATICA oder REDUCE Laurent– und Puiseuxpolynome für gegebene Funktionen berechnen, welche aber als abgebrochene Reihen nicht mehr die volle Information tragen. Mit dem in [1] vorgestellten Algorithmus kann in vielen Fällen die darstellende symbolische Reihe angegeben werden. Ein Großteil der Reihenentwicklungen, die man in mathematischen Sammelwerken findet, kann mit dieser Methode algorithmisch hergeleitet werden. Im Berichtszeitraum erschien eine Veröffentlichung zu der MATHEMATICA–Implementierung [1] und eine REDUCE–Implementierung wurde fertiggestellt [5]. In den letzten Jahren wurde durch die Entwicklung algorithmischer Verfahren ein Durchbruch bei der Verifikation hypergeometrischer und insbesondere kombinatorischer Identitäten erzielt [2]. Wir haben Implementierungen der Entscheidungsalgorithmen von Gosper zur unbestimmten Summation, von Zeilberger zur unendlichen Summation in MAPLE und REDUCE vorgenommen [3]–[4], mit denen sich diese Verifikationen vornehmen lassen. Die Implementierungen ermöglichen es u.a., unbestimmte sowie unendliche Summen dann exakt zu bestimmen, wenn sie hypergeometrische Terme sind, und dies ist erstaunlich oft der Fall [4].

Literatur

1. W. Koepf: *A package on formal power series*. *Mathematica Journal* 4, 62–69, (1994)
2. W. Koepf: *Algebraische Darstellung transzendenter Funktionen*. Preprint SC 94–24, ZIB 1994
3. W. Koepf: *REDUCE package for indefinite and definite summation*. Technical Report TR 94–9, ZIB 1994.
4. W. Koepf: *Algorithms for the indefinite and definite summation*. Preprint SC 94–33, ZIB 1994.
5. W. Koepf, W. Neun: *REDUCE package FPS: A package for the automatic calculation of formal power series*. ZIB (1994)

Algorithmische Methoden für orthogonale Polynome

Bearbeiter: W. Koepf, P. Deuffhard, W. Neun

Kooperation: D. Schmersau (FU Berlin)

Beschreibung der Forschungsarbeit: In diesem Forschungsprojekt werden algorithmisch orientierte Verfahren zur symbolischen Behandlung spezieller Funktionen, insbesondere orthogonaler Polynomsysteme, entwickelt und implementiert.

Anstatt, wie in der theoretisch orientierten Lehrbuchliteratur üblich, die Rodriguesformel zum Ausgangspunkt zu nehmen, welche ohnehin nur die klassischen orthogonalen Polynomsysteme erfassen kann, bieten sich als algorithmisch orientierte Basis die Ableitungsregel (Differenzenregel) sowie die Rekursionsgleichung an. Es wurden Verfahren entwickelt zur algorithmischen Bestimmung von Differentialgleichungen und Rekursionsgleichungen sowie zur algorithmischen Verifikation von Identitäten für Funktionen, die sich durch Summen, Produkte sowie der Komposition mit algebraischen Funktionen mit Hilfe solcher Funktionen darstellen lassen, welche sich dem angegebenen Kalkül unterordnen lassen. Große Teile symbolischer Formelsammlungen lassen sich auf diese Weise algorithmisch verifizieren [2]–[5]. Diese Verfahren werden weiterentwickelt und implementiert [1], [6]–[7].

Literatur

1. W. Koepf: *A package on formal power series*. *Mathematica Journal* 4, 62–69, (1994)
2. W. Koepf, D. Schmersau: *Spaces of functions satisfying simple differential equations*. Technical Report TR 94–2, ZIB (1994)
3. W. Koepf: *Algorithmic work with orthogonal polynomials and special functions*. Preprint SC 94-5 ZIB (1994)
4. W. Koepf: *On families of iterated derivatives*. *SIGSAM Bulletin* 28, 10–26 (1994)
5. W. Koepf: *Algebraische Darstellung transzendenter Funktionen*. Preprint SC 94-24, ZIB (1994)
6. W. Koepf: *REDUCE package for indefinite and definite summation*. Technical Report TR 94-9, ZIB (1994)
7. W. Koepf: *Algorithms for the indefinite and definite summation*. Preprint SC 94-33, ZIB (1994)

Weiterentwicklung von REDUCE

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

Kooperation: A. C. Hearn (Leitung des Projekts, RAND, Santa Monica, Californien/USA), S. L. Kameny (RAND/USA), J.H. Davenport, J.P.F. Fitch (Bath/England), A.C. Norman (Cambridge/England), E. Schrüfer (GMD, Bonn) 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 anwendbar primär in Ingenieur- und Naturwissenschaften mit Schwerpunkt bei qualitativ hochwertigen Algorithmen für schwierige und umfangreiche Anwendungsfälle. Eine der an der Entwicklung von REDUCE beteiligten Gruppen ist die Abt. Symbolik des ZIB. Neben regelmäßigen persönlichen Kontakten der Entwickler bei Besuchen und Tagungen wird die Kommunikation in diesem Projekt primär über electronic Mail abgewickelt (gemeinsame Quelldatenbank mit wöchentlichem weltweiten Update). Die inhaltlichen Beiträge des ZIB zur Weiterentwicklung des Systems aus den Bereichen algebraische Gleichungssysteme, Reihenentwicklung, Summation und spezielle Funktionen werden in den Berichten zu den Einzelprojekten sowie in der Produktliste beschrieben. Daneben wurden im algebraischen Kern des Systems erhebliche Erweiterungen des Regelparadigmas zur direkten Unterstützung axiomatisch basierter Wissensbereiche vorgenommen. Für die definite Integration wurde ein Verfahren implementiert, das auf der Darstellung des Integranden als Produkt von Meijer's G Funktionen beruht, was für eine große Klasse von Ausdrücken möglich ist, z.B.

$$\int_0^{\infty} x^{-1} e^{-x} \sin(x) dx = \frac{\pi}{4}$$

Außerdem wurde mit der Entwicklung eines Paketes zur Differentiation von Algorithmen im Zusammenhang mit gemischt numerisch-symbolischen Methoden begonnen. Aus der Weitergabe von REDUCE wurden DM 145.000 im Berichtsjahr eingenommen. Einen nicht unerheblichen Anteil daran hat die auf Betreiben des ZIB eingerichtete Einstiegsversion, die bei einem Preis von 99 \$ auch Privatpersonen und Interessenten aus devisenschwachen Ländern einen Zugang ermöglicht. Für einige Regionen, z.B. die Volksrepublik China, wurden noch weitergehende Konditionen entwickelt.

Literatur

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

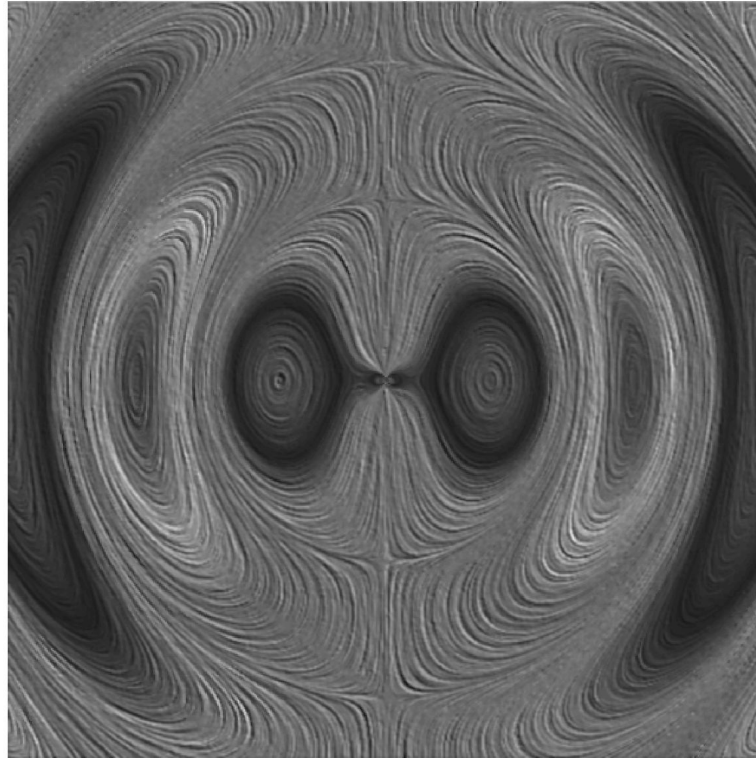
Visualisierung zweidimensionaler Vektorfelder

Bearbeiter: D. Stalling, H.C. Hege

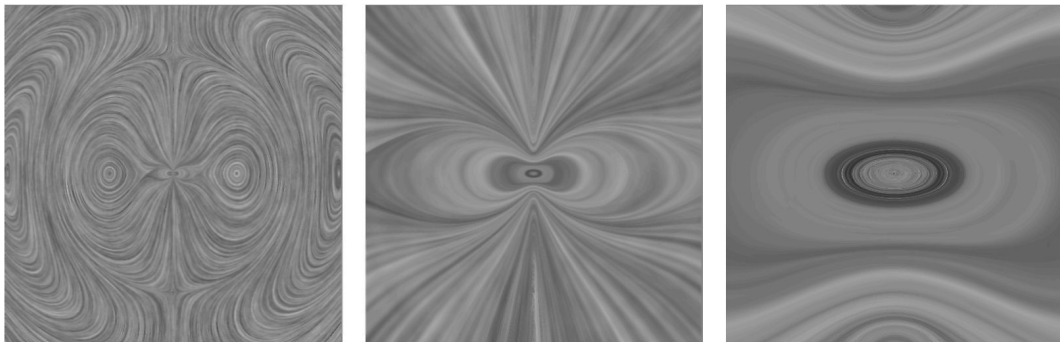
Beschreibung der Forschungsarbeit: Mit Hilfe der Linienintegral-Faltungsmethode (LIC) können räumlich hoch aufgelöste, aussagekräftige Darstellungen zweidimensionaler Vektorfelder erzeugt werden. Das Verfahren basiert auf der Faltung einer vorgegebenen Zufallstextur mit einem geeigneten Filterkern entlang von Stromlinienssegmenten, die lokal für jeden Bildpunkt zu berechnen sind. Ein schwerwiegender Nachteil lag bislang in dem relativ hohen Rechenaufwand, der zur Erzeugung derartiger Bilder notwendig war. Im Berichtszeitraum wurde ein Algorithmus entwickelt, der den Rechenaufwand im Vergleich zu herkömmlichen Implementierungen um eine Größenordnung reduziert. Der neue Algorithmus nutzt aus, daß eine einmal berechnete Stromlinie bei Verwendung eines Box-Filters zur Ermittlung der Grauwertbeiträge für viele überdeckte Bildpunkte herangezogen werden kann. Durch weitere Maßnahmen konnte erreicht werden, daß die Verwendung von Box-Filtern keine Einschränkung bedeutet. Mit dem Verfahren sind verschiedene Optimierungsmöglichkeiten verbunden. Beispielsweise sind die Startpunkte für die Stromlinienberechnung so zu wählen, daß möglichst viele noch nicht von anderen Stromlinien überdeckte Bildpunkte erreicht werden. Für die Stromlinienberechnung selbst wurden verschiedene numerische Integratoren verwendet. In der Praxis, wo häufig unstetige oder nicht-differenzierbare Vektorfelder auftreten, beispielsweise, weil das Feld nur an endlich vielen Stützstellen gegeben ist und dazwischen linear interpoliert werden muß, haben sich moderne Runge-Kutta-Verfahren mit Fehlerkontrolle und adaptiver Schrittweitensteuerung als robust und zuverlässig erwiesen. Ein weiteres Merkmal der neu entwickelten Linienintegral-Faltungsmethode besteht darin, daß die Pixelgrößen der Zufallstextur und des Ergebnisbildes völlig unabhängig voneinander gewählt werden können. Dies erlaubt es, LIC-Bilder in verschiedenen Auflösungen zu berechnen, die an das jeweils verwendete Ausgabemedium angepaßt sind. Weiterhin können stufenlose Zooms und Detailvergrößerungen vorgenommen werden, eine Möglichkeit, die besonders im Animationsbereich von Interesse ist. Ein Verfahren, um neben der reinen Tangentialinformation auch Orientierung und Betrag des Vektorfeldes visuell zu kodieren, besteht darin, die entstehende Textur in geeigneter Weise zu animieren. Auch hier konnten Fortschritte erzielt werden, die mit Hilfe einer einfachen Überblendungstechnik bei gleichzeitiger Kontrastanpassung die Generierung periodischer, optisch ansprechender Sequenzen erlauben.

Literatur

1. D. Stalling, H.C. Hege: *Fast and Resolution-Independent Line Integral Convolution*, ZIB Preprint SC 94-37 (1994)



Elektrische Feldverteilung für einen Hertzschen Dipol (in Fernnäherung), dargestellt mit der Linienintegral-Faltungsmethode und anschließender Relief-Filterung.



Detailvergrößerungen desselben Datensatzes wie oben. Das Bild ganz rechts enthält nur noch wenige Stützpunkte des Vektorfeldes.

DoPlex — ein verteilter, objekt-orientierter Simplex-Algorithmus

Bearbeiter: R. Wunderling

Kooperation: CRAY Research Inc., Eagan/USA

Förderung: Dieses Projekt wurde von der CRAY Research Inc. gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Berichtszeitraum wurde mit DoPlex ein simplex-basierter Löser für Lineare Programme entwickelt und zunächst als Single-Node-Version auf den Parallelrechner Cray T3D portiert. Damit wurde die Grundlage für die Entwicklung paralleler Branch&Cut-Verfahren auf diesem Rechner geschaffen. Der Softwareentwurf folgt objekt-orientierten Grundsätzen und bietet Schnittstellen zur Erweiterung, wie z.B. die Einführung neuer Pricing-Strategien, oder zur Modifikation, wie z.B. der Definition anderer Terminationskriterien.

Die Implementierung erfolgte in C++, wobei besonderes Augenmerk auf numerische Stabilität und Effizienz gelegt wurde. Derzeit bietet DoPlex sowohl einen primalen als auch dualen Simplex-Algorithmus, jeweils für zeilen- und spaltenweise Darstellung der Basis. Alle LP-Beispiele aus der NetLib werden problemlos gelöst.

DoPlex bietet eine umfangreiche Schnittstelle zur Manipulation des zu lösenden LPs. Damit genügt es allen Anforderungen, die sich in Schmittebenen- und Branch&Cut-Verfahren ergeben.

Der objekt-orientierte Softwareentwurf ist für die nun durchzuführende Parallelisierung ausgelegt. Diese wird auf zwei Ebenen erfolgen. Zum einen wird ein neues Verfahren des *block pivoting* entwickelt, bei dem mehrere sequentielle Simplex-Iterationsschritte zu einem komplexeren, parallelen Schritt verbunden werden (Parallelität mittlerer Granularität). Zum anderen werden parallele Algorithmen für die Lineare Algebra mit dünn besetzten Matrizen und Vektoren eingesetzt (Parallelität sehr feiner Granularität). Dazu wurde ein paralleler LU-Zerlegungsalgorithmus für sehr dünn und irregulär besetzte Matrizen entwickelt, der derzeit in Zusammenarbeit mit G. Skorobohatyj für den T3D optimiert wird.

Ganzzahlige und gemischt ganzzahlige Rucksackprobleme

Bearbeiter: A. Martin, M. Schaffers, R. Weismantel, G.M. Ziegler, M. Henk

Kooperation: L. Wolsey, Y. Pochet (CORE/Belgien)

Förderung: Das Projekt wurde durch Mittel der Europäischen Gemeinschaft (“Twining”) gefördert

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Rucksackproblem ist eines der grundlegenden Probleme, wobei Zahlen eine entscheidende Rolle spielen. Als Unterproblem tritt es bei vielen praktisch relevanten Fragestellungen auf, wie zum Beispiel in der Telekommunikation, dem Entwurf integrierter Schaltungen, bei der Festlegung von Routen sowie Planungsproblemen verschiedener Art. Die Forschungsaktivitäten im Rahmen dieses Projekts konzentrieren sich auf folgende Aspekte:

- Testmengen für spezielle Rucksackprobleme zu verstehen;
- die Polyeder solcher Rucksackprobleme zu verstehen, d.h. beweisen, daß ein System von Ungleichungen das Polyeder vollständig beschreibt;
- Resultate für Spezialfälle zu verallgemeinern.

In diesem Zusammenhang wurden folgende Rucksackprobleme untersucht:

- die Anzahl verschiedener Gewichte in der Ungleichung ist zwei [2];
- die Gewichte der Gegenstände liegen in bestimmten Intervallen [1];
- die Gewichte der Gegenstände sind teilbar [3].

Weitergehende Aktivitäten konzentrieren sich insbesondere auf die Untersuchung gemischt ganzzahliger Rucksackprobleme.

Literatur

- [1] R. Weismantel: *On the 0/1 knapsack polytope*. Konrad-Zuse-Zentrum, Preprint SC 94—1 (1994)
- [2] R. Weismantel: *Hilbert bases and the facets of special knapsack polytopes*. Konrad-Zuse-Zentrum, Preprint SC 94—19 (1994)
- [3] Y. Pochet, R. Weismantel: *The sequential knapsack polytope*. Konrad-Zuse-Zentrum, Preprint SC 94—30 (1994)

Gittermethoden für die ganzzahlige Programmierung

Bearbeiter: R. Thomas, R. Weismantel, G.M. Ziegler

Beschreibung der Forschungsarbeit: Ganzzahlige Optimierung kann geometrisch auf die Berechnung *kleiner* Basen eines Gitters oder die Konstruktion eines Erzeugendensystems (*Hilbert-Basis*) für die ganzzahligen Punkte in einem Kegel reduziert werden. Dafür gibt es (ziemlich neue) grundlegende Algorithmen, mit denen sich solche Probleme lösen lassen: einerseits Gitterreduktionsmethoden (nach Lenstra, Lenstra & Lovász — den *L^3 -Algorithmus* — bzw. Lovász & Scarf), andererseits Verfahren, die auf Gröbnerbasisreduktion basieren (dies wurde zuerst von Conti und Traverso vorgeschlagen, siehe auch Thomas [2], und Ziegler [4]).

Inzwischen wurden von W. Cook und anderen bei der Verwendung von Gitterreduktionsmethoden schon praktische Erfolge berichtet. Wir haben diese ausführlich studiert (siehe auch [3]); inzwischen halten wir jedoch Verfahren, die primär auf Gröbnerbasisreduktion basieren, für aussichtreicher. In Sturmfels, Weismantel & Ziegler [1] wurde untersucht, wie Gitterreduktion mit Gröbnerbasisverfahren simuliert werden kann. Solche und verwandte Techniken wurden in Urbaniak, Weismantel & Ziegler [3] zur Lösung ganzzahliger Optimierungsprobleme angewendet. Der in [3] beschriebene Algorithmus hat das Potential, ein wichtiges Hilfsmittel bei der Lösung kombinatorischer Optimierungsprobleme unterschiedlicher Art zu werden.

Literatur

- [1] B. Sturmfels, R. Weismantel und G.M. Ziegler: *Gröbner bases, lattices, corner polyhedra, and integer programming*. Konrad-Zuse-Zentrum, Preprint SC 94-26 (1994)
- [2] R.R. Thomas: *A geometric Buchberger algorithm for integer programming*. Preprint, Cornell University (1993)
- [3] R. Urbaniak, R. Weismantel, G.M. Ziegler: *A variant of the Buchberger Algorithm for Integer Programming*. Konrad-Zuse-Zentrum, Preprint SC 94-29 (1994)
- [4] G.M. Ziegler: *Zahlentheoretische Methoden der ganzzahligen Optimierung*. Vorlesung, TU Berlin, Sommersemester 1993.

Polyedrische Untersuchung kombinatorischer Optimierungsprobleme

Bearbeiter: N. Ascheuer, R. Borndörfer, M. Grötschel, A. Löbel, A. Martin, R. Weismantel

Kooperation: M. Fischetti (University of Padua/Italien), C. Ferreira (University of São Paulo/Brasilien), M. Laurent (ENS/Frankreich), L. Wolsey (CORE/Belgien)

Förderung: Das Projekt wurde durch Mittel der DFG und der Europäischen Gemeinschaft (“Twinning”) gefördert

Beschreibung der Forschungsarbeit: Ein vielversprechender Ansatz, um NP-schwere kombinatorische Optimierungsprobleme zu lösen, besteht in der Anwendung polyedrischer Methoden: man versucht das Polyeder, welches die konvexe Hülle aller Lösungen des gegebenen Problems ist, durch Gleichungen oder Ungleichungen zu beschreiben. Für spezielle Probleme, wie zum Beispiel das Rundreiseproblem, das Steinerbaumproblem oder das Stabile-Mengen-Problem in Graphen, wurde diese Methode bereits erfolgreich eingesetzt und führte zu der Lösung großer und schwieriger Beispiele. Spezielle Untersuchungen konzentrieren sich auf das Studium von Polyedern im Zusammenhang mit folgenden Problemen:

- dem Problem, einen maximalen Schnitt in einem Graphen zu finden [1]
- dem Problem, simultan mehrere Flüsse zu packen,
- dem Problem, Wege oder Steinerbäume in einem Graphen zu finden [2],
- dem Rundreiseproblem mit Zeit- und/oder Präzedenzrelationen,
- dem Problem, Mengen zu packen, zu überdecken oder zu partitionieren,
- Graphenpartitionierungsprobleme unter Nebenbedingungen [3].

Literatur

- [1] M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel: *Optimum Path Packing on Wheels: The Noncrossing Case*. Konrad-Zuse-Zentrum, Preprint SC 93-26 (1993)
- [2] C.E. Ferreira, A. Martin, C. de Souza, R. Weismantel, L. Wolsey: *Formulations and valid inequalities for the node capacitated graph partitioning problem*. Konrad-Zuse-Zentrum, Preprint SC 94-16 (1994)

Projection Pursuit Methoden

Bearbeiter: J. Polzehl

Kooperation: B. Grund (University of Minnesota, St. Paul/USA), P. Hall (Australian National University, Canberra/Australien), S. Klinke (Humboldt-Universität zu Berlin), S.N. Lahiri (Iowa State University, Ames/USA)

Förderung: Das Projekt wurde durch die Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung gefördert

Beschreibung der Forschungsarbeit: Der Begriff “Projection Pursuit” in der von Friedman and Tukey (1974) beschriebenen und algorithmisierten Form steht für eine Klasse explorativer Projektionsverfahren zur Aufdeckung von Strukturen in multivariaten Daten. Die wesentliche Idee liegt in der Beschreibung der Interessantheit uni- oder bivariater Projektionen mittels einer zu maximierenden Zielfunktion (Projection Pursuit Index). Projection Pursuit stellt eine der wenigen multivariaten Methoden da, die in der Lage sind den “curse of dimensionality” zu überwinden.

In Polzehl (1994) wird ein neuer, auf Projection Pursuit Ideen basierender Zugang zur nichtparametrischen Diskriminanzanalyse vorgeschlagen. In jedem Schritt des Verfahrens werden Projektionen gewählt, die Schätzungen des erwarteten Diskriminationsverlustes minimieren. Die Verfahren sind für den Fall von zwei Populationen implementiert.

Klinke & Polzehl (1994) enthält einen Überblick über bivariate explorative Projection Pursuit Indices, diskutiert deren Eigenschaften und gibt Details ihrer Implementation im Statistik-Paket Xplore.

Ein zentrales Problem nichtparametrischer Verfahren, einschließlich Projection Pursuit, ist die Wahl eines “optimalen” Glättungsparameters (Bandweite). Für Kerndichteschätzungen werden in B. Grund, J. Polzehl (1995) Bias-korrigierte Bootstrap Bandweitenselektoren vorgeschlagen, die sich durch optimale asymptotische Raten und akzeptables empirisches Verhalten auszeichnen.

P. Hall, S.N. Lahiri, J. Polzehl (1994) analysiert auf Block Bootstrap und “leave-k-out Cross-Validation” basierende Methoden der Bandweitenwahl in nichtparametrischen Regressionsproblemen mit kurz- und langzeitabhängigen Fehlern. Es wird gezeigt, daß beide Techniken für richtig gewählte Blocklängen und “leave-out” Anzahlen erster Ordnung optimale Bandweiten produzieren. Simulationsuntersuchungen zeigen wesentlich bessere empirische Eigenschaften von Block Bootstrap im Fall von Langzeitabhängigkeiten.

Literatur

- [1] B. Grund, J. Polzehl: *Bias-corrected bootstrap bandwidth selection*. Unpublished manuscript
- [2] P. Hall, S.N. Lahiri, J. Polzehl: *On bandwidth choice in nonparametric regression with both short- and long-range dependent errors*. Statistics Research Report No. SRR 017-94, Centre for Mathematics and its Applications, Australian National University (1994)
- [3] S. Klinke, J. Polzehl: *Exploratory projection pursuit*. In: *Xplore an interactive statistical computing environment* (W. Härdle, S. Klinke, B.A. Turlach, eds.), 1994, Springer-Verlag Berlin, to appear.
- [4] J. Polzehl: *Projection Pursuit Discriminant Analysis*. Discussion Paper 18, SFB 373, Humboldt-Universität zu Berlin, 1994, to appear in *Computational Statistics and Data Analysis*.

Modellwahl, Transformation und Varianzschätzung bei nichtlinearer Regression

Bearbeiter: J. Polzehl

Kooperation: O. Bunke, B. Droge (beide Humboldt–Universität zu Berlin)

Förderung: Das Projekt wurde durch die Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Untersuchungen und Verfahrensentwicklungen zur Wahl von nichtlinearen Regressionsmodellen haben ihren Ausgangspunkt in seit mehreren Jahren bestehenden Kooperationsbeziehungen zwischen dem Institut für Mathematik der HUB und dem INRA, Jouy-en-Josas, Frankreich. Zielstellung dieser Kooperation war es, an der HUB existierende Erfahrungen auf dem Gebiet der Modellwahl und der Regressionsanalyse und am INRA auftretenden Anwendungen derartiger Methoden bei Problemen aus der Landwirtschaft und Biotechnologie (insbesondere Pharmakokinetik) zusammenzuführen. Innerhalb dieses Projektes werden Strategien für eine datenabhängige Auswahl geeigneter nichtlinearer Regressionsmodelle unter Einbeziehung von Fragestellungen der Varianzmodellierung und von Modelltransformationen untersucht. Nichtlineare Regressionsmodelle werden auf vielen Gebieten bei der Analyse experimenteller Daten zur Beschreibung des Zusammenhangs zwischen Variablen genutzt. Die Analyseresultate können stark vom gewählten parametrischen Modell abhängen.

Durch die systematische Anwendung empirischer Modellwahlkriterien stellen wir Werkzeuge zum Vergleich verschiedener Modelle hinsichtlich ihrer Eignung für spezielle Aufgabenstellungen sowie Strategien und Verfahren zur Auswahl unter diesen Modellen bereit. Hierzu sind umfangreiche Programmentwicklungen erfolgt. Es ist vorgesehen, diese Programme einem weiten Kreis von Statistikern über den zentralen Statistik-Server *Statlib* im Internet verfügbar zu machen.

Literatur

- [1] O. Bunke, B. Droge, J. Polzehl: *Model selection and variable transformations in nonlinear regression*. CORE, Universite Catholique de Louvain, Discussion Paper 9327 (1993)
- [2] O. Bunke, B. Droge, J. Polzehl: *Model selection transformation and variance estimation in nonlinear regression*. In Vorbereitung.

Stabilitätsuntersuchungen für stochastische Optimierungsprobleme

Bearbeiter: N. Gröwe, R. Schultz

Kooperation: W. Römisch, D. Dentcheva, R. Henrion (Humboldt–Universität zu Berlin),
G. Pflug (Universität Wien/Österreich), A. Ruszczyński (IIASA Laxenburg/Österreich), L. Stougie (Universität Amsterdam/Niederlande), M.H. van der Vlerk (Universität Groningen/Niederlande)

Förderung: Das Projekt wurde durch die DFG und die Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung gefördert

Beschreibung der Forschungsarbeit: Stochastische Programme sind spezielle nichtlineare Optimierungsprobleme, die aus Optimierungsaufgaben mit zufallsbehafteten Daten abgeleitet werden. Basierend auf Verteilungsannahmen über die zufälligen Daten zielen stochastische Programme auf eine optimale Absicherung gegen zukünftige Ungewißheiten. Zielfunktionen (und/oder Nebenbedingungen) stochastischer Programme sind typischerweise mittels parameterabhängiger multivariater Integrale über impliziten Bereichen gegeben. Deshalb versagen bei stochastischen Programmen konventionelle numerische Techniken in der Regel. Aufgrund unvollständiger Information oder wegen der erwähnten numerischen Schwierigkeiten hat man außerdem oftmals mit Approximationen des dem stochastischen Programm unterliegenden Wahrscheinlichkeitsmaßes zu leben. Dies ist Motivation für Untersuchungen zur Stabilität stochastischer Programme bezüglich Störungen des unterliegenden Wahrscheinlichkeitsmaßes. Im einzelnen werden im Projekt folgende Schwerpunkte behandelt:

- Quantitative Stabilität und Differenzierbarkeitseigenschaften konvexer Zwei-Stufen-Modelle und von Aufgaben mit Wahrscheinlichkeitsrestriktionen,
- Struktur und Stabilität zweistufiger stochastischer Programme mit Ganzzahligkeitsforderungen,
- Qualitative und quantitative Stabilität mehrstufiger stochastischer Programme,
- Asymptotisches Verhalten von Lösungen stochastischer Programme bei nicht-parametrischer Schätzung der Wahrscheinlichkeitsverteilung,
- Stabilität und Numerik zwei- und mehrstufiger stochastischer Programme in der elektrischen Lastverteilung,
- Struktureigenschaften und Approximationen stochastischer Programme mit zufälliger Kompensationsmatrix,

- Algorithmen für ganzzahlige stochastische Programme unter Nutzung von Gröbner-Basis-Methoden.

Literatur

- [1] D. Dentcheva, W. Römisch, R. Schultz: *Strong convexity and directional derivatives of marginal values in two-stage stochastic programming*. K. Marti (ed.): *Stochastic Optimization – Numerical Methods and Technical Applications II*. Springer-Verlag, Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems (erscheint).
- [2] N. Gröwe, W. Römisch, R. Schultz: *A simple recourse model for power dispatch under uncertain demand*. *Annals of Operations Research* (erscheint).
- [3] W.K. Klein Haneveld, L. Stougie, M.H. van der Vlerk: *An algorithm for the construction of convex hulls in simple integer recourse stochastic programming*. Research Report 94201, Department of Econometrics, University of Groningen (1994)
- [4] G.Ch. Pflug, A. Ruszczyński, R. Schultz: *On the Glivenko–Cantelli Problem in Stochastic Programming: Linear Recourse*. Manuskript, International Institute for Applied Systems Analysis, Laxenburg (1994)
- [5] W. Römisch, R. Schultz: *Lipschitz stability for stochastic programs with complete recourse*. *SIAM Journal on Optimization* (erscheint).
- [6] R. Schultz: *Structure and stability in two-stage stochastic programming*. Habilitationsschrift, Humboldt-Universität zu Berlin (1994)
- [7] R. Schultz, L. Stougie, M.H. van der Vlerk: *Two-stage stochastic integer programming: a survey*. *Statistica Neerlandica* (eingereicht).
- [8] R. Schultz, L. Stougie, M.H. van der Vlerk: *Solving stochastic integer programs with complete recourse*. Manuskript (1994)

Kombinatorische Geometrie endlicher Konfigurationen

Bearbeiter: G.M. Ziegler, M. Henk, J. Richter–Gebert, J. Rambau

Kooperation: G. Kalai (Jerusalem), R. Zivaljević (Belgrad), H. Crapo (Paris)
Das Projekt wurde durch einen “Gerhard–Hess Forschungsförderpreis” der DFG gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: *Kombinatorik* ist die Mathematik endlicher Strukturen. *Geometrie* ist die Mathematik räumlicher Gebilde. *Kombinatorische Geometrie* befaßt sich mit dem engen Zusammenspiel von geometrischen Objekten und den ihnen zugrundeliegenden kombinatorischen Eigenschaften.

Einerseits lassen sich wesentliche Aspekte geometrischer Gebilde allein durch deren kombinatorische Struktur erfassen (z.B. Anzahl und Inzidenzstruktur beteiligter Punkte, Geraden und Flächen), andererseits sind viele rein kombinatorische Objekte durch geometrische Modelle darstellbar (z.B. Graphen oder Polytope), die zusätzliche Einblicke und neue Methoden eröffnen.

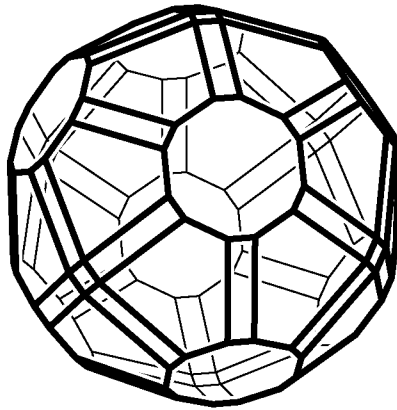
Die hauptsächlichen Forschungsobjekte der kombinatorischen Geometrie sind Polytope, Arrangements und Komplexe, und ihre kombinatorischen Modelle (Zellkomplexe, Matroide und Halbordnungen, etc.). Das Forschungsprojekt beschäftigt sich mit verschiedenen ausgewählten Fragestellungen, die im Brennpunkt des derzeitigen Forschungsinteresses liegen.

Herausforderungen an die kombinatorische Geometrie kommen neben anwendungsbezogenen Fragestellungen aus der reinen Mathematik. Es lassen sich nämlich verschiedenste fundamentale Strukturen — z. B. Polytope, torische Varietäten, Räume von Polynomen, triangulierte Mannigfaltigkeiten, etc. — durch kombinatorisch–geometrische Daten fassen.

Neue Methoden beruhen auf systematischer Entwicklung der kombinatorischen Modelle, und darauf, daß Struktur, Vollständigkeit, Komplexität etc. kombinatorischer Objekte mit Hilfe topologischer und algebraischer Invarianten gemessen und kontrolliert werden können. Die dadurch entstehende systematische Theorie kombinatorischer Strukturen erlaubt es nun, erfolgreich Verbindungen zu und Anwendungen in verschiedenen Gebieten der klassischen “reinen” Mathematik herzustellen. Als schlagende Beispiele in diesem Sinne seien genannt:

1. Die **Polytoptheorie** hat in den letzten Jahren stürmische Fortschritte gemacht (siehe [4]), und ist zum Beispiel durch Beziehungen zu verschiedensten Aspekten der algebraischen Geometrie (z.B. torische Varietäten) auf vermehrtes Interesse der “reinen Mathematik” gestoßen.

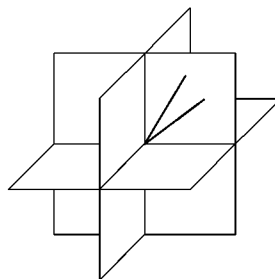
Die Konstruktion von sekundären Polytopen und Faser–Polytopen war von Fragen aus der Theorie der hypergeometrischen Funktionen motiviert. Sie führte zur Konstruktion der “Permuto–Assoziaeder” als symmetrische, konvexe Polytope,



und beantwortete damit Fragen aus der Homotopietheorie [2].

Weitergehendes Ziel der Forschungsarbeit ist ein neues Verständnis für die algebraische Struktur von Polytopen, das auch Durchmesser-Fragen, Rationalitätsfragen und Zerlegungstheorie mit einschließt.

2. Die **Homotopie-Theorie endlicher Strukturen** ist ein starkes neues Hilfsmittel. Kombinatorische Methoden lieferten elementare Beweise für die Homologie-Formeln für Unterraum-Arrangements von Goresky & MacPherson, und sogar Homotopie-Formeln (Ziegler & Živaljević), mit Anwendungen in der Komplexitäts-Theorie (Björner, Lovász & Yao).

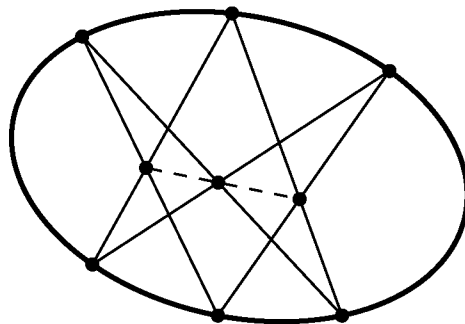


Hier stehen jetzt neuartige Ansätze zur Verfügung, welche es gestatten selbst Probleme großer Komplexität in Angriff zu nehmen.

3. Eine weitere wichtige Fragestellung ergibt sich aus dem Studium der **Einbettbarkeit** kombinatorischer Strukturen in geometrische Objekte. Man betrachtet dabei den Konfigurations-Raum aller reellen Realisierungen einer diskreten Struktur, und fragt, wie kompliziert dieser Realisierungsraum sein kann. Strukturen sind universell, wenn “im wesentlichen” alle semi-algebraischen Varietäten als Konfigurationsräume auftreten können. In

preisgekrönten Arbeiten von Mnëv wurde gezeigt, daß Geradenkonfigurationen in der Ebene in diesem Sinne universell sind. Forschungsziel ist es die Existenz derartige Universalitätssätze auch für größere Klassen geometrischer Objekte (Polytope, Unterraumarrangements, etc.) zu entscheiden. Durchbrüche mit weitreichenden Konsequenzen wurden hierbei auf dem Gebiet der Polytoptheorie erzielt [3].

4. **Automatisches Beweisen** geometrischer Sätze stellt ein weiteres wichtiges Feld im Grenzbereich von Geometrie, Kombinatorik und Algebra dar. Ziel ist es hierbei Algorithmen zu erstellen, welche aus den strukturellen Daten der Hypothesen und der Konklusion eines geometrischen Satzes (Inzidenzeigenschaften, Winkeleigenschaften, etc.) automatisch einen Beweis des Satzes generieren. Die zugrundeliegenden Theorien basieren auf neueren Entwicklungen der von Felix Klein begründeten Invariantentheorie, welche insbesondere auch algorithmische Aspekte umfassen.



In Zusammenarbeit mit H. Crapo (INRIA, Paris) wird ein Programmpaket zur interaktiven, graphischen Bearbeitung von geometrischen Sätzen erstellt.

Literatur

1. A. Björner, M. Las Vergnas, B. Sturmfels, N. White, G.M. Ziegler: *Oriented Matroids*. Encyclopedia of Mathematics **46**, Cambridge University Press (1993)
2. V. Reiner, G.M. Ziegler: *Coxeter-associahedra*. Mathematika **41** 364–393 (1994)
3. J. Richter–Gebert, G.M. Ziegler: *Realization spaces of 4–polytopes are universal*. Preprint 431/1995, TU Berlin 1995, 9 pages; Bulletin of the American Mathematical Society **32** to appear
4. G.M. Ziegler: *Lectures on Polytopes*. Graduate Texts in Mathematics **152**, Springer–Verlag New York (1995)

3.3 Anwendungsprojekte

Modellierung eines UNIX-Computers durch ein Processor-Sharing Modell

Bearbeiter: M. Brandt

Kooperation: A. Brandt (HU Berlin), Siemens AG, Abteilung Private Netze (München)

Förderung: Dieses Projekt wurde durch die Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung Berlin gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: In modernen Vermittlungssystemen werden die verschiedensten Dienste parallel bearbeitet, wobei ihnen unterschiedliche Systemressourcen zugewiesen werden. In der Entwicklungsphase solcher Systeme sind Grundsatzentscheidungen über die Systemauslegung und die Ressourcenzuweisungen zu treffen. Insbesondere sind dabei Leistungsmerkmale einzuhalten, so darf die Reaktionszeit eines solchen Systems für einen potentiellen Nutzer des Systems nicht zu lang sein. Andererseits sollten die Ressourcen des Systems gut ausgelastet werden. Bisher wurden solche Reaktionszeiten mit Hilfe sehr einfacher Modelle berechnet oder durch Monte-Carlo Simulation geschätzt. Die erste Methode erfaßt völlig unzureichend die in der Realität heutzutage auftretenden Modelle; andererseits liefert die Monte-Carlo Simulation keine analytischen Formeln derart, daß eine systematische Untersuchung der Leistungsparameter in Abhängigkeit von den Systemparametern möglich ist.

Modelle der oben erwähnten Art lassen sich in der Terminologie der Nachrichtenverkehrstechnik durch Bedienungsmodelle mit Processor-sharing Arbeitsweise beschreiben, wobei unterschiedliche Klassen von Forderungen mit verschiedenen Parametern auftreten. Die Berechnung der Verteilungsfunktion für die Reaktionszeit in Processor-sharing Modellen erweist sich als ein schwieriges Problem. Auch für Modelle mit einschränkenden Voraussetzungen sind die entsprechenden mathematischen Probleme noch nicht gelöst und erfordern erhebliche Anstrengungen. Die folgenden Modellklassen sind von besonderem Interesse und sollten mathematisch analysiert werden.

1. Modellklassen:

Zwei Typen von Forderungen werden von einem Processor-sharing Knoten bedient: permanente und normale Forderungen, wobei beide Forderungstypen von einem Prozessor bearbeitet werden. In diesem Modell ist die Verteilung der Verweilzeit von Interesse.

2. Modellklassen:

Es gibt eine Anzahl permanenter Forderungen und verschiedene Typen von Forderungen, die jeweils eine eigene Warteschlange haben. Die permanenten Forderungen und die Warteschlangen werden von einem Processor-sharing Knoten bedient. Die Stabilitätsbedingung und die Verweilzeitverteilungen sind von Interesse.

Literatur

- [1] A. Brandt, M. Brandt, H. Pohl: Abschlußbericht zum Forschungsvertrag *Analyse von verschiedenen Processor-Sharing-Modellen bezüglich Stabilitätskriterien und Durchlaufzeitverhalten*. Siemens AG, München (1994)

Approximation der Anzahl von Paketen in Paket-Ankunftsströmen

Bearbeiter: M. Brandt

Kooperation: A. Brandt (HU Berlin), Telekom, Forschungszentrum (Darmstadt)

Förderung: Dieses Projekt wurde durch die Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung Berlin gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Fluid-flow-Approximationen werden häufig zur Approximation von Modellen von Vermittlungssystemen benutzt, bei denen die Paket-Ankunftsströme innerhalb eines gewissen Intervalls in regulärer Weise erzeugt werden (mit konstanter Rate). Das geeignete mathematische Instrument zur Beschreibung dieser Ankunftsströme in der fluid-flow-Approximation sind die bekannten Markov-modulierten Ratenprozesse (MMRP). Die Variabilität der Ankunftsströme hat einen beträchtlichen Einfluß auf die Systemcharakteristiken, d.h. auf die Verlustwahrscheinlichkeiten in den stochastischen Modellen, die die Überlagerung beschreiben. Wegen der Forderung, daß die Wahrscheinlichkeit des Paketverlustes bedingt durch einen Überlauf von Puffern kleiner als 10^{-10} sein soll, ist die Verteilung der Anzahl $N(t)$ von Paketen im Intervall $[0, t]$ des MMRP von Interesse. Für MMRP mit zwei Zuständen ist die Laplace-Stieltjes-Transformierte der Verteilung von $N(t)$ bekannt. Die Verteilung von $N(t)$ für die Überlagerung von MMRP mit zwei Zuständen ergibt sich mit Hilfe der Umkehrformel für Laplace-Transformationen. Eine explizite Darstellung als Reihe für die den Überlagerungsprozeß beschreibende Verteilung ist in [1] angegeben, aber zur numerischen Berechnung eignet sich diese Reihe im Falle einer größeren Anzahl von Quellen weniger gut. In [2] werden Approximationen für die Verteilung der Summe von n reellen stochastisch unabhängigen identisch verteilten Zufallsgrößen mit kompaktem Träger in \mathbb{R} in einem einheitlichen Zugang basierend auf komplexer Integration und der Umkehrformel für Laplace-Transformationen hergeleitet. Spezialfälle sind der zentrale Grenzwertsatz und zentrale Approximationen höherer Ordnung (Edgeworth expansion) sowie large-deviation Resultate (Sätze von Cramer, Bahadur-Rao), wobei auch explizite Fehlerschranken angegeben werden. Eine Anwendung liefert gute Approximationen für die Verteilung der Anzahl $N(t)$ bei der Überlagerung von MMRP mit zwei Zuständen sowie explizite Fehlerschranken für alle Bereiche.

Literatur

- [1] A. Brandt, M. Brandt: *On the distribution of the number of packets in the fluid flow approximation of packet arrival streams*. Queueing Systems **17** 275-315 (1994)
- [2] M. Brandt: *Abschlußbericht zum Forschungsvertrag "Zellverteilungsapproximation"*. Telekom FTZ, Darmstadt (1994)

Dimensionierung des E-PLUS Mobilfunknetzes

Bearbeiter: D. Alevras, M. Grötschel, R. Wessäly

Kooperation: E-PLUS Mobilfunk GmbH (Düsseldorf)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Projekt ist eine Kooperation mit E-PLUS Mobilfunk GmbH, einem der drei Mobilfunkunternehmen in Deutschland. Ziel des Projektes ist die Erweiterung des bestehenden Netzes durch Installation neuer Verbindungen und Kapazitätserhöhung auf bereits existierenden Verbindungen. Da ein derartiger Netzausbau mit hohen Kosten verbunden ist, ist die Entwicklung eines möglichst kostengünstigen Netzes, das Anforderungen wie Ausfallsicherheit gerecht wird, von primärer Bedeutung. Um genauer zu sein, gegeben ein Bedarf zwischen je zwei Knoten (Städten) des Netzwerkes, wollen wir für jede mögliche Kante (jede Kante repräsentiert eine Verbindung zwischen zwei Städten) aus einer diskreten Menge von möglichen Kapazitäten so auswählen, daß das Netz (i) kostenminimal ist und (ii) den Bedarf unter folgenden Nebenbedingungen erfüllt: Das Routen des Bedarfs soll (a) zur Vermeidung technischer Probleme auf längenbeschränkten Wegen erfolgen und (b) höchstens einen zuvor bestimmten Prozentsatz des Bedarfs pro Weg erlauben. Des weiteren sollen die gewählten Kapazitäten ein gewisses Maß an Ausfallsicherheit garantieren, d.h. bei Ausfall einer Kante oder eines Knotens sollen die Kapazitäten es erlauben, einen zu spezifizierenden Prozentsatzes des Bedarfs umzuleiten. Zu einer Lösung gehören die gewählten Kapazitäten für jede Kante, sowie die Pfade zur Befriedigung des Bedarfs in allen Ausfallsituationen. Unsere Modellierung lehnt sich an M. Stoer und G. Dahl [1] an. Wir formulieren das Problem als ein gemischt-ganzzahliges lineares Programm und beschreiben die assoziierten Polyeder mit Hilfe von Klassen von gültigen Ungleichungen. Aufgrund der gewaltigen Zahl von entstehenden Ungleichungen dekomponieren wir das Problem in ein Master LP und eine Reihe anderer LPs, lösen das Master LP mit Hilfe von Schnittebenenverfahren und testen mit Hilfe der anderen LPs, ob die erzielten Lösungen alle Nebenbedingungen erfüllen. Die Lösungen des Master LPs geben eine untere Schranke für die Kosten eines solchen Netzes, d.h. zusammen mit Heuristiken, die schnell eine "gute" zulässige Lösung berechnen, ergibt sich eine worst-case Gütegarantie. Zur Zeit implementieren wir die Algorithmen in C++ und testen diese an real existierenden Problemen.

Literatur

- [1] M. Stoer, G. Dahl: *A polyhedral approach to multicommodity survivable network design*. Numerische Mathematik **68** 149–167 (1994)
- [2] D. Alevras, M. Grötschel, R. Wessäly: *Documentation of DISCNET*. Interner Bericht (1994)

Routing in ATM Netzwerken

Bearbeiter: A. Martin

Kooperation: G. Dahl (University of Oslo/Norwegen),
M. Stoer (Telenor AS/Norwegen)

Beschreibung der Forschungsarbeit: ATM (Asynchronous Transfer Mode) ist ein Transportverfahren für Breitbandnetze. Es besitzt sehr hohe Flexibilität und kann Netzkapazitäten nach Anforderung bereitstellen, beispielsweise für Videokonferenzen oder Computersimulationen. Die ATM-Technologie wird für Hochgeschwindigkeitsnetze der Zukunft eine dominante Rolle spielen.

Ein ATM-Netz nutzt die Übertragungskanäle des zugrundeliegenden physikalischen Netzes. Die sogenannten Digital Cross Connects (DCCs) bilden die Knoten des physikalischen Netzes, eine Verbindung zweier DCCs entspricht einer Menge von Glasfasern. Einige dieser DCCs sind als sogenannte ATM-Switches (Knoten mit Vermittlungstechnik) ausgezeichnet und bilden die Knoten des ATM-Netzes. Die Kanten des ATM-Netzes heißen Express-Leitungen (auch Virtuelle Kanäle genannt), von denen jede einem Weg im physikalischen Netz entspricht. Außerdem hat jede Express-Leitung eine Kapazität, die von der Übertragungsgeschwindigkeit der Endstücke an den beiden Enden der Leitung bestimmt wird. Diese Kapazität ist für praktisch relevante Fälle 34 oder 155 Mb/s (Megabit pro Sekunde). Darüber hinaus ist eine Liste von Anforderungen gegeben. Jede Anforderung entspricht einer Datenmenge (beispielsweise einer Videokonferenz), die auf einem Weg zwischen zwei ATM-Knoten übertragen werden muß.

Das Problem besteht nun darin, eine Menge von Express-Leitungen des ATM-Netzes zu wählen, so daß für jede Verbindung im physikalischen Netzwerk die Anzahl Express-Leitungen, die diese Verbindung benutzen, die Anzahl Glasfasern dieser Verbindung nicht überschreitet, so daß alle Anforderungen unter Einhaltung der Kapazitäten der Express-Leitungen bedient werden können. Darüber hinaus ist eine Zielfunktion, die die durchschnittliche Verzögerung bei der Übertragung der Datenmengen widerspiegelt, zu minimieren.

Wir betrachten dieses Problem aus polyedrischer Sicht und entwickeln einen Branch-and-Cut Algorithmus, der eine optimale Lösung für das Problem findet oder (zumindest) eine Garantie für die Qualität der besten gefundenen Lösung gibt.

Optimierung von Aufzugssteuerungen

Bearbeiter: N. Kamin, M. Grötschel

Beschreibung der Forschungsarbeit: In der Literatur werden meist solche Transportprobleme untersucht, bei denen die Fahrtkosten bzw. Fahrzeit der Fahrzeuge zu minimieren ist. In der Praxis treten jedoch auch häufig Transportprobleme auf, die eine möglichst rasche Erfüllung der Transportaufträge erfordern, d.h. Transportprobleme, bei denen die Summe aus Warte- und Transportzeit der zu befördernden Güter minimiert werden soll. Eine solche Problemstellung tritt z.B. bei der Optimierung von Aufzugssteuerungen auf. Hierbei sind eine Anzahl von Aufzügen mit Kapazitäten gegeben, sowie die Etagen, zwischen denen sich die Aufzüge bewegen können bzw. in denen sich die Aufzüge anfangs befinden, und die Fahrtwünsche. Aus Sicht der Personen, die die Aufzüge benutzen möchten, ist es wünschenswert, die Zeit zwischen dem Eintreffen bei den Aufzügen und der Ankunft in der gewünschten Zieletage möglichst gering werden zu lassen. Gesucht ist also für jeden Aufzug eine Folge von Fahrbewegungen, so daß alle Fahrtwünsche erfüllt werden und die Summe aller Warte- und Fahrzeiten der Personen minimal wird. Was die Fahrtwünsche betrifft, so lassen sich verschiedene Varianten des Problems angeben: eine *off-line* und eine *on-line* Variante. Off-line soll hier bedeuten, daß zu Anfang der Berechnung schon alle im Berechnungszeitraum auftretenden Fahrtwünsche (mit Ankunftszeit, Start- und Zieletage) bekannt sind. In der on-line Variante wird jeder Fahrtwunsch (Start- und Zieletage) erst mit Ankunft der entsprechenden Person bekannt. Dabei ist anzumerken, daß in der Praxis vereinzelt schon sogenannte *Zielrufsteuerungen* eingesetzt werden, die es jedem Fahrgast ermöglichen, bei Ankunft am Aufzug seinen Fahrtwunsch nicht durch Angeben der Fahrtrichtung (aufwärts oder abwärts), sondern durch Eingeben der Zieletage anzumelden. Dadurch erhält die Aufzugssteuerung vollständige Daten über die Fahrziele schon vor dem Einsteigen der Personen. Das off-line Problem ist von großem Interesse für die Kapazitätsplanung von Aufzügen bei der Planung neuer Gebäude, während das on-line Problem bei der Programmierung von Aufzugssteuerungen auftritt, die die Wartezeiten der Benutzer minimieren sollen. Zunächst haben wir die *off-line* Variante der Optimierung von Aufzugssteuerungen betrachtet. Ein erster Lösungsversuch mittels dynamischer Programmierung lieferte für kleine Probleme die Optimallösung. Genauere komplexitätstheoretische Untersuchungen ergaben jedoch, daß das Problem *NP*-schwer ist, selbst wenn man sich auf solche Probleme beschränkt, bei denen nur ein Aufzug mit Kapazität 1 gegeben ist (d.h. es kann immer nur eine Person mit dem Aufzug befördert werden). Betrachtet man hingegen ausschließlich Probleme mit gleicher Etagenanzahl und gleicher Anzahl von Aufzügen, so läßt sich das Optimierungsproblem in polynomieller Zeit mit dynamischer Programmierung lösen. Zur Zeit entwickeln wir heuristische Algorithmen für das Problem mit mehreren Aufzügen. Unser Ziel ist es, Verfahren zu finden, die ebenfalls möglichst gute Lösungen für das on-line Problem liefern.

Anwendungen der Stochastischen Optimierung und Wahrscheinlichkeitstheorie in Nachrichtenverkehrstheorie und elektrischer Lastverteilung

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

Kooperation: A. Brandt, W. Römisch (HU Berlin)

Förderung: Das Projekt wurde durch die Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung gefördert.

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

- Stochastische Modelle der Nachrichtenverkehrstheorie und im Netzmanagement (Modellierung und Analyse von Zellströmen in ATM-Systemen, Modellierung eines UNIX-Rechners durch ein Prozessor-Sharing-Modell),
- Statistische Lastvorhersagen und Modellierungen in Kraftwerkssystemen,
- Wahl von Regressions- und Varianzmodellen bei nichtlinearen Regressionsproblemen,
- Optimierung in Kraftwerkssystemen (Lastverteilung, Blockauswahl, Optimierung unter Ungewißheiten).

Literatur

- [1] A. Brandt, M. Brandt, A. Makarov: Abschlußbericht zum Forschungsvertrag *Verteilung von Zellankünften in einem Zeitintervall der Dauer t* , Telekom FTZ Darmstadt (1993)
- [2] A. Brandt, M. Brandt: *On the distribution of the number of packets in the fluid-flow approximation of packet arrival streams*. Queueing Systems **17** 275–315 (1994)
- [3] A. Brandt, M. Brandt, H. Pohl: Abschlußbericht zum Forschungsvertrag *Analyse von verschiedenen Processor-Sharing-Modellen bezüglich Stabilitätskriterien und Durchlaufzeitverhalten*. Siemens AG, München (1994)
- [4] A. Brandt, M. Brandt: Bericht zum Thema *Dimensionierung von ACD-Systemen*. Siemens AG, München (1994)

- [5] M. Brandt: Abschlußbericht zum Forschungsvertrag *Zellverteilungsapproximation*. Telekom FTZ, Darmstadt (1994)
- [6] O. Bunke, B. Droge, J. Polzehl: *Model selection and variable transformations in nonlinear regression*. CORE, Universite Catholique de Louvain, Discussion Paper 9327 (1993)
- [7] D. Dentcheva, W. Römisch, R. Schultz: *Strong convexity and directional derivatives of marginal values in two-stage stochastic programming*. In: K. Marti (ed.): *Stochastic Optimization — Numerical Methods and Technical Applications II*, Springer-Verlag, Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems (erscheint)
- [8] N. Gröwe, W. Römisch, R. Schultz: *A simple recourse model for power dispatch under uncertain demand*. *Annals of Operations Research* (erscheint)
- [9] J. Polzehl: *Regression-based short term prediction of electrical load for a power system*. *ASA Proceedings of Physical & Engineering Sciences Section* (1994)
- [10] R. Schultz: *Structure and Stability in Two-Stage Stochastic Programming*. Habilitationsschrift, Humboldt-Universität zu Berlin (1994)

Fahrzeugeinsatzplanung im Behindertentransport

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

Kooperation: Berliner Zentralaussschuß für Soziale Angelegenheiten (BZA)

Förderung: Das Projekt wurde durch die Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Seit 1981 gibt es in Berlin den *Telebus* Fahrdienst für Behinderte. Berechtigte Personen können hierbei über eine Telefonzentrale ihre Fahrtwünsche mitteilen. Die Beförderung erfolgt je nach Behinderung und Rollstuhltyp mit verschiedenen Arten von Spezialfahrzeugen und umfaßt Hilfe beim Ein- und Ausstieg sowie beim Verlassen und Betreten des Abfahrts- beziehungsweise Ankunftsortes. Jeden Tag gehen 1000 bis 1500 Fahrtwünsche bei Telebus ein. Es ergibt sich das Dispositionsproblem, diese Fahrtwünsche mit einem Maximum an Service (möglichst pünktliche und schnelle Beförderung) bei minimalen Beförderungskosten zu erfüllen. Seit dem 1. Juni 1993 besteht eine Kooperation zwischen dem ZIB und dem BZA mit dem Ziel, ein auf Methoden der *ganzzahligen Programmierung* beruhendes vollautomatisches Dispositionssystem zu entwickeln, zu testen und bei Telebus zu installieren. Das Telebus-Dispositionsproblem kann als *Set-Partitioning-Problem* modelliert werden, das in zwei verschiedenen Phasen bearbeitet wird. In der ersten Phase erzeugt ein parametrisierter *Matrixgenerator* hunderttausende oder gar Millionen möglicher Einsatzpläne für einzelne Fahrzeuge, die die Handlungsalternativen des Planers darstellen. Die Daten werden in Form einer 0/1-Matrix gespeichert und beschreiben ein Set-Partitioning-Problem. In der zweiten Phase wird aus diesen Handlungsalternativen mit Hilfe eines *Branch-& Cut-Algorithmus* die optimale Kombination ermittelt. Der Algorithmus basiert auf Untersuchungen über die Facettenstruktur von Set-Packing- und Set-Covering-Polyedern. Die Trennung des Algorithmus in die oben beschriebenen Phasen erlaubt es, die komplexen Nebenbedingungen in der Matrixgenerierung unabhängig von der Optimierung zu behandeln. Dies macht Problemstellungen dieser Art einerseits überhaupt erst behandelbar und garantiert andererseits eine große Flexibilität des Optimierungssystems gegenüber Änderungen der Rahmenbedingungen.

Der Matrixgenerator wurde im Rahmen der Diplomarbeiten von F. Klostermeier und C. Küttner implementiert. Unter anderem enthält er eine Vielzahl von neuen heuristischen, zum Teil speziell für das Telebus-Problem und die Berliner Situation entwickelten Planungsverfahren. Der Matrixgenerator wurde vom 7. bis 20. Februar 1993 bei Telebus probeinstalliert und unter realen Bedingungen getestet. Die im Rahmen dieses Projektes entwickelten Heuristiken haben sich dabei als sehr leistungsfähig und den bisher verwendeten Planungsmethoden deutlich überlegen gezeigt, siehe [2].

Mit Abschluß ihrer Diplomprüfungen wurden F. Klostermeier und C. Küttner aus Sondermitteln des Berliner Senats für Soziales von Telebus eingestellt und setzen dort ihre Arbeit insbesondere in organisatorischer und planerischer Hinsicht fort. Zur Zeit werden letzte Abstimmungen für die Verwendung der entwickelten Heuristiken für die tägliche Planung vorgenommen. Gleichzeitig wurde ein Branch-& Cut-Algorithmus für das Set-Partitioning-Problem implementiert, der später ebenfalls bei Telebus installiert werden soll. Erste Rechenergebnisse zeigen noch erhebliche Einsparungspotentiale.

Literatur

- [1] R. Borndörfer, M. Grötschel, F. Klostermeier, C. Küttner:
Telebus-Disposition: Ein Konzept zur Serviceverbesserung bei gleichzeitiger Kostensenkung., Technical Report TR 93-03, Konrad-Zuse-Zentrum (1993)
- [2] F. Klostermeier, C. Küttner: *Kostengünstige Disposition von Telebussen.* Diplomarbeit, Technische Universität Berlin (1993)

Fahrzeugumlaufplanung im Öffentlichen Personennahverkehr (ÖPNV)

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

Kooperation: HanseCom GmbH, Hamburg

Förderung: Das Projekt wurde durch das BMBF gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: In diesem Projekt beschäftigen wir uns mit einem Teilprojekt bei der Einsatzplanung im ÖPNV. Das zu lösende „Fahrzeugumlaufplanungsproblem“ läßt sich wie folgt skizzieren: Aus einer gegebenen Linienplanung und einem ebenfalls gegebenen Fahrplan lassen sich sog. Fahrten, jeweils definiert durch ein Streckenstück und eine Anfangs-/Endzeit ableiten. Jede Fahrt muß von genau einem Fahrzeug eines erlaubten Typs und eines Betriebshofs vom Anfang bis zum Ende durchfahren werden. Alle Fahrzeuge eines Typs und eines Betriebshofs werden zu sogenannten Depots zusammengefaßt. Anschließend erfolgt für jede Fahrt die Festlegung der möglichen Nachfolgefahrten. Hierbei sind insbesondere arbeits- und tarifrechtliche Nebenbedingungen zu berücksichtigen. Die Verbindung zwischen zwei Fahrten erfolgt durch eine sogenannte Verbindungsfahrt. Durch diese Verbindungsfahrten entstehen nicht unerhebliche Kosten, die es zu minimieren gilt. Die Aufgabe der kostenminimalen Fahrzeugumlaufplanung ist es, auf zulässige Weise die Fahrzeuge den Fahrten so zuzuordnen, daß alle Fahrten bedient werden und die dabei entstehenden Kosten minimiert werden.

Das Fahrzeugumlaufplanungsproblem ist im Ein-Depot-Fall als ein Minimal-Kosten-Flußproblem polynomial lösbar. Jedoch schon ab zwei Depots reiht es sich in die Klasse der *NP*-schweren Probleme im strengen Sinne ein.

Die praktischen Probleme dieser Art sind von enormer Größenordnung, 10.000 Fahrten am Tag und mehr sind in Großstädten durchaus zu erledigen. Gerade unüberschaubar große Verkehrsbetriebe haben da ihre Planungsschwierigkeiten. Derzeit gibt es keine ernstzunehmenden Verfahren, die solche Probleme optimal oder wenigstens mit einer beweisbaren Gütegarantie lösen. Allerdings gehen wir davon aus, daß einige wenige Spezialisten — wie auch unser Kooperationspartner, die Firma HanseCom GmbH aus Hamburg — sehr wohl in der Lage sind, mit heuristischen Verfahren, die auf Erfahrungswerte der Vergangenheit basieren, gute Umlaufpläne zu erzeugen. Ziel unseres Projektes ist nun, mathematische Verfahren zu entwickeln und umzusetzen, die nicht nur Umlaufpläne nahe am Kostenoptimum berechnen, sondern darüber hinaus auch die Güte eines gegebenen Umlaufplans bewerten können.

Optimale Blockauswahl bei der Kraftwerkseinsatzplanung

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

Kooperation: W. Römisch, D. Dentcheva, A. Möller (HU Berlin) Vereinigte Energiewerke AG (VEAG, Berlin)

Förderung: Das Projekt wurde durch das BMBF und die Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung gefördert.

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

Aus mathematischer Sicht handelt es sich beim Blockauswahl-Problem um ein hochdimensionales Optimierungsproblem mit stetigen Variablen (Produktionsmengen), binären Variablen (An/Aus-Entscheidungen) und Nichtlinearitäten in der Zielfunktion (Brennstoffkosten). Für realistische Probleme erhält man leicht mehrere tausend Variablen. Für Optimierungsaufgaben dieser Art gibt es momentan weder eine allgemeine Theorie noch zufriedenstellende Lösungsverfahren. Daher werden in vorhandenen Algorithmen zur optimalen Blockauswahl exakte Methoden (dynamische Optimierung, Lagrange'sche Relaxation) und Heuristiken (Prioritätslisten) miteinander verknüpft.

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

Die im Projekt erstellte Software kann in Energieversorgungsunternehmen als eine zentrale Komponente bei der rechnergestützten Kraftwerkssteuerung genutzt werden.

Literatur

- [1] J. Guddat, W. Römisch, R. Schultz: *Some Applications of Mathematical Programming Techniques in Optimal Power Dispatch*. Computing **49** 193–200 (1992)
- [2] A. Möller: *Über die Lösung des Blockauswahlproblems mittels Lagrange'scher Relaxation*. Diplomarbeit, Humboldt–Universität zu Berlin, Institut für Mathematik (1994)
- [3] A. Möller, W. Römisch: *A Dual Method for the Unit Commitment Problem*. Manuskript, Humboldt–Universität zu Berlin, Institut für Mathematik (1994)

Fahrzeugeinsatzplanungsprobleme

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

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

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

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

Volume Rendering

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

Beschreibung der Forschungsarbeit: *Direktes Volume Rendering* ist ein attraktives Visualisierungsverfahren, das es erlaubt, dreidimensionale Datenverteilungen durch Dichtewolken unterschiedlicher Transparenz plastisch darzustellen. Im Berichtszeitraum wurde mit der Entwicklung und Implementierung spezieller Varianten dieses Verfahrens im Rahmen zweier Diplomarbeiten begonnen.

Zum einen wurden Algorithmen entwickelt, die Volume Rendering auf hierarchisch strukturierten, irregulären Tetraedergittern ermöglichen, also Gittern, wie sie in adaptiven Multilevel-FE-Verfahren auftreten. Ziel der Arbeit ist es, Methoden bereitzustellen, die dem Anwender ein kontrolliertes Abwägen von Geschwindigkeit und Bildgenauigkeit ermöglichen. Die Steuerung erfolgt dabei über die Angabe eines maximal zulässigen Fehlers bei der Bestimmung der Beiträge einzelner Gitterzellen zu den Farbwerten im Ergebnisbild gemäß dem gewählten Lichttransfermodell. Innerhalb eines allgemeinen algorithmischen Rahmens wurden verschiedene Methoden entwickelt, um einzelne Gitterzellen in die Bildebene zu projizieren und ihre Beiträge zum Ergebnisbild zu berechnen. Diese Methoden decken ein Spektrum von solchen mit hoher Genauigkeit und großem Rechenaufwand bis zu solchen niedriger Genauigkeit und geringem Rechenaufwand ab. Je weniger transparent das Gebiet zwischen Auge und Gitterzelle ist, desto größer darf der Fehler bei der Strahlintegration innerhalb der Zelle sein. Entsprechend wird adaptiv entschieden, welche Projektionsmethode für eine Zelle benutzt werden soll.

In einem weiteren Projekt wurde mit der Implementierung eines *parallelen* Volume-Rendering-Verfahrens auf dem Parallelrechner Cray T3D begonnen. Ziel dieser Arbeit ist es, die Rechenleistung des Systems auszuschöpfen, um qualitativ hochwertige Bilder zu generieren, mit Bildraten, die ein interaktives Arbeiten ermöglichen. Ein weiterer nicht unerheblicher Vorteil des Einsatzes von Parallelrechnern liegt in der Möglichkeit, sehr große Datensätze verarbeiten zu können, die nicht mehr in den Arbeitsspeicher einer normalen Workstation passen. Als Ausgangspunkt wurde ebenfalls ein Projektionsverfahren gewählt, bei dem einzelnen Prozessoren Bildbereiche zur Berechnung zugeordnet und von jedem Prozessor ganze Bildabschnitte ohne weitere Synchronisation berechnet werden können. Dieses Verfahren bedingt einer fein-granulare Datenverteilung. Der entstehende Zeitaufwand für Kommunikation kann durch geeignete Datenverwaltung sowie durch Ausnutzung von Zusatzhardware wie der Pre-Fetch-Queue des Cray T3D minimiert werden.

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

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

Kooperation: Cray Research Inc., Eagan/USA

Förderung: Das Projekt wurde durch die Cray Research Inc. gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung eines generischen parallelen Branch-and-Cut-Frameworks (B&C), das das Leistungspotential moderner massiv-paralleler MIMD-Rechnersysteme zur Lösung großer kombinatorischer Optimierungsprobleme erschließt. Im Berichtszeitraum wurde die Implementierung fortgeführt und die generische Grundversion des B&C-Frameworks, ein hieraus abgeleiteter B&C-Algorithmus zur Lösung von Set-Packing Problemen sowie eine parallele Version der Branch-and-Bound-Komponente (B&B) für den Cray T3D Parallelrechner erstellt.

Das Framework wurde in C++ implementiert. Der zugrundeliegende objektorientierte Entwurf soll eine gute Erweiterbarkeit, Austauschbarkeit und Wiederverwendbarkeit von Komponenten gewährleisten. Die Anwendung des Frameworks auf spezielle B&C-Algorithmen besteht in einer Erweiterung oder Spezialisierung vorhandener Komponenten als abgeleitete C++-Klassen. Auf diese Weise wurde ein Set-Packing B&C-Algorithmus realisiert, der auf einem im ZIB entwickelten sequentiellen Schichtebenen-Code beruht. Es zeigte sich, daß der Mehraufwand an Rechenarbeit bei unserem generischen Ansatz im Vergleich zu einer individuellen, von vornherein spezialisierten B&C-Implementierung nicht ins Gewicht fällt.

Der Entwurf erlaubt es, Implementierungen sequentieller wie paralleler B&C-Algorithmen aus einem gemeinsamen Framework abzuleiten. Hierzu wird ein paralleles Programmiermodell benötigt, das die Erzeugung nebenläufiger Objekte gestattet, aber die Art der Synchronisation und Kommunikation zwischen diesen möglichst verbirgt (siehe Projekt "Entwicklung eines parallelen C++-Programmiermodells zur Implementierung paralleler B&C-Verfahren"). Auf der Basis einer PVM-Implementierung des Programmiermodells wurde eine parallele B&B-Version für den Cray T3D Parallelrechner erstellt. Derzeit wird an einem Ausbau (generische Schichtebenenkomponente, Set-Partitioning, Pool) und der Parallelisierung weiterer Komponenten des Frameworks (NodeSet, parallele Separierung) sowie einer weiteren Verbesserung der Performance gearbeitet.

Entwicklung eines parallelen C++ Programmiermodells zur Implementierung paralleler B&C-Verfahren

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

Kooperation: Cray Research Inc., Eagan/USA

Förderung: Dieses Projekt wurde von der Cray Research Inc. gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Ziel dieses Projektes ist die Bereitstellung eines parallelen Programmiermodells, das die Implementierung effizienter paralleler Branch&Cut- und Branch&Bound-Verfahren unter C++ für MIMD-Rechnersysteme mit verteiltem Speicher unterstützt. Im Berichtszeitraum wurde hierfür ein Entwurf erarbeitet und mit der Implementierung des Programmiermodells für den Cray-T3D-Parallelrechner begonnen.

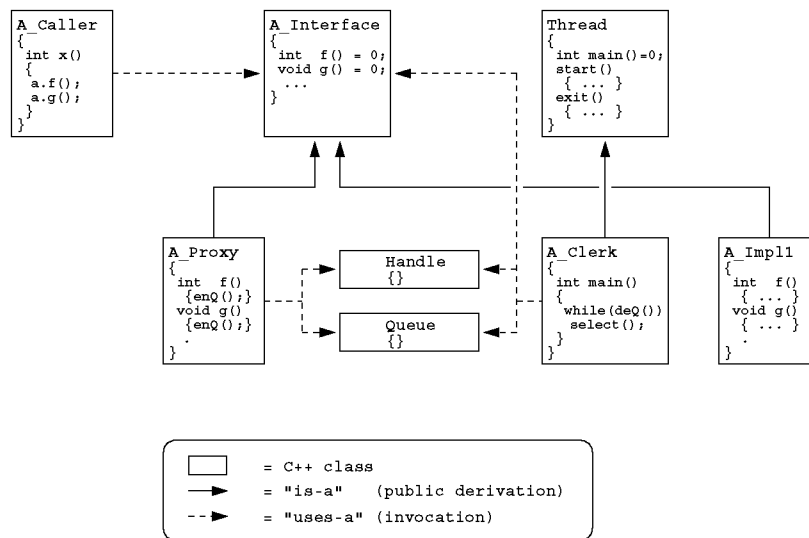
Im Rahmen des Projektes "Entwicklung eines parallelen Branch&Cut-Framework zur Lösung großer kombinatorischer Optimierungsprobleme" wurde gezeigt, daß ein objektorientierter Softwareentwurf gegenüber einem "herkömmlichen" prozedural orientierten Ansatz von Vorteil ist. Da in objektorientierten Systemen parallele Ausführung (Nebenläufigkeit und Verteilung) auf verschiedene Weise eingeführt werden kann, stellte sich die Frage der Wahl und der Verfügbarkeit eines geeigneten parallelen Programmiermodells. Einige C++ Spracherweiterungen befinden sich noch im Stadium der Entwicklung und bergen das Problem der Portabilität.

Das von uns entwickelte Programmiermodell beruht daher auf einer Bibliothek von C++ Klassen. Diese ermöglicht es, algorithmische Komponenten des B&C-Frameworks in Form *aktiver Objekte* zu beschreiben, welche mit einem eigenen Thread ausgestattet sind und nebenläufig zueinander ausgeführt werden. Aktive Objekte kommunizieren anhand lokaler oder entfernter Objektaufrufe (LOI/ROI), die sich in ihrem Aufruf nicht voneinander unterscheiden. Dies erlaubt es, unter Beachtung gewisser Einschränkungen, Code ohne Änderungen in sequentiellen wie parallelen Versionen einzusetzen und alle diese Versionen aus *einem* Framework abzuleiten.

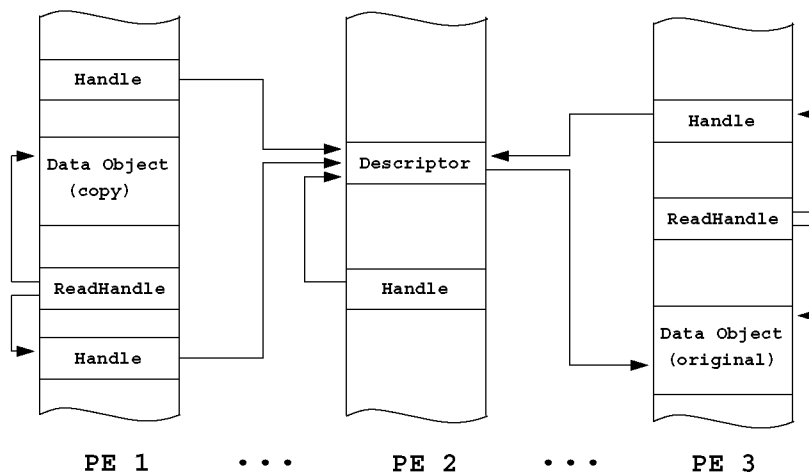
Die Kommunikation zwischen aktiven Objekten wird durch Klassen für globale Objektreferenzen (*Handles*) unterstützt, welche einen transparenten Zugriff auf entfernte Datenobjekte, eine Synchronisation von Lese- und Schreibzugriffen nach dem CREW-Prinzip (concurrent read exclusive write) und eine automatische Verwaltung von Objekten anhand von Referenzzählern ermöglichen. Insbesondere das Konzept der globalen Objektreferenzen eignet sich ebenso für eine allgemeine Verwendung im Rahmen anderer paralleler Applikationen.

Literatur

1. M. Grammel, G. Back, R. Wunderling, H.C. Hege: *Ein paralleles C++ Programmiermodell für ein objektorientiertes B&C-Framework*. PARS Mitteilungen der GI, **13** 191–200 (1994)



Implementierung aktiver Objekte



Globale Objektreferenzen

Symbolische Lösung algebraischer Gleichungssysteme

Bearbeiter: H. Melenk

Beschreibung der Forschungsarbeit: In mathematischen Programmsystemen (Computeralgebra) spielt das Lösen nicht-linearer algebraischer Gleichungssysteme eine zentrale Rolle, einerseits als direkt ansprechbare Leistung, andererseits als “black Box” in komplexen Algorithmen wie z.B. zum symbolische Lösen von Differentialgleichungen. Im ZIB werden Softwarepakete für diesen Themenbereich entwickelt und gepflegt, die auf dem Buchberger-Algorithmus (Berechnen von Gröbnerbasen für Polynomideale) und verwandten Verfahren basieren.

Im Berichtsjahr wurde das Gröbnerpaket von REDUCE – teilweise auf direkte Anforderung aus anderen Projekten – erheblich erweitert. So wurden Basen für Moduln, gradbeschränkte Gröbnerbasen und Normalformen für auflösbare nicht-kommutative Ideale eingerichtet. Auch die Kopplung des algebraischen Löser mit dem Modul für Wurzelberechnung wurde verbessert: bei der Rücksubstitution von genäherten Wurzeln univariater Polynome in ein algebraisches System wird die Kondition in der Umgebung der Lösung für die Steuerung der Genauigkeit ausgenutzt, so daß die vom Anwender verlangte Genauigkeit für die gesamte Lösung garantiert ist. Das Paket ist Bestandteil des Systems Reduce 3.5.

Entwicklung informationstechnischer Werkzeuge für die Museumsdokumentation

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

Kooperation: Institut für Museumskunde (Staatliche Museen zu Berlin), Deutsches Historisches Museum

Förderung: Das Projekt wurde durch die Robert-Bosch-Stiftung und den Deutschen Museumsbund e.V. gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Zwischen dem ZIB und dem Institut für Museumskunde der Staatlichen Museen zu Berlin – Stiftung Preußischer Kulturbesitz (IfM) besteht bereits seit 1981 eine vertragliche Zusammenarbeit, welche zur Zeit durch einen bis 1997 laufenden Vertrag abgesichert ist. Dank einer Förderung durch die Robert-Bosch-Stiftung konnte eine weitere Personalstelle für das Projekt 1994 gehalten werden. Im Dezember 1994 wurde die Förderung für weitere zwei Jahre bewilligt. Während dieser langfristigen Kooperation wurden mehrere Projekte zum Einsatz des Computers im Museumsbereich (besonders in den Bereichen der Inventarisierung und der Dokumentation) durchgeführt. Als Basissoftware wird dazu das in der ursprünglichen Version von der britischen Museum Documentation Association (MDA) entwickelte Programmsystem GOS benutzt. Es bietet Datenstrukturen und Verarbeitungsmoduln an, die den komplexen Datenstrukturen in diesem Bereich besonders angepaßt sind. Außerdem ist GOS sehr modular aufgebaut und dadurch leicht erweiterbar. Seit 1981 wird GOS vom ZIB kontinuierlich weiterentwickelt, wobei ein identischer Leistungsumfang und eine weitgehend einheitliche Bedienoberfläche auf den verschiedenen Hardware-Plattformen und unterschiedlichen Betriebssystemen besonders wichtig ist. Im Jahr 1994 wurden zahlreiche Detailverbesserungen an dem Programmsystem vorgenommen. Besondere Bedeutung hatten dabei Aspekte der Datensicherheit, da in einigen der beteiligten Museen inzwischen einige Verwaltungsvorgänge von der Datenbank abhängen. In diesem Zusammenhang wurden auch Möglichkeiten zu einer Vergabe von Zugriffsrechten eingerichtet, damit sensible Angaben (Versicherungswerte usw.) nicht von jedem Benutzer gelesen oder manipuliert werden können. Da weiterhin die große Mehrheit der Museen mit PC's arbeitet, wurden alle zunächst unter UNIX entwickelten Erweiterungen inzwischen auch auf DOS bzw. OS/2 übertragen. Damit steht GOS auf allen unterstützten Betriebssystemen in einer echten Mehrplatzversion zur Verfügung. Wesentlich verbessert wurden 1994 die Möglichkeiten beim Retrieval und bei der Ausgabe von Daten. Gerade die Generierung unterschiedlichster Ausgaben (Karteikarten, Inventarbücher, verschiedene Sachregister) aus den einmal erfassten Daten erhöht die Akzeptanz der EDV in den Museen, da der Übergang zur computergestützten Inventarisierung gleitend vorgenommen werden kann.

Adaptive Finite Elemente in der Thermomechanik

Bearbeiter: P. Deuffhard, F. Bornemann, R. Roitzsch, G.W. Zumbusch

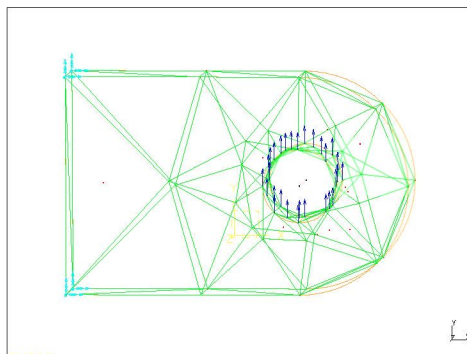
Kooperation: A. Maurer, G. Löbel, M. Baatz (Siemens AG, Erlangen)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Projekt ist eine Fortsetzung der Kooperation im Bereich der thermischen Simulation, siehe etwa das frühere Projekt zur Simulation von Aufheizprozessen in Hochleistungstransistoren mittels des Multilevel FEM Programms KASTIO 2D (Jahresbericht 1992).

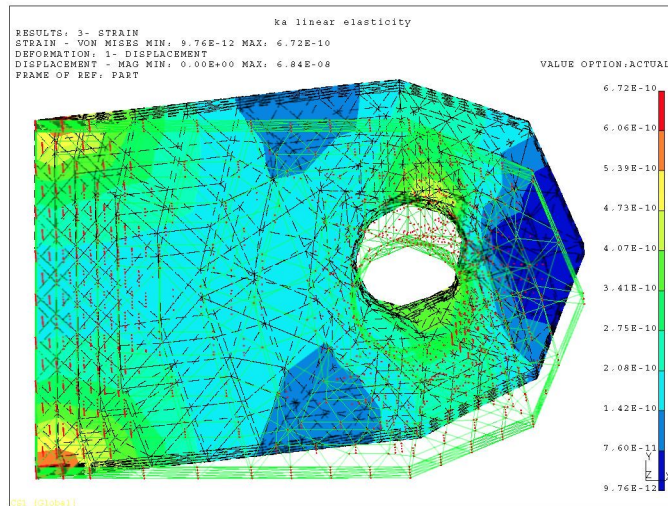
Als natürliche Erweiterung der Problemklasse wurde die Kopplung der Thermik an die Mechanik ins Auge gefaßt. Ausgehend von den Laméschen Gleichungen handelt es sich um die einseitige Kopplung eines berechneten Temperaturfeldes an eine (zunächst) lineare Elastomechanik. Diese wird geometrisch linear, voll dreidimensional und mit einem Verschiebungsansatz behandelt. Das Vorgehen entspricht der bisher verwendeten Kopplung von ADINA-T (Temperatur) mit ADINA (Verschiebungen und Spannungen).

Um eine vollständige Integration in die Entwicklungsumgebung zu erreichen, wurde Wert gelegt auf eine Kopplung mit dem kommerziellen Prä- und Post-Prozessor IDEAS (SDRC), sowohl bezüglich der Temperatur als auch bezüglich des mechanischen Teils mit seinen aufwendigeren Randbedingungen (Eingabe) sowie der Berechnung von Dehnungs- und Spannungstensoren (Ausgabe).

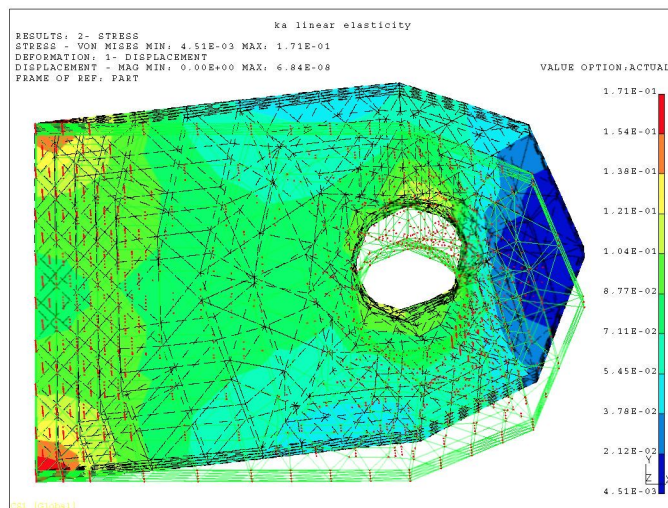
Die Aufgabe wurde mit einem speziellen h - p adaptiven Multilevel-Finite-Elemente Programm KASTELAN (KASKADE THERMISCHE & ELASTO-MECHANIK) gelöst, das die Laméschen Differentialgleichungen implementiert (siehe Grundlagenprojekt Adaptive h - p -Methoden für elliptische Randwertprobleme) und die notwendigen Schnittstellen zu KASTIO 3D und zu Prä- und Post-Prozessoren bereitstellt.



Bauteil, Geometrie und Randbedingungen



Dehnungen und Verschiebungen, verfeinertes Gitter



Spannungen und Verschiebungen, verfeinertes Gitter

Implementierung adaptiver Multilevel-FE-Methoden

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

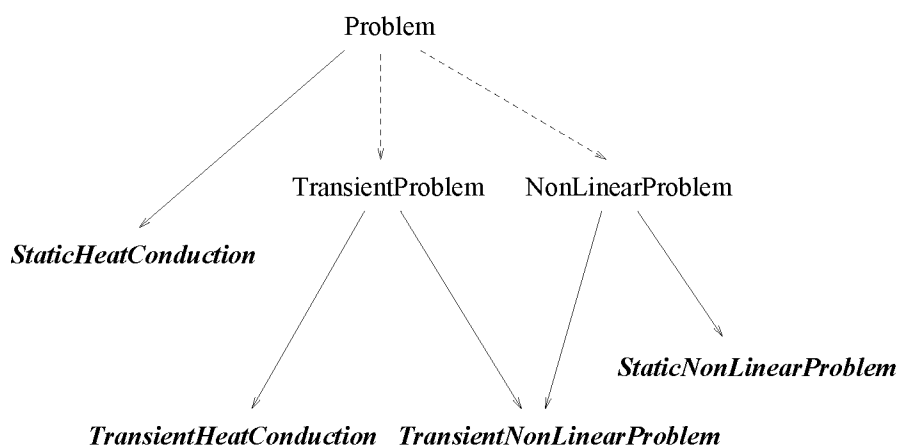
Beschreibung der Forschungsarbeit: Die C++-Version 3.0 des adaptiven Finite-Elemente-Programms KASKADE wurde im wesentlichen fertiggestellt. Funktionen der bisherigen C-Codes für elliptische und parabolische Probleme sind hier integriert und erweitert worden, insbesondere im Bereich der Multilevel-Löser und nichtlinearen Problemklassen.

Die bisherige C-Version (2.1) der KASKADE-Familie wurde weitergepflegt und ergänzt, um den bestehenden Benutzerkreis innerhalb und außerhalb des ZIB zu unterstützen.

1. Die C++-Version KASKADE 3.0: Für die Konzeption der grundlegenden neuen Version 3.0 waren folgende Punkte maßgebend:

- Es soll nur noch eine gemeinsame Version für alle Problemklassen existieren.
- Erweiterungen sollen einfach in den bestehenden Code integriert werden können.
- Sämtliche Probleme sollen mit geringem Zusatzaufwand für beliebige Raumdimensionen implementierbar sein.

Hier erwiesen sich die Mittel der objektorientierten Programmierung als außerordentlich hilfreich. Sie erleichtern es, algorithmische Konzepte der numerischen Mathematik direkt in Code-Strukturen zu übertragen. Bei der Sprache C++ bedeutet dies im wesentlichen die Verwendung von Klassenhierarchien, virtuellen Funktionen und Template-Klassen. Als Beispiel ist die Struktur der Problemklassen in nebenstehender Abbildung gezeigt.



Hierarchie der Problemklassen im C++-Code. Bei unterbrochenen Linien ist die Basis virtuell, da in diesen Zweigen mehrfache Vererbung auftritt. Kursiv gedruckte Klassen sind instanzierbar.

Zusätzlich wurden Erweiterungen in folgenden Bereichen vorgenommen:

- Stationäre und transiente nichtlineare Probleme (insbesondere Hindernisprobleme, Stefan-Probleme und Poröse-Medien-Gleichung)
- Multiplikative und additive Multilevel-Löser bzw. Vorkonditionierer, darunter monotone Mehrgitterverfahren für elliptische Variationsungleichungen [3]
- Implementierung des ‘Cascadic-Iteration’-Konzepts für elliptische Systeme [1],[2]
- Lineare Löser: Implementierung von Verfahren für unsymmetrische und indefinite Systeme (CGS, CGNR, GMRES, CR u.a.)

2. Die C-Versionen der KASKADE-Familie: Im Berichtszeitraum wurde die Version 2.1 (Standard C) von KASKADE frei gegeben.

- Integration der 3D-Version
- zusätzliche iterative Löser GMRES, CGS
- Überarbeitung der Implementierung der Cauchy’schen Randbedingungen, insbesondere in Hinblick auf Systeme
- Assemblierung konvektiver Terme
- erweiterte Graphik, insbesondere neue Behandlung der Farben, Temperaturplot, Einfärbung von Gebieten usw.
- zusätzliche Ein-/Ausgabe-Routinen
- Anpassung von Kastio (2D/3D)

Literatur

1. F. Bornemann: *On the Convergence of Cascadic Iterations for Elliptic Problems*. Preprint SC 94–8, ZIB–Berlin (1994)
2. P. Deuffhard: *Cascadic Conjugate Gradients for Elliptic Partial Differential Equations. Algorithm and Numerical Results*. In: D. Keyes, J. Xhu (eds.), *Proceedings of the 7th International Conference on Domain Decomposition Methods 1993*, AMS, Providence, pp. 29–42 (1994)
3. R. Kornhuber: *Monotone Multigrid Methods for Nonlinear Variational Problems*. Habilitationsschrift, eingereicht bei der Freien Universität Berlin (1995)

Dynamische Prozeßsimulation

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

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

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

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Rahmen der Zusammenarbeit mit dem Joseph-Egle-Institut der FHT Stuttgart soll das Austrocknungsverhalten von speziellen Mauerwerken untersucht werden. Dabei geht es um Langzeitberechnungen für den Einfluss von verschiedenen Putztechniken auf die Feuchtigkeitsverteilung, um z.B. solche Prozesse wie Ausblühungen und Absandungen an der Putzoberfläche besser zu verstehen. Das am ZIB entwickelte Programmpaket KARDOS wurde auf spezielle Anforderungen aus diesem Bereich erweitert.

Innerhalb der längerfristig angelegten Kooperation mit der BASF AG in Ludwigshafen erfolgte eine stärkere Hinwendung zu realen Berechnungen mit umfangreicher Chemie. Die Modellierung komplizierter, nichtlinearer Teilprozesse und der weitere Ausbau der Funktionalität von KARDOS führten zu positiven Impulsen für beide Seiten.

Das im Rahmen der Zusammenarbeit mit dem Institut für Chemische Verfahrenstechnik der Universität Stuttgart dort aus dem ZIB Forschungscode PDEX1M entwickelte Programmpaket PDEXPACK ist inzwischen das dortige Standardwerkzeug zur numerischen Simulation von verfahrenstechnischen Modellen geworden, die auf 1-D parabolische Systeme führen. Von Seiten industrieller Anwender wird lebhaftes Interesse an diesem Programmpaket gezeigt. Es wurde bereits von der Fa. Dornier erworben und zur Simulation des Lebenserhaltungssystems einer Raumstation eingesetzt.

Literatur

1. P. Deuffhard, J. Lang, U. Nowak: *Adaptive Algorithms in Dynamical Process Simulation*. ECMI 94, Kaiserslautern, Proceedings (erscheint 1995)

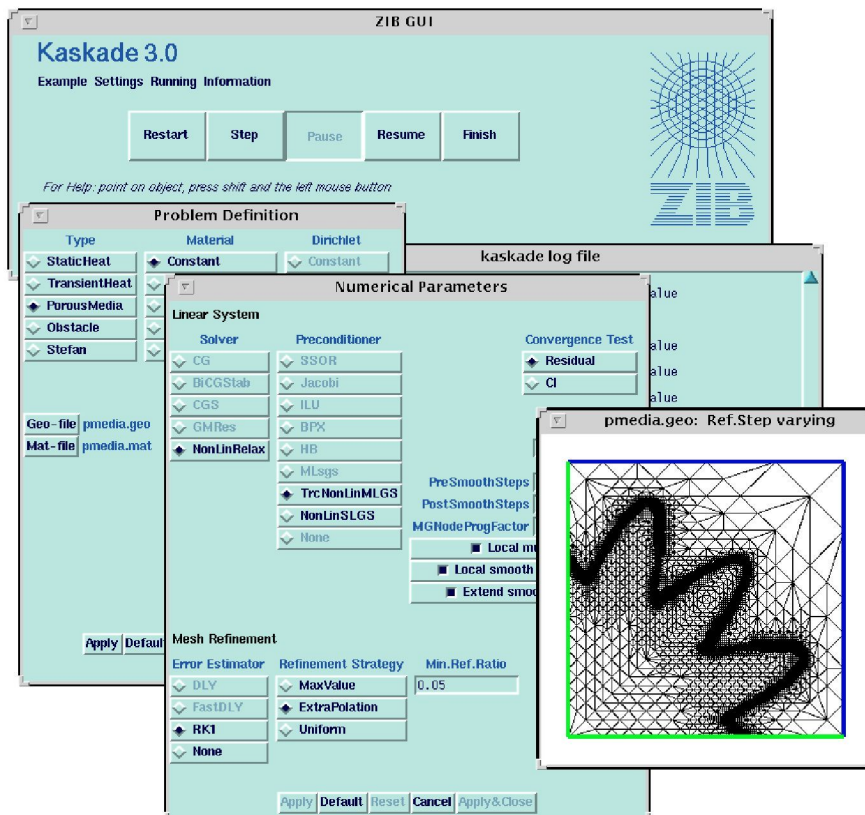
Graphische Benutzeroberflächen für Codelib Software

Bearbeiter: U. Nowak, U. Pöhle, R. Roitzsch

Beschreibung der Forschungsarbeit: Mit der Entwicklung einer graphischen Benutzeroberfläche auf Tcl/Tk-Basis (J. Ousterhout) für die numerische Software-Bibliothek CodeLib des ZIB wurde begonnen.

Der Benutzer stellt einen Parametersatz zusammen, mit dem das CodeLib-Testprogramm gestartet wird. Danach sind bisher nur einfache Eingriffe (Halt, Fortsetzen, Beenden usw.) in den Programmablauf vorgesehen. Um die Konsistenz der Parameter zu sichern, erfolgt der Zugriff auf die Parameter über eine Reihe von C-Routinen, mit zusätzlichen Schnittstellen für Fortran, C++ und Tcl.

Die Benutzeroberfläche ist von den Programmen getrennt. Für sie ist ein 3-stufiges Modell der Parameterverwaltung vorgesehen: Globale Voreinstellungen, Beispielparameter und lokale Änderungen. Die Verwaltung dieser Informationen und ihre graphische Darstellung auf dem Bildschirm erfolgt durch Aufruf geeigneter Tcl-Prozeduren. Damit kann ein einheitliches Erscheinungsbild über die Grenzen der einzelnen Anwendungen hinweg gesichert werden.



Komplexitätsuntersuchungen an Klimamodellen

Bearbeiter: P. Deuffhard, C. Deittert, F. Bornemann, Ch. Schütte

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die Motivation für dieses Projekt liegt in der Beobachtung, daß beim gegenwärtigen Stand der Klimamodellierung die üblicherweise verwendeten numerischen Methoden Grenzen setzen für die Komplexität der berechenbaren Modelle.

Während zur Verschiebung dieser Komplexitätsgrenze derzeit vor allem auf Modellvereinfachung und Weiterentwicklung der Hardware gesetzt wird, sollte auch verstärkt das Potential moderner Numerik und Informatik genutzt werden. Hierzu muß die mathematische Aufgabenstellung präzisiert werden, insbesondere um das Problem unabhängig von der in der Praxis üblichen Vermischung von Modellierung und Simulation betrachten zu können.

Aufgabe des Projektes ist es daher, die ineinandergreifenden klimarelevanten Prozesse in ihrer physikalischen Modellierung im Überblick darzustellen, sowie anhand ausgewählter Probleme die mathematische Struktur der beschreibenden Gleichungen zu untersuchen. Das Hauptinteresse richtet sich dabei auf legitime Möglichkeiten der Abmagerung und Entkopplung einzelner Modellierungen.

Es zeichnet sich ab, daß das Hauptproblem darin liegen wird, bei stark unterschiedlichen zeitlichen und räumlichen Skalen geeignete Entkopplungsstrategien zu finden und diese mathematisch abzusichern, d.h. ihre Berechtigung algorithmisch zu kontrollieren.

Des weiteren sollen im Vergleich dazu die in der meteorologischen Praxis üblichen Abmagerungen und typische Lösungen für das Problem der Skalen exemplarisch dargestellt werden.

Ziel des Projektes ist es, durch Untersuchung des Verhältnisses von numerisch-meteorologischer Praxis auf der einen, und des vom mathematischen Standpunkt aus überhaupt Möglichen auf der anderen Seite, Hoffnungen auf die Anwendbarkeit z.B. des Adaptivitäts- oder Parallelisierungskonzeptes in diesem Problemfeld zu prüfen und zu präzisieren.

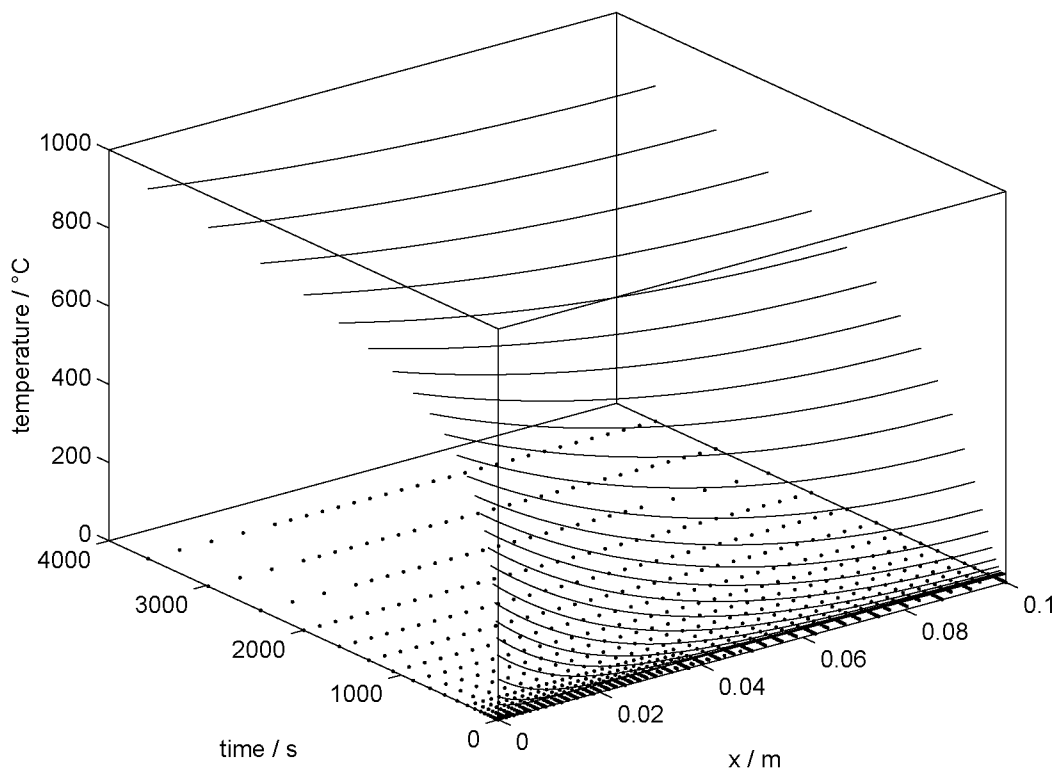
Ein erster Bericht wird 1995 erscheinen.

Thermo-elastische Bauteilsimulation im Brandingenieurwesen

Bearbeiter: G.W. Zumbusch, P. Deuffhard, J. Lang, R. Roitzsch

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

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Projekt ist eine Fortsetzung der Arbeiten aus dem Vorjahr zum Thema Thermo-inelastische Werkstoffmodellierung für Baustahl im Hochtemperaturbereich. Im Rahmen der Kooperation mit der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) soll eine numerische Simulation für das Tragverhalten brandbeanspruchter Stahlstrukturen entwickelt werden. Entsprechende experimentelle Untersuchungen werden im Laboratorium *Brandingenieurwesen* der BAM durchgeführt. Mit dem dort neu installierten Stützenprüfstand kann insbesondere durch eine gezielte zeitliche Veränderung der Lagerungsbedingungen der Stütze das Verhalten einer Bauwerksumgebung erfasst werden und die Interaktion mit einem Finite-Elemente-Programm realisiert werden.



1D Temperaturrechnung mit nichtlinearen Koeffizienten, links Einheitstemperaturkurve, rechts symmetrischer Rand, Programm KARDOS

Ziel ist die numerische Simulation einzelner Bauteile, die Simulation ganzer Systeme von Bauteilen und zuletzt auch eine Interaktion von Simulation und Prüfstand, wobei sich ein Teil real im Prüfstand befindet und das übrige System in Echtzeit simuliert wird.

Die Simulation selbst umfaßt Temperatur im Brandraum und im Bauteil und mechanische Verschiebungen und Spannungen im Bauteil. Unter der Annahme einseitiger thermisch-mechanischer Kopplung kann also zunächst das Temperaturfeld numerisch oder experimentell im zeitlichen Verlauf bestimmt werden und anschliessend für jeden Zeitpunkt der mechanische Teil simuliert werden.

Unter Vernachlässigung der Konvektion in Brandraum und in luftgefüllten Bauteilverschaltungen und mit geeigneter Modellierung der thermischen Quellen (Ölbrenner) ist die Temperaturfeldberechnung in der im Berichtszeitraum fertiggestellten 3D Version des adaptiven multilevel Finite-Elemente-Version KASTIO aus der KASKADE Familie für konstante Koeffizienten und mit der 1D Version KARDOS aus der KASKADE Familie für nichtlineare Materialien vorgesehen. Bei rein experimenteller Temperaturbestimmung ist für den nächsten Schritt kann auch (in gewissen Grenzen) eine Interpolation der Messwerte gewählt werden.

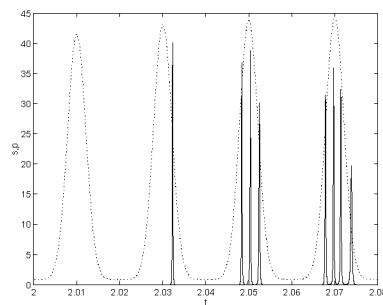
Mit geometrisch linearer, linear elastischer Theorie und bei kleiner Querkontraktion kann die Modellierung des mechanischen Teils mit dem Verschiebungsansatz der Laméschen Differentialgleichungen der Elasto-Mechanik geschehen. Unter Berücksichtigung eines inneren Quellterms durch die thermische Ausdehnung mit dem eben bestimmten Temperaturfeld kann damit eine mechanische Simulation mit dem im Berichtszeitraum geschaffenen h - p adaptiven multilevel Finite-Elemente-Programm für Thermomechanik durchgeführt werden.

Simulation der Steuerung von Relaxationsoszillationen in Lasern

Bearbeiter: Ch. Schütte

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

Beschreibung der Forschungsarbeit: Dieses Projekt ist eine Fortsetzung des gleichnamigen Projektes aus den Berichtsjahren 1992/93. Bei der technischen Konzeption von Wellenleiter-Lasern kommt der Simulation des Einflusses von technischen Parametern und äußerer Steuerung eine wichtige Rolle zu. In diesem Projekt steht das Studium der Beeinflussbarkeit von Relaxationsoszillationen in Wellenleiter-Lasern im Vordergrund. Mit Relaxationsoszillationen wird eine Serie zeitlich sehr scharfer Intensitätsspeaks bezeichnet, die beim Umschalten des Betriebszustandes des Lasers auftreten und deren technologische Kontrolle wünschenswert ist, weil sie zu starken Fluktuationen des Betriebszustandes des optoelektronischen Gesamtsystems führen können. In den letzten Jahren war ein Programmpaket zur Simulation von Relaxationsoszillationen erstellt, optimiert und auf die Berücksichtigung zeitabhängiger Störungen erweitert worden [1]. Die Grundidee besteht dabei in einer kontrollierten Glättung der zeitlichen Dynamik im Laserresonator durch Mittelung auf der schnellsten Zeitskala (Umlaufperiode). Im Berichtszeitraum wurde dieses Simulationsprogramm auf eine Reihe typischer Szenarien angewendet, wie z.B. q- und gain-switched Betrieb oder Reaktionen auf Störungen der Pumpleistung. Die Ergebnisse stehen allesamt in guter Übereinstimmung mit entsprechenden experimentellen Beobachtungen und weisen die Simulationsroutine als ein brauchbares Instrument zur Ermittlung nicht meßbarer Daten (Besetzungsdynamik) und für qualitative Voraussage (Störungsverhalten) aus.



Simulation des kontrollierten Erzeugens kurzer Folgen von Intensitätsspeaks durch Variieren der Pumpleistung im gain-switched Betrieb

Literatur

1. M. Dinand, Ch. Schütte: *Theoretical Modelling of Relaxation Oscillations in Er-doped Waveguide-Lasers*. J. Lightw. Tech., **13** (erscheint 1995)

code++: Eine C++ Klassenbibliothek für gewöhnliche Differentialgleichungen

Bearbeiter: A. Hohmann, Ch. Schütte

Kooperation: M. Wulkow (CiT GmbH, Rastede)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die Weiterentwicklung der im letzten Jahr vorgestellten C++ Klassenbibliothek für gewöhnliche Differentialgleichungen konzentrierte sich im wesentlichen auf drei Bereiche:

- Verbesserung der Integratorklassen
- Anbindung von FORTRAN Bibliotheksroutinen
- Anpassung an unterschiedliche Rechnerarchitekturen

Auf eine Anregung von U. Nowak hin wurden die Klassen für Diskretisierungen und Schrittweitensteuerungen klarer getrennt. Dadurch lassen sich nun alle zur Verfügung stehenden Diskretisierungen und Steuerungen beliebig kombinieren, ohne neue Klassen zu definieren. Die dadurch erreichte zusätzliche Flexibilität kommt insbesondere einer interaktiven Nutzung der Integratoren zugute. Beispielhaft wurde eine graphische Benutzeroberfläche für die Simulation von gekoppelten Oszillatoren (basierend auf der X-Klassenbibliothek InterViews) mit code++ verknüpft.

Bei der Lösung großer ODE-Systeme spielt eine schnelle lineare Algebra eine zentrale Rolle. Aufgrunddessen wurde die Möglichkeit geschaffen, Standardpakete z.B. für die Lösung von dünnbesetzten linearen Gleichungssystemen und Eigenwertproblemen auf einfache Weise anzubinden. Durch die C++ Schnittstellen bleiben die Details dieser Routinen verborgen, so daß sich beispielsweise dünnbesetzte Matrizen für den Benutzer (abgesehen von dem enormen Geschwindigkeitsgewinn) nicht von vollbesetzten unterscheiden.

Die Portabilität wurde im Zuge dieser Weiterentwicklungen stets im Auge behalten. Die Bibliothek wird erfolgreich auf verschiedenen Rechnerarchitekturen (z.B. SUN, SGI, IBM, PC) mit unterschiedlichen Compilern eingesetzt.

Layoutbeschreibung für Komponenten der Integrierten Optik

Bearbeiter: F. Schmidt

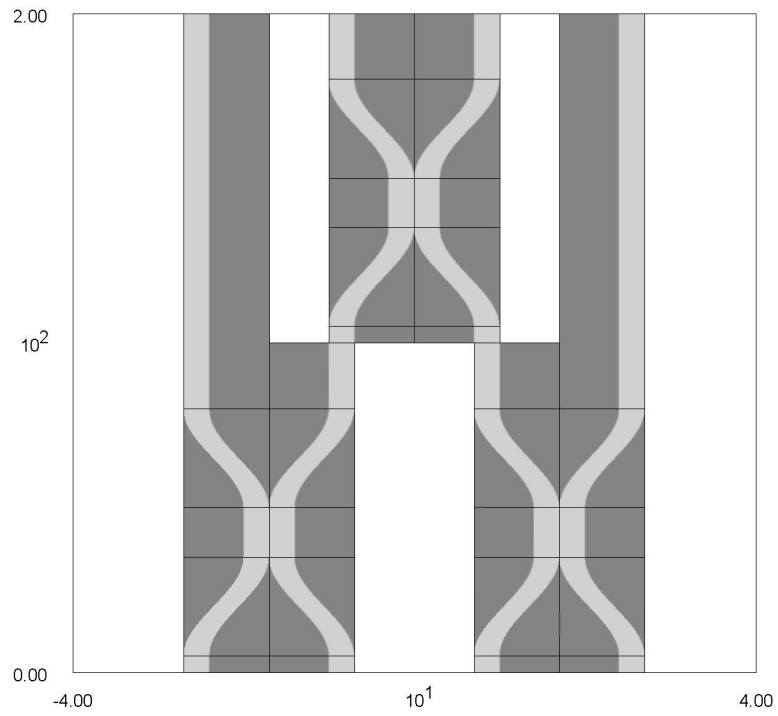
Kooperation: H.-P. Nolting (Heinrich-Herz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin GmbH)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Dieses Projekt ist Bestandteil des 1992 begonnenen Projekts zur Simulation der Lichtausbreitung in Komponenten der Integrierten Optik.

Ein 1993/94 durchgeführter internationaler Benchmark-Test [1] zeigte deutlich die höhere numerische Effizienz der adaptiven Multilevel-Methoden gegenüber den Standardverfahren. Um die Ergebnisse der bisher behandelten Teilprobleme

- Modellierung unter Verwendung der paraxialen Wellengleichung, Anpassung der adaptiven Rothe-Methode und die Konstruktion transparenter Randbedingungen

für praktische Simulationsrechnungen verfügbar zu machen, wurde ein neues objektorientiertes Softwarekonzept auf der Basis von C++ entwickelt. Ein wesentlicher Bestandteil dieses Konzepts ist ein Layout-Editor, d.h. ein Werkzeug, mit dem die Wellenleiter-Strukturen des zu simulierenden Chips beschrieben werden können. Auf den Entwurf und die Realisierung dieses Editors konzentrierte sich die Arbeit im Berichtszeitraum. Das Konstruktionsprinzip dabei ist wie folgt. Eine integriert-optische Schaltung wird in ihre einzelnen Komponenten wie z.B. X-Koppler (siehe Bild), Linsen, Gitter usw. zerlegt. Jede dieser Komponente wiederum wird aus ihren Grundeinheiten wie gerade und gekrümmte Wellenleiter oder Taper aufgebaut. Diese Elementarbausteine sind in einer Bibliothek enthalten. Sie sind jeweils auf einem Rechteckgebiet definiert und besitzen ihr eigenes Koordinatensystem. Diese Teilkomponenten werden in einem neuen, übergeordneten Rahmen mit eigenem Koordinatensystem zu einer funktionalen Einheit zusammengefaßt. Die so erzeugten Komponenten lassen sich beliebig in einem wiederum übergeordneten Rahmen, der Layout-Grundfläche, vervielfältigen und positionieren. Die notwendigen Parameter werden dem Programm über ein Textfile mitgeteilt. Auf diese Weise wird es möglich, komplizierte Strukturen durch Elementarzellen aufzubauen und einmal entworfene Strukturen immer wieder zu verwenden. Durch die Rechteckform der Elementarzellen wird die strukturelle Kompatibilität zu den bereits vorhandenen Komponentenbibliotheken gesichert.



Ausschnitt aus dem Layout einer Kopplerstruktur

Literatur

1. H.-P. Nolting, R. März, et al.: *Results of Benchmark Tests for Different Numerical BPM Algorithms*. IEEE Journal of Lightwave Technology, erscheint 1995

Hyperthermie-Planung

Bearbeiter: P. Deuffhard (Ltg.), H.C. Hege, M. Seebaß, R. Beck, B. Erdmann

Kooperation: J. Nadobny, P. Wust, R. Felix (Universitätsklinikum Rudolf Virchow, FU Berlin), P. Maass (Fachbereich Mathematik, Universität Potsdam), A. Louis (Fachbereich Mathematik, Universität Saarbrücken)

Förderung: Das Projekt wurde im Rahmen der Einzelförderung durch die DFG finanziert (in Kooperation mit der Deutschen Krebshilfe) und ist ab 1.10.94 Teilprojekt im Rahmen des neuen Sonderforschungsbereiches "Hyperthermie: Methodik und Klinik".

Beschreibung der Forschungsarbeit: Hyperthermie ist eine spezifische Methode der Tumorthherapie durch gezielte Überwärmung des Gewebes. Im ZIB wird ein Programmsystem zur Computersimulation von regionalen Hyperthermie-Behandlungen entwickelt, bei denen die Erwärmung durch elektromagnetische Wellen (im MHz-Bereich) erzeugt wird. Die Simulation kann eingesetzt werden zur:

- a) patientenspezifischen Planung einer optimalen Behandlung;
- b) Unterstützung der technologischen Weiterentwicklung der regionalen Hyperthermie.

Langfristiges Ziel ist die Entwicklung eines in der Klinik einsetzbaren Planungssystems, mit dem eine patientenspezifische Behandlungsplanung in ca. 1–2 Stunden möglich sein soll.

Die Schwerpunkte im Berichtszeitraum waren:

1. Generierung von Tetraedergittern auf der Basis von CT-Schnittbildern des Patienten
Es wurden Vorbereitungen für die Implementierung eines 3D-advancing front-Verfahrens getroffen. Bei diesem Verfahren besteht ein wesentlicher Teil des Rechenaufwandes darin festzustellen, ob sich ein neu zu generierendes Tetraeder mit der aktuellen advancing front überschneidet. Die Dreiecke der advancing front werden in einer Octree-Struktur sortiert; dadurch läßt sich besonders schnell feststellen, ob sich zwei Dreiecke überschneiden.
2. Berechnung des elektromagnetischen Feldes im Körper des Patienten
Die Feldberechnung soll analog zur Temperaturberechnung mit einem adaptiven Finite-Elemente-Verfahren erfolgen. Auf diese Art und Weise läßt sich die Diskretisierung optimal an die Gewebekonturen anpassen. Ein wesentlicher Punkt ist die Verwendung von problemgerechten Basisfunktionen; dazu wurden divergenzfreie Vektor-Elemente in das adaptive FE-Programm KASKADE implementiert.
3. Technologische Weiterentwicklung der regionalen Hyperthermie
Für zwei reale Patienten wurde anhand von Simulationsrechnungen untersucht, welchen Gewinn man erzielen kann, wenn man die Zahl der Antennen

von 8 (beim gegenwärtig verwendeten Applikator) auf 24 erhöht [2]. Es wurde ein Verfahren zur Optimierung der Temperaturverteilung nach [1] implementiert. Damit läßt sich eine optimale Ansteuerung der Antennen (nach Amplituden und Phasen) bestimmen, wenn vorher das Feld für jede einzelne Antenne berechnet wurde. Die Abbildung zeigt die optimierten Temperaturverteilungen bei Verwendung von 8 und 24 Antennen. Für den bisher verfügbaren Applikator wird die Erwärmung durch “hot spots” im gesunden Gewebe begrenzt. Diese werden in ähnlicher Form auch in der Klinik beobachtet. Bei Verwendung von 24 Antennen würde ein größerer Bereich des Körpers erwärmt; die “hot spots” im gesunden Gewebe würden dabei deutlich reduziert. Dadurch wäre es möglich, den Tumor wesentlich stärker zu erwärmen.

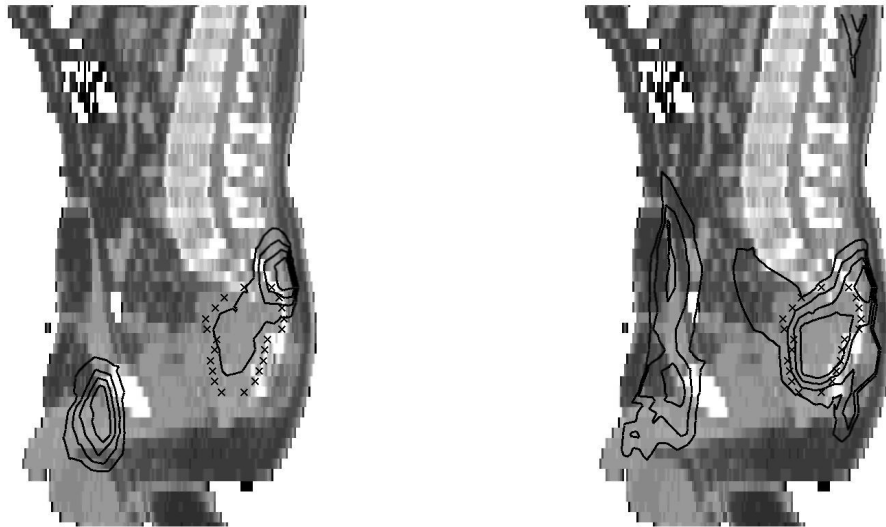


Abbildung: Optimierte Temperaturverteilungen in einem Längsschnitt (sagittal) eines Patienten bei Verwendung von 8 Antennen (links) und 24 Antennen (rechts). Die Lage des Tumors ist durch schwarze Kreuze markiert. Dargestellt sind die Isothermen für 40, 41, 42 und 43° C.

Literatur

1. K.S. Nikita, N.G. Maratos, N.K. Uzunoglu: *Optimal Steady-State Temperature Distribution for a Phased Array Hyperthermia System*. IEEE Biomedical Engineering, 1299–1306 (1993)
2. P. Wust, M. Seebaß, J. Nadobny, P. Deuffhard, G. Mönich, R. Felix: *Simulation Studies promote Technological Development of Radiofrequency Hyperthermia*. Submitted to Int. J. Hyperthermia.

Computergrafische Unterstützung bei der Hyperthermie-Planung

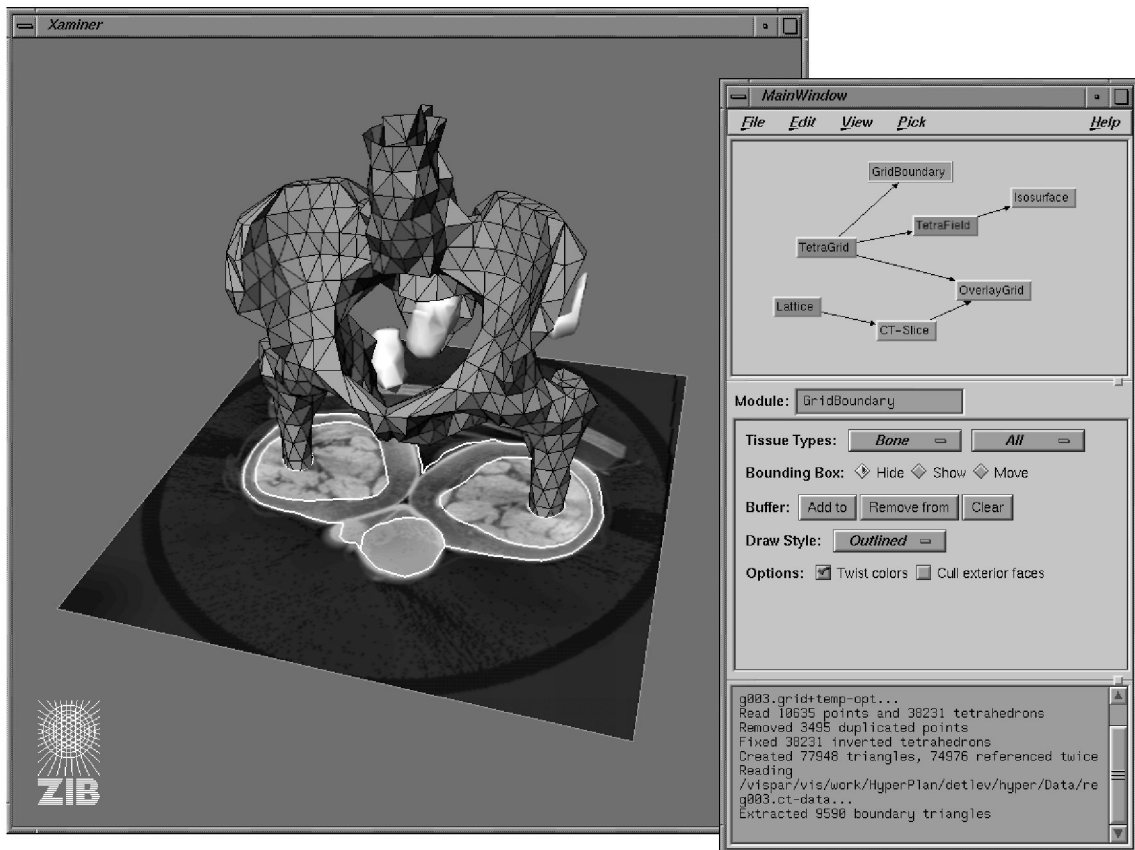
Bearbeiter: H.C. Hege (Ltg.), P. Deuffhard, D. Stalling, H. Battke

Kooperation: S. Wegner, H. Oswald (Deutsches Herzzentrum Berlin)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die Radiofrequenz-Hyperthermie als Mittel zur Krebsbehandlung beruht auf der kontrollierten Erwärmung von krankem Gewebe durch Mikrowelleneinstrahlung. Um einen optimalen Behandlungserfolg zu erreichen, ist die Durchführung umfangreicher numerischer Simulationen notwendig. Ziel dieses Projektes, das im Rahmen des im Frühjahr 1994 bewilligten Sonderforschungsbereichs "Hyperthermie: Methodik und Klinik" durchgeführt wird, ist es, alle Arbeitsschritte während der Therapieplanung durch geeignete Methoden der Computergrafik und Bildverarbeitung zu unterstützen. Zu diesen Arbeitsschritten zählen insbesondere die Segmentierung und Klassifizierung tomographischer Schnittbilder, die Erzeugung eines patienten-spezifischen Gittermodells, die Berechnung der elektromagnetischen Felder und der resultierenden Temperaturverteilung, sowie die Optimierung der Antennenparameter im Hinblick auf den gewünschten therapeutischen Effekt.

Während des Berichtszeitraums wurde mit dem Entwurf und der Implementierung eines Softwaresystems begonnen, von dem aus alle Teilaufgaben der Hyperthermie-Planung einfach und effizient durchgeführt werden können. Ende 1994 war das System soweit realisiert, daß es die gleichzeitige grafische Darstellung aller während des Planungsvorganges anfallenden Daten erlaubte. Neben Standardmethoden wie z.B. Schnittebenenberechnung und Isoflächendarstellung wurden auch anspruchsvollere Visualisierungsalgorithmen implementiert, unter anderem ein hardware-beschleunigtes Volume-Rendering-Verfahren zur Darstellung tomographischer Bilddaten und eine schnelle Linienintegral-Faltungsmethode zur Darstellung von Vektorfeldern.

Einen Schwerpunkt im Software-Entwurf nahm die Integration geeigneter 3D-Interaktionstechniken ein. Direkte Interaktion mit räumlich dargestellten Objekten ermöglicht eine besonders benutzerfreundliche Gestaltung der komplexen Segmentierungs- und Gittergenerierungsaufgaben. Aufbauend auf der Grafikbibliothek Open Inventor wurden erste Interaktionskonzepte, u.a. unter Nutzung von 3D-Eingabe- und Ausgabegeräten, entwickelt und erprobt. Besonderes Gewicht wurde weiterhin auf eine leicht erweiterbare, objekt-orientierte Programmstruktur sowie auf ein ergonomisches, leicht bedienbares graphisches Interface gelegt.



Softwaresystem für die Hyperthermie-Planung. In dem Grafikfenster sind folgende Daten dargestellt: Ein computertomographisches Schnittbild mit eingezeichneten Konturen, Grenzflächen aus einem Tetraedergitter, das aus diesen Konturen erzeugt wurde, sowie Isothermen in einer berechneten Temperaturverteilung.

Der Kontinuumslikes der nicht-kompakten Gitter-QED

Bearbeiter: H. Stüben

Kooperation: M. Göckeler (HLRZ Jülich), R. Horsley (HLRZ Jülich), V. Linke (FU Berlin), P. Rakow (FU Berlin), G. Schierholz (DESY Hamburg und HLRZ Jülich).

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die Quantenelektrodynamik (QED) in der störungstheoretischen Formulierung gilt als eine der besten physikalischen Theorien, weil ihre Vorhersagen ausgesprochen gut mit Experimenten übereinstimmen. Jedoch ist die mathematische Struktur der QED weitgehend unverstanden. Aus der Störungstheorie selbst ergeben sich Hinweise auf Inkonsistenzen, die unter dem Stichwort *Landau-Pol* bekannt sind.

Bei störungstheoretischen Rechnungen wird zunächst ein maximaler Impuls eingeführt. Der Kontinuumslikes ist der Grenzfall unendlichen maximalen Impulses. Aus der Existenz des Landau-Poles ergibt sich die Frage, ob die QED im Kontinuumslikes überhaupt wechselwirkende Teilchen beschreibt. Oder, ob sie möglicherweise freie Teilchen beschreibt, die sich völlig unabhängig voneinander bewegen. In letzterem Falle würde man die Theorie als *trivial* bezeichnen.

In diesem Projekt wird der Kontinuumslikes der QED über einen nicht-störungstheoretischen Zugang studiert. Dazu wird eine Gitterformulierung der QED — die nicht-kompakte QED mit *staggered* Fermionen — mit der Monte-Carlo-Methode untersucht. Diese Gittertheorie besitzt einen Phasenübergang zweiter Ordnung, dessen Natur zur Natur des Kontinuumslikes korrespondiert. Zum Studium des Phasenübergangs wurden der Ordnungsparameter und eine Suszeptibilitätenverhältnis auf relativ großen Gitter berechnet. Alle bisherigen Resultate deuten an, daß der Kontinuumslikes im oben beschriebenen Sinne trivial ist. Dieser Schluß soll durch zukünftige Untersuchungen zur Abhängigkeit der Resultate von der Endlichkeit der Gitter weiter gestützt werden.

Literatur

1. M. Göckeler, R. Horsley, P. Rakow, G. Schierholz, H. Stüben: *The present status of non-compact lattice QED*. Nuclear Physics B (Proc. Suppl.) **34** 527–530 (1994)
2. M. Göckeler, R. Horsley, P. Rakow, V. Linke, G. Schierholz, H. Stüben: *Probing the Continuum Limit in Non-Compact QED: New Results on Large Lattices*. ZIB-Preprint SC 94-31 (1994), erscheint in: Nuclear Physics B (Proc. Suppl.).

Die kompakte Gitter-QED mit Wilson-Fermionen

Bearbeiter: H. Stüben

Kooperation: A. Hoferichter, V.K. Mitrjushkin, M. Müller-Preußker (HUB)
T. Neuhaus (Universität Bielefeld)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Es gibt vier gängige Methoden, die Quantenelektrodynamik (QED) auf dem Gitter zu formulieren. Das Eichfeld kann kompakt oder nicht-kompakt sein und die Elektronfelder können als Wilson-Fermionen oder *staggered* Fermionen eingeführt werden. A priori ist keine dieser Formulierungen ausgezeichnet. Für die hier gewählte Formulierung sprechen die Verwandtschaft zur Quantenchromodynamik und die Tatsache, daß kompakte Eichfelder in vereinheitlichten Theorien verwendet werden.

In diesem Projekt werden vier Varianten der kompakten QED mit Wilson-Fermionen untersucht. Die Eichfelder werden in der Standardformulierung behandelt, sowie mit Modifikationen, die gewisse Diskretisierungsartefakte unterdrücken. Die Fermionen werden jeweils voll und in der *quenched* Näherung behandelt.

Ziel des Projekts ist, den Einfluß der Diskretisierungsartefakte zu studieren. Mit verschiedenen, teilweise neuen Methoden wurde zunächst ein Überblick über die Phasendiagramme gewonnen. Es ergaben sich Unterschiede zwischen Standard- und modifizierter Formulierung der Eichfelder. Die Untersuchungen werden in Zukunft durch Berechnung weiterer Größen wie Teilchenmassen und Kopplungsstärken vertieft.

Literatur

1. A. Hoferichter, V.K. Mitrjushkin, M. Müller-Preußker, T. Neuhaus, H. Stüben: *Compact lattice QED with Wilson fermions*. Preprint, DESY 94-151, HU Berlin-IEP-94/13 (1994), erscheint in: Nuclear Physics B.

Implementierung eines Kontinuum-Modells in den NDDO-Formalismus

Bearbeiter: T. Steinke

Kooperation: T. Clark, G. Rauhut (Computer-Chemie-Centrum, Universität Erlangen-Nürnberg)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Zur Berücksichtigung von Lösungsmittelleffekten auf Moleküleigenschaften im Rahmen quantenchemischer Methoden haben sich neben dem Supermolekülansatz die verschiedenen Kontinuums-Modelle (*continuum model, CM*) etabliert. CM ermöglichen eine einfache Einbeziehung von elektrostatischen Wechselwirkungen in den quantenchemischen Formalismus und gestatten eine variationstheoretische Änderung der molekularen Zustandsfunktion durch das Lösungsmittel (*self-consistent reaction field, SCRF-Zyklus*). Allen CM ist gemeinsam, daß die Polarisierung des Lösungsmittels (LM) und die damit verbundene Entstehung des Reaktionsfeldes durch Lösung der Poisson-Gleichung auf einer geeignet definierten Moleküloberfläche ermittelt wird. Die auf der Moleküloberfläche erzeugten Ladungen repräsentieren das Reaktionsfeld und werden dann in den molekularen Hamilton-Operator eingebaut. Einfache sphärische oder ellipsoidale Formen des von der Moleküloberfläche eingeschlossenen Raumes (*cavity*) führen zu analytischen Multipolentwicklungen für das Reaktionsfeld, die jedoch bei Molekülen niedriger Symmetrie zu Konvergenzproblemen im SCRF-Zyklus führen oder konformationsabhängige Solvatationsenergien nicht reproduzieren können. Unsere Implementierung basiert auf einem CM mit beliebiger Gestalt des Hohlraums, das von TOMASI et. al. für *ab initio*-Methoden entwickelt wurde. Das Reaktionsfeld kann nunmehr nur noch numerisch durch Diskretisierung der Poisson-Gleichung auf der Moleküloberfläche berechnet werden. Die Bestimmung des elektrostatischen Potentials auf der Moleküloberfläche wird mit der NAO/PC-Methode realisiert, die deutliche Vorteile hinsichtlich Geschwindigkeit und Genauigkeit gegenüber traditionellen Methoden aufweist. Neben der elektrostatischen Wechselwirkung wurde ein einfaches Modell zur Berücksichtigung der Dispersionswechselwirkung zwischen Molekül und Lösungsmittel implementiert. Erste Untersuchungen an konjugierten Heteroverbindungen zeigten, daß die Dispersionswechselwirkung in einigen Fällen wesentlich zur Solvatationsenergie beiträgt.

Literatur

1. G. Rauhut, T. Clark, T. Steinke: *A Numerical Self-Consistent Reaction Field (SCRF) Model for Ground and Excited States in NDDO-based Methods*, J. Am. Chem. Soc. **115** p. 9174 (1993)

Umgebungseinflüsse mit Kontinuums-Modellen

Bearbeiter: T. Steinke

Kooperation: T. Clark (Computer-Chemie-Centrum, Universität Erlangen-Nürnberg)

Förderung: Das Projekt wird durch die DFG gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Kontinuumsmodelle bieten innerhalb quantenchemischer Methoden auf einfacher Weise die Möglichkeit, den Einfluß von Umgebungen eines molekularen Systems (Lösungsmittel, Gerüste von makrobiologische Verbindungen) in den quantenmechanischen Formalismus einzubeziehen. Bislang werden in allen Kontinuumsmodellen die energetisch wesentlichsten Beiträge (Coulomb- und Polarisations-Wechselwirkung) in den molekularen Hamilton-Operator eingeschlossen. Unsere Untersuchungen zeigten jedoch, daß die Berücksichtigung der Dispersion in bestimmten Fällen, z.B. bei konjugierten N-Methylpyridinen zu deutlichen Änderungen der Solvatationsenergien führt. Der bisher benutzte Einzentrenansatz von OLIVARES et. al. zur Bestimmung der Dispersionsenergie zeigt bei großen und/oder unsymmetrischen Molekülen ein schlechtes Konvergenzverhalten. Im Rahmen dieses Projektes wird ein Mehrzentrenansatz, der auf der Berechnung von atomaren Multipolmomenten und Polarisierbarkeiten aus NAOs beruht, getestet. Man kann erwarten, daß die Vorteile von Mehrzentrenentwicklungen (i.a. bessere Konvergenz) einen stabilen Algorithmus zur Bestimmung der Dispersionswechselwirkung erlauben.

Literatur

1. G. Rauhut, T. Clark, T. Steinke: *A Numerical Self-Consistent Reaction Field (SCRFF) Model for Ground and Excited States in NDDO-based Methods*, J. Am. Chem. Soc. **115** p. 9174 (1993)
2. G. Rauhut, T. Clark: *Fast Calculation of Electrostatic Potentials: The NAO/PC Model*, J. Computat. Chem. **14** p. 503 (1993)

Verteilte Anwendung zur schnellen Berechnung des elektrostatischen Potentials auf Moleküloberflächen

Bearbeiter: T. Steinke

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die schnelle und möglichst genaue Berechnung des elektrostatischen Potentials auf geeignet definierten Moleküloberflächen (Van-der-Waals-Oberfläche oder die dem Lösungsmittel zugängliche Oberfläche) ist eine Voraussetzung für das interaktive Docking von interessierenden Spezies an DNA- oder Proteinsubstraten. Die Strukturgenerierung und Visualisierung der 3D-Daten lassen sich heute effektiv auf Workstations (vorzugsweise *Silicon Graphics*) implementieren. Numerisch aufwendige Berechnungen (Strukturoptimierungen, Potentialbestimmung) können dagegen sinnvoll auf Supercomputern ablaufen. Deshalb ist eine Implementierung des Gesamtsystems als *Client-Server-Modell* zweckmäßig.

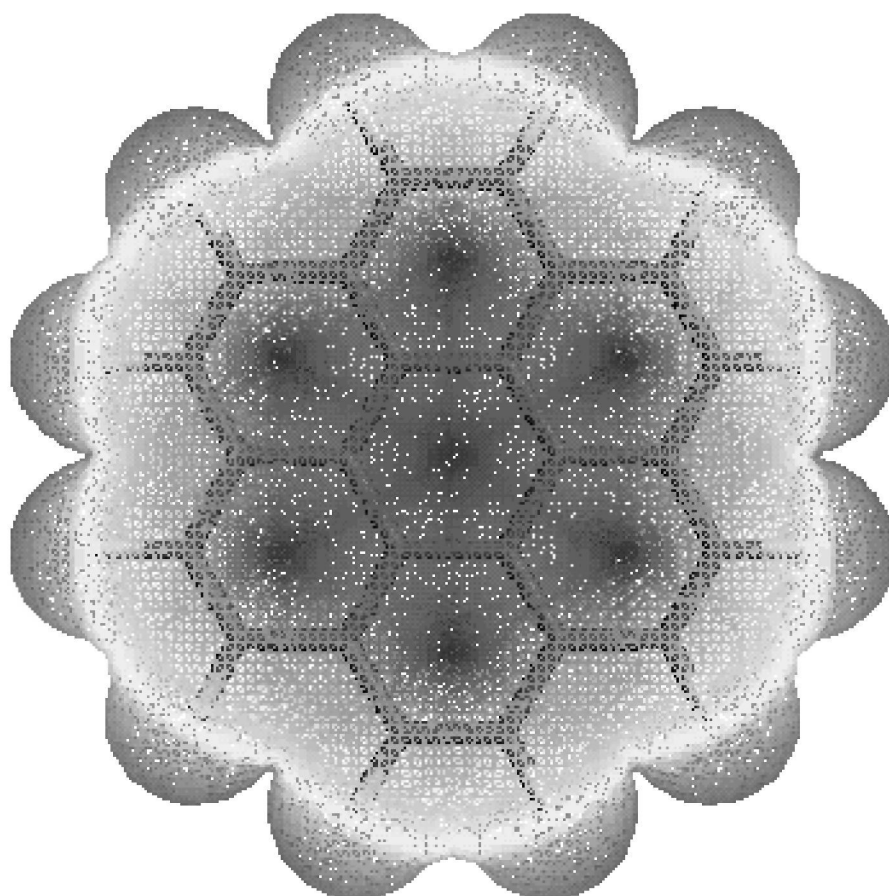
Basierend auf der Nutzeroberfläche TRAMP und der CRAY-Version des semiempirischen Programmpaketes VAMP wurde durch die Verwendung des *Application Integration Toolkit* (AIT) eine einfache Realisierung als verteilte Anwendung möglich. Moleküloberfläche und Potential werden nach dem *marching cube*-Algorithmus bzw. der NAO/PC-Methode bestimmt. Die Kommunikation zwischen dem interaktiven Prozeß auf der Workstation und dem CRAY-Server wurde von RPC auf AIT umgestellt. Damit konnte der Portierungsaufwand in der CRAY-Umgebung drastisch reduziert werden, da in AIT weitestgehend Hardwareabhängigkeiten transparent bleiben und der Zugriff auf die CRAY-Ressourcen sicherer gestaltet werden kann (Paßwortabfrage etc.).

Die Vorteile der verteilten Anwendung werden insb. bei großen Molekülen sichtbar, wenn das verbindende IP-Netzwerk eine Mindestbandbreite von 64 kbit/s bereitstellt. Da der Server auf einer Cray Y-MP mit durchschnittlich 105 MFlop/s läuft (das ist ca. 6 mal schneller als auf einer SGI Indigo 2), wird ab einer Größe von ca. 20 Atomen der Nachteil des expliziten Datentransports über das Netz aufgehoben.

20



-45



Potentialgitter der Coronens, Oberfläche mit 23173 Punkten und 46342 Dreiecken, berechnet in 2.4 s auf einer Cray Y-MP

Literatur

1. A. Augustin, F. Höring, R. König, T. Clark: *TRAMP Version 1.0*, Computer-Chemie-Centrum, Universität Erlangen-Nürnberg (1992)
2. G. Rauhut, A. Alex, J. Chandrasekhar, T. Steinke, T. Clark: *VAMP Version 5.0*, Computer-Chemie-Centrum, Universität Erlangen-Nürnberg (1993)
3. *Application Integration Toolkit (AIT), Version 2.0*, User's Guide, APG-5520 2.0, Cray Research Inc. (1992)
4. G. Rauhut, T. Clark: *Fast Calculation of Electrostatic Potentials: The NAO/PC Model*, J. Computat. Chem. **14** p. 503 (1993)

4 Wissenschaftliche Dienstleistungen

Fachinformation innerhalb der DMV

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

Kooperation: Fachinformationsbeauftragte der Mathematik, DMV, Fachinformationszentrum Karlsruhe (FIZ Karlsruhe) mit dem Zentralblatt für Mathematik, Springer-Verlag

Förderung: Das Projekt wurde durch das BMBF gefördert.

Projektbeschreibung: Das 1992 im Rahmen des “Fachinformationsprogramm der Bundesregierung 1990 – 1994” begonnene Projekt “Fachinformation” wurde im Jahr 1994 erfolgreich weitergeführt. Primäres Ziel des Projekts, dessen Leitung in den Händen des ZIB liegt, ist die Förderung der Nutzung mathematikrelevanter Online- und CD-ROM-Datenbanken in den mathematischen Fachbereichen und Instituten in Deutschland.

Die DMV-Projekt-Leitung konzentrierte sich 1994 auf

- die Intensivierung der Zusammenarbeit mit den Fachbereichen,
- den Ausbau der Kooperation mit den Datenbankproduzenten,
- die Konzeption einer zukünftigen elektronischen Infrastruktur in der Mathematik.

Die Kooperation mit den Fachbereichen erhielt inhaltlich eine neue Dimension. Die Fachbereiche wurden in die Diskussion neuer Konzeptionen für die Zukunft elektronischer Information und Kommunikation in der Mathematik einbezogen. Die DMV-Projekt-Leitung bot den Fachbereichen Hilfestellung zum Aufbau eigener elektronischer Informations- und Kommunikationsangebote an.

Konkret sah die Zusammenarbeit mit den Fachbereichen wie folgt aus:

- Workshops im DMV-Projekt. Wie es inzwischen gute Tradition im DMV-Projekt ist, fanden auch 1994 zwei Workshops innerhalb des Projekts statt. Der erste Workshop (18.–20.02.94 in Paderborn) war ein gemeinsames Meeting des DMV-Projektes mit dem Euromath Advisory Board. Zentrales Thema war wie auch beim zweiten Workshop (27.–29.6.94 in Halle) der Aufbau und die Perspektiven einer elektronischen Infrastruktur in der Mathematik. Für Details verweisen wir auf den separaten Beitrag zu dem Workshop in Halle.
- Mailing-Listen. Die Mailing-Listen innerhalb des Projekts erfüllen drei wesentliche Aufgaben. Zum einen verteilen sie Informationen über neue elektronische Informationsquellen (z.B. elektronische Journale, elektronischen

Konferenzen zu speziellen Themen) an die Fachinformationsbeauftragten in den Fachbereichen. Zum zweiten sind die Mailing-Listen Diskussionsforum für die Fachinformationsbeauftragten. Nicht zuletzt dient die Liste auch dazu, organisatorische Informationen effektiv und ohne Zeitverzug zu verteilen.

- Qualifizierungsmaßnahmen. Um den Aufbau eigener Informationsserver in den Fachbereichen zu unterstützen, fand am 19. und 20. Dezember an der FU Berlin ein erstes Tutorial zu dem Informationssystem Hyper-G statt.
- Umfrage. Die DMV-Projekt-Leitung führte Ende 94 eine Umfrage zu den technischen, personellen und organisatorischen Voraussetzungen und dem gegenwärtigen Stand der Nutzung elektronischer Information und Kommunikation in den Fachbereichen durch.
- Persönliche Kontakte.

Die DMV-Projekt-Leitung hat im Jahr 1994 ihre Zusammenarbeit mit den Datenbankproduzenten, also vorrangig dem Fachinformationszentrum Karlsruhe und dem Springer-Verlag, intensiviert. Diese Kooperation bezog sich sowohl auf konkrete Schritte zur Verbesserung der Datenbanken als auch auf konzeptionelle Aspekte. Konkrete Verbesserungen für die Datenbanknutzer sind:

- Gewährleistung einer hohen Aktualität der Online-Datenbank. Anfang 94 hatte die Datenbank MATH sehr große zeitliche Rückstände von der Erfassung einer Arbeit bis zur Aufnahme in die Online-Datenbank. Erst durch den Druck aus dem DMV-Projekt wurde über eine Änderung der Update-Strategie der Datenbank MATH dieses Defizit abgebaut.
- Neue Version der CD-ROM Datenbank. Die durch das DMV-Projekt initiierte Erstellung einer neuen Version der CompactMATH (für das Betriebssystem DOS) wurde 1994 fertiggestellt. Damit wurde die CompactMATH wesentlich aufgewertet. Eine UNIX-Version der Datenbank befindet sich in der Entwicklung.
- Neue Preisgestaltung. Im Rahmen der konzeptionellen Überlegungen für das Zentralblatt wurde den Fachbereichen ein attraktives Angebot vorgelegt, das es den Fachbereichen erlaubt, zu einem günstigen Festpreis die gedruckte Version des Zentralblatts und/oder die Online-Version des Zentralblatts und/oder die CD-ROM Version des Zentralblatts zu beziehen. Der eigentliche Vorteil besteht darin, daß die Nutzer nur einen Basisbetrag für den Zugang zu den Daten zu zahlen haben, der durch geringe Aufpreise für das gewünschte Medium ergänzt wird. Insgesamt sinken für die Kosten der Nutzer gegenüber dem bisherigen Preisgefüge.

- Einrichtung eines WWW-Servers am Zentralblatt. Seit Juli 94 existiert ein WWW-Server des Zentralblatts, der im beschränkten Umfang den kostenfreien Zugriff auf die CD-ROM-Daten erlaubt und weitere elektronische Informationen, u.a. auch ein elektronisches Journal enthält.

Langfristige Absicherung der Projektziele

Darüber hinaus war die DMV-Projekt-Leitung in die Erstellung eines Konzepts für die zukünftige Entwicklung des Zentralblatts involviert. Hier haben wir den Standpunkt vertreten, daß die Datenbanknutzung in ein umfassendes Konzept für eine konsistente Informationversorgung in der Mathematik integriert werden muß, um langfristig Bestand zu haben. Für ein solches Gesamtkonzept hat die DMV-Projekt-Leitung im letzten Jahr umfangreiche Vorarbeiten geleistet. Dieses bedarf der Abstimmung sowohl innerhalb als auch über die Grenzen der Mathematik hinaus. So begannen im Herbst 94 Gespräche der DMV mit der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG) und der Gesellschaft für Informatik (GI) mit dem Ziel, die künftigen Aktivitäten auf dem Gebiet der elektronischen Information und Kommunikation zu koordinieren und auf diesem Gebiet zu kooperieren. Auch hier ist die DMV-Projekt-Leitung wesentlich beteiligt. Die inhaltlichen Aspekte dieser Arbeiten sind in dem Projektvorschlag "Verteiltes Informationssystem für die Mathematik" dargestellt.

Zusammenfassend möchten wir einschätzen, daß das DMV-Projekt "Fachinformation" breite Zustimmung und Nutzung in den Fachbereichen gefunden hat und daß dieses Projekt die Grundlagen für den Aufbau einer neuen elektronischen Informations- und Kommunikationsstruktur in den Fachbereichen gelegt hat.

Literatur

1. W. Dalitz, M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber: *Neue Wege für die Fachinformation — Am Beispiel der Mathematik*. DFN-Mitteilungen, **34**, 4–7 (1994)

Verteiltes Informationssystem für die Mathematik

Bearbeiter: W. Dalitz, M. Grötschel, G. Heyer, J. Lügger, W. Sperber

Kooperation: Fachinformationsbeauftragte der Mathematik, DMV und Fachgruppen der DMV, Deutsche Physikalische Gesellschaft (DPG), Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh); Gesellschaft für Informatik (GI), Fachinformationszentrum Karlsruhe (FIZ Karlsruhe) mit dem Zentralblatt für Mathematik, Springer-Verlag, Heidelberger Akademie der Wissenschaften

Projektbeschreibung: Das Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (BMBF) bereitet ein neues Förderprogramm auf dem Gebiet der elektronischen Information und Kommunikation vor. Schon im Jahre 1993 hat er, damals als “Bundesminister für Forschung und Technologie” (BMFT), die Leitung des DMV-Projekts “Fachinformation” aufgefordert, neue Perspektiven für die Fachinformation zu entwickeln, die bis in das Jahr 2000 und möglichst auch darüber hinaus reichen. Die DMV und das Konrad-Zuse-Zentrum erwarten, daß in diesem Bereich ein grundsätzlicher Wandel in Richtung auf elektronische Informationsangebote durch die Wissenschaften selbst eintreten wird und bereiten in diesem Zusammenhang ein neues Projekt der DMV vor, das “Verteilte Informationssystem für die Mathematik”.

Die neue Konzeption sieht vor, daß sich die mathematischen Fachbereiche und Forschungsinstitute sowie mathematische Forschungslabors aus der Industrie auf der technischen Basis des Internet und seiner weltweit verbreiteten Informationsdienste (World Wide Web, Hyper-G, Gopher, ftp und E-mail) miteinander vernetzen und so ihre örtlichen, mathematischen Ressourcen untereinander und zugleich auch weltweit verfügbar machen. Die Partner des Projekts, zu denen auch die Informationsversorger der Mathematik gehören sollen, wie z.B. wissenschaftliche Bibliotheken und Verlage sowie das FIZ Karlsruhe, planen die folgenden Aktivitäten:

- Einrichtung von *elektronischen Informationsstationen* (Server & Clients)
- *Verteiltes* elektronisches Angebot von *Preprints* und Skripten (Volltexte)
- *Verteiltes* elektronisches Angebot von *Software- und Datensammlungen*
- Zugriff auf beliebige elektronische *Informationssysteme in der Mathematik*
- Schaffung einer Organisationsform für *elektronisches Reviewing*
- Konzeption und Realisierung eines *elektronischen mathematischen Journals*
- Elektronisches Angebot von eingescannten *historischen Dokumenten und Büchern*

- Organisation eines *Lebenden Mathematischen Museums*
- Zugriff auf *elektronische Kataloge von Bibliotheken*, Bereitstellung von Volltexten durch Bibliotheken
- Erprobung von Verfahren zur *elektronischen Lieferung von Dokumenten*
- *Elektronische Projektorganisation*.

Die Bereitstellung von Technik reicht für das Projekt allerdings keineswegs aus. Deshalb soll die schon im vorangegangenen DMV-Projekt “Fachinformation” bewährte personelle und organisatorische Infrastruktur erhalten bleiben und weiterentwickelt werden, insbesondere der Kreis der bereits aktiven Informationsbeauftragten der Mathematik.

Diese Konzeption wurde erstmals anlässlich einer Tagung über “Die Zukunft elektronischer Fachinformation insbesondere in der Mathematik” (im Dezember 1993) vorgestellt und anschließend in elektronischer Form [1] weit verteilt und diskutiert, dann entsprechend ergänzt und publiziert [2] [4] [5], auch auf europäischer Ebene [3]. Sie fand national und international breite Zustimmung, insbesondere auch seitens der “Konferenz der Mathematischen Fachbereiche” (KMathF). Dieses Projekt erlangte auch durch eine Reihe von Vorträgen (siehe dort unter Grötschel und Lügger) weite Publizität. Verschiedene Institutionen haben auch schon mit der Realisierung einiger Teilvorhaben begonnen, obwohl das Projekt noch nicht einmal beantragt ist:

- Über 40 mathematische Institutionen haben eigene WWW-Server errichtet, darunter das FIZ Karlsruhe und das “Zentralblatt”.
- Das Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik baut den Web-Server der DMV und das ZIB baut einen Web-Server der “International Mathematical Union” (IMU) auf.
- Die Fachgruppen “Optimierung” und “Scientific Computing” der DMV betreiben eigene Web-Server und elektronische Diskussionslisten.
- Die DMV bereitet ein voll-elektronisches, universelles, mathematisches Journal vor, die “Documenta Mathematica”. Das “Zentralblatt” bietet die “Beiträge zur Algebra und Geometrie” elektronisch an.
- Einige Fachbereiche bieten ihre Bibliothekskataloge online im WWW an.
- Das ZIB betreibt verschiedene elektronische Diskussionslisten zur Vorbereitung des Projekts, auch gemeinsam für DMV, DPG und GI.

Zur Förderung und Unterstützung der gemeinsamen Ziele bereiten DMV, DPG, GDCh und GI eine Kooperationsverarbeitung vor, u.a. um entsprechende Mittel

vom BMBF und anderen Organisationen der Forschungsförderung zu akquirieren. Die Antragstellung für das geplante Projekt kann erst erfolgen, wenn das BMBF seine zukünftigen Ziele und Förderschwerpunkte auf dem Gebiet der elektronischen Information und Kommunikation bekannt gegeben hat, was in naher Zukunft erfolgen soll.

Literatur

- [1] W. Dalitz, M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber: *Neue Perspektiven eines verteilten Informationssystems für die Mathematik*. Vorläufige (elektronische) Version vom 11. Januar 1994, ZIB–Berlin
- [2] W. Dalitz, M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber: *Neue Perspektiven eines verteilten Informationssystems für die Mathematik*. Rundbrief der GAMM; Sept. 1993, 8–28; als Report TR 94-7 des ZIB auch elektronisch verfügbar
- [3] W. Dalitz, M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber: *New Perspectives of a Distributed Electronic Information System for Mathematics*. Newsletter of the European Mathematical Society; Part I: EMS Newsletter, No. 13, Sep. 1994, pp 6–17, Part II: EMS Newsletter, No. 14, Dec. 1994, pp 6–14; als Report TR 94–8 des ZIB auch elektronisch verfügbar

Elektronische mathematische Informationsangebote der Abteilung Software-Information

Bearbeiter: W. Dalitz, G. Heyer

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)

Projektbeschreibung: Das ZIB bietet jetzt schon seit über 5 Jahren der mathematischen Community einen kostenfreien Zugriff auf nunmehr über 1 Gbyte an mathematischen Algorithmen, Daten und Dokumenten aus allen Bereichen des wissenschaftlichen Rechnens. Der Ausbau der verschiedenen Server und Services ging auch im Berichtszeitraum weiter. Neben den schon traditionell zu nennenden Zugriffsmöglichkeiten wie ftp, E-Mail, gopher und WWW, haben wir auch einen Server mit dem neuen Hypertextsystem Hyper-G aufgebaut, das mehrere fortschrittliche Konzepte der Informationsverwaltung in sich vereinigt. So wird jedes mit diesem System aufgebaute Informationsangebot automatisch in einer Datenbank indexiert und damit durchsuchbar. Da eine Änderung nur mit systemeigenen Werkzeugen möglich sind, wird das Informationsangebot stets konsistent gehalten. Auf diese Art werden die vielen Nachteile bestehender Systeme weitgehend vermieden und der administrative Aufwand langfristig reduziert. Die Kompatibilität zu bestehenden Informationssystemen erlaubt es uns, diese mittelfristig durch Hyper-G zu ersetzen.

Die im Jahre 1998 in Berlin stattfindende Welttagung der Mathematiker in Berlin (ICM'98) wird von der Abteilung auf einem Hyper-G basierenden Server elektronisch auf- und vorbereitet. Ebenso ist der zentrale Server der International Mathematical Union (IMU) hier beheimatet. Neben der Selbstdarstellung der IMU ist er als ein zentraler Anlaufpunkt gedacht, um die wachsende Anzahl der mathematischen Server in aller Welt zu erreichen. Ausgebaut wurde auch die Verwaltung verschiedener von der Abteilung betreuter elektronischer Mailinglisten. Ein in der Abteilung betreutes Werkzeug ermöglicht jetzt die einheitliche Verwaltung verschiedener Diskussionslisten. Durch die Kopplung mit dem Hyper-G Server ist für ausgewählte Listen auch erstmals eine sinnvolle Archivierung mit Retrievalmöglichkeiten gegeben.

Literatur

- [1] J. Lügger, W. Dalitz: *Verteilung mathematischer Software mittels elektronischer Netze: Die elektronische Softwarebibliothek eLib*. Konrad-Zuse-Zentrum, Technical Report TR 91-2 (1991)

Berliner Regionales Testbed (BRTB) – Projekt

Bearbeiter: H. Busch, S. Schulz

Förderung: Das Projekt wurde durch das BMBF und den DFN gefördert.

Projektbeschreibung: Anfang 1993 wurde vom “Verein für die Förderung eines Deutsches Forschungsnetz e.V.” (DFN-Verein) das Projekt “Regionale Testbeds – RTBs” ausgeschrieben. Dieses Projekt hat das Ziel, in mehrere Regionen Deutschlands eine beschränkte Anzahl von Institutionen breitbandig zu vernetzen und neue Anwendungen, die einen Bedarf an hohen Übertragungsraten haben, einzusetzen. Diese Regionen sollen in einem zweiten Schritt breitbandig miteinander verbunden werden.

Eine Reihe von Wissenschaftseinrichtungen aus Berlin und Brandenburg bewarben sich Anfang Januar 1994 mit insgesamt dreißig Anwendungen unter der Federführung des ZIB – Abteilung Höchstleistungsrechner – um die Realisierung eines solchen Testbeds.

Mitte 1994 erhielten die Regionen Bayern, Berlin, Nordrhein–Westfalen und Norddeutschland von insgesamt acht Bewerbern einen Zuschlag. Die einzelnen Projekte aus Brandenburg sind insbesondere wegen des aufwendigen Anschlusses an das Berliner Wissenschaftsnetz aus dem Projekt herausgefallen. Die Laufzeit des Projektes beträgt zwei Jahre.

Durch die notwendigen Nachverbesserung der Projektinhalte und die aufwendige Vertragsstruktur konnte das Projekt erst zum 1.10.1994 offiziell starten. Im ZIB werden von den insgesamt fünf Berliner Anwendungsprojekten zwei realisiert:

- Einheitliche Datenumgebung auf heterogenen Rechnersystemen (Projektverantwortlicher: G. Maierhöfer)
- Visualisierung wissenschaftlicher Daten (Projektverantwortliche: H.C. Hege, H. Stüben)

Die restlichen drei Anwendungen werden von der Fraunhofer–Gesellschaft, Institut für Software und Systemtechnik (“Ein Hotline und Consulting System im Regionalen Testbed”), der FUB, Wirtschaftswissenschaftliches Rechenzentrum (“Hypermedia–Lehreinheiten in der Studentenausbildung”) und dem Universitätsklinikum Benjamin Franklin in Kooperation mit der TUB, Institut für Technische Informatik (“Medizinische Bilderverarbeitung”) durchgeführt.

Das Landesamt für Informationstechnik (LIT) plant seit 1993 ein landeseigenes Behördennetz und vernetzt dafür die Berliner Behördenstandorte über Lichtwellenleiter mit fünfzig Fasern. Von diesen stehen der Berliner Wissenschaft zehn Fasern zur Verfügung. Damit konnte bei der Bewerbung um ein RTB die Infrastruktur für die Region Berlin als Eigenbeitrag eingebracht werden. Die notwendigen Geräte für die Inbetriebnahme des Netzes werden vom DFN–Verein

(BMBF) gestellt. Sie wurden im September 1994 vom DFN-Verein bestellt und mit einigen Verzögerungen im Laufe des Dezembers zum Testen an die TUB ausgeliefert. Sie werden im 1. Quartal 1995 an die folgenden Standorte ausgeliefert und in Betrieb genommen:

- Rechenzentrum der FUB
- Rechenzentrum der TUB
- Rechenzentrum der HUB
- ZIB
- Institut für Software und Systemtechnik (FhG)
- Hahn-Meitner Institut (im Rahmen des Projektes “Visualisierung wissenschaftlicher Daten”)

Das neu entstehende RTB-Netz (siehe Abbildung) wird mit einer Bandbreite von 155 Mb/s arbeiten und auf der Basis der ATM-Technik beruhen. Das Netz soll im Frühjahr 1995 in Betrieb genommen werden.

ΠΘ

ΒΛΒ-ΠΓΓ

Netzverteilte Visualisierung

Bearbeiter: J.C. Bachmann, H.C. Hege, U. Schwarz, H. Stüben, J. Becker, A. Friedrich, R. Holzlöhner, F. Meissner, D. Limbach, J. Schmidt-Ehrenberg, M. Zöckler

Kooperation: mit den Arbeitsgruppen von S. Heß (TUB, Institut für Theoretische Physik), W. Jugelt (HUB, Institut für Organische und Bioorganische Chemie), P.J. Kuntz (HMI, Bereich Theorie), U. Pinkall (TUB, FB Mathematik), T. Schmidt (HMI, Bereich Datenverarbeitung und Elektronik), H. Schwandt (TUB, FB Mathematik), E. Sedlmayr (TUB, Institut für Astronomie und Astrophysik), F. Thiele (TUB, Hermann-Föttinger-Institut für Thermo- und Fluid-dynamik)

Förderung: Das Projekt wurde durch das BMBF und den DFN gefördert.

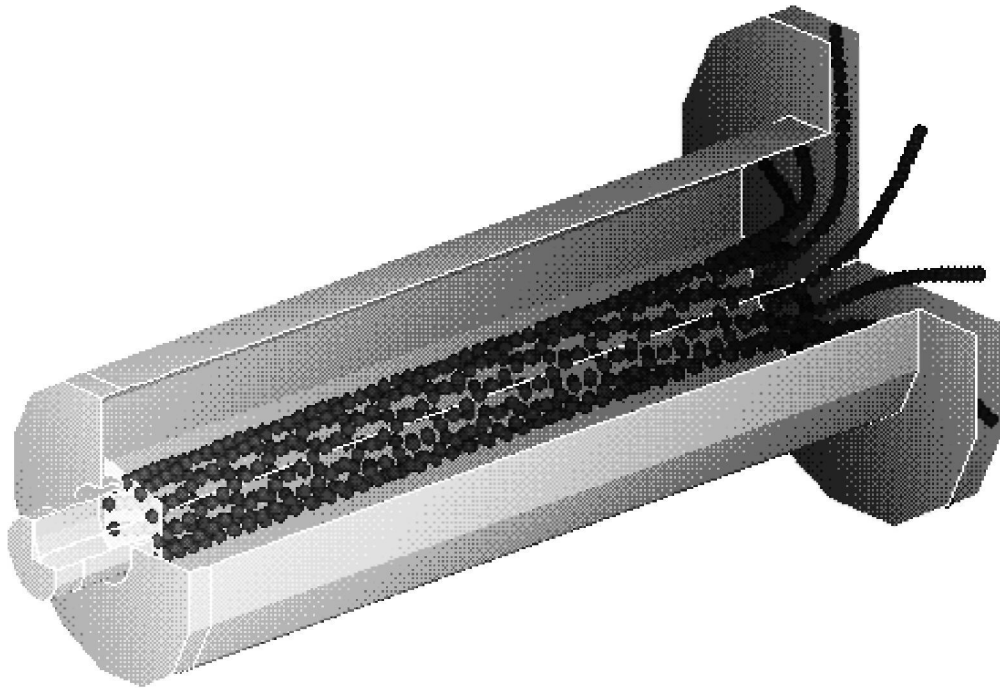
Projektbeschreibung: Im Herbst/Winter 1994 wurden bundesweit vier "Regionale Testbeds" (RTBs) mit Anwendungsprojekten gestartet. Diese Projekte haben das Ziel, neue Anwendungen in der Wissenschaft zu demonstrieren, die durch Breitbandnetze möglich werden. Beim vorliegenden Projekt handelt es sich um eines der Anwendungsprojekte (BRTB-Visual) im Rahmen des Berliner "Testbeds".

Ziel dieses Projektes ist es, eine Infrastruktur aus Soft- und Hardware zu entwickeln, die es erlaubt, Simulationen und Visualisierungen durch Nutzung im Netz vorhandener Ressourcen ökonomisch durchzuführen. Hierzu werden in enger Kooperation mit ausgewählten Pilotanwendern Werkzeuge entwickelt, die eine visuelle Kontrolle und interaktive Steuerung von Simulationen wie auch von Postprocessing-Schritten an entfernten Rechnern ermöglichen. Es werden eine Palette von Visualisierungssystemen zur netzweiten Nutzung bereitgestellt und unterschiedliche Verteilungsszenarien durch entsprechende Entwicklungen unterstützt. Weitere Schwerpunkte sind die Adaption von Visualisierungssoftware zum Einsatz auf Hochleistungsrechnern und zur netzverteilten Nutzung, sowie die Entwicklung von Werkzeugen zur Remote-Videoproduktion (Preview von Bewegtbildern, Filmschnitt-Editor, Videoaufzeichnung). Für zentral installierte Bildspeicher- und Videoaufzeichnungssysteme sollen geeignete Mechanismen zur verteilten Nutzung entwickelt werden.

Nach Projektbeginn im Okt. 94 stand die Einarbeitung der neuen Projektmitarbeiter und die detaillierte Anforderungsermittlung im Vordergrund. Für letzteres wurde in den Pilotanwendungen der gesamte Produktionsprozeß, von der Erzeugung der Simulationsdaten bis hin zum fertigen Video, durchlaufen. Es zeigte sich, daß die hierbei auftretenden Probleme vorwiegend anwendungsspezifischer Natur sind, jedoch auch generelle Software-Lücken bestehen.

Auf Grundlage dieser Erfahrungen wurden Schwerpunkte definiert und ein Projektplan für jede der Pilotanwendungen erstellt. Mit der Entwicklung möglichst generischer Werkzeuge wurde begonnen. Diese umfassen Software für Remote-Videoaufzeichnung, netzverteilten Videoschnitt und Zugriff auf Superrechner aus Visualisierungsumgebungen heraus sowie eine Bibliothek zur Erstellung von Remote-Simulationssteuerungen. Auf Basis vorhandener Programmsysteme wie AVS und IRIS Explorer wurden auch eine Reihe anwendungsspezifischer Visualisierungsprobleme exemplarisch gelöst.

Mitarbeiter des Projektes beteiligten sich darüberhinaus an der Entwicklung einer neuen, auch verteilt einsetzbaren Visualisierungsumgebung (Oorange), die derzeit bei einem der Pilotanwender (Arbeitsgruppe U. Pinkall, Sfb 288, TUB) entsteht.



Visualisierungsbeispiel aus einer netzverteilten Anwendung (Simulation von Strömungsvorgängen in einer Brennkammer), erstellt in Zusammenarbeit mit dem Hermann-Föttinger-Institut der TUB

Einheitliche Datenumgebung auf heterogenen Rechnersystemen

Bearbeiter: G. Maierhöfer, M. Beier, P. Müller

Kooperation: BRTB-Projekte *hotcon* (Frauenhofer Gesellschaft – FhG, Institut für Software- und Systemtechnik (ISST))

Förderung: Das Projekt wurde durch das BMBF und den DFN gefördert.

Projektbeschreibung: Mit dem Aufbau des Berliner Hochgeschwindigkeits-MAN im Rahmen des *Berlin Regional Testbed* (BRTB) werden zwangsläufig verschiedene (*heterogene*) Rechnerarchitekturen verbunden. Will ein Nutzer (z.B. im Rahmen des Verteilten Rechnens) diese heterogenen Architekturen einsetzen, muß er sich derzeit noch mit den jeweiligen Systemphilosophien bzw. den Dateisystemen und Namenskonventionen der Zielsysteme auseinandersetzen. Im Sinne einer orthogonalen Erweiterung des Verteilten Rechnens benötigt man einen einheitlichen Namensraum und einen einheitlichen Zugriff auf verteilte Daten. Das derzeit in der Regel eingesetzte *Network File System* (NFS) ist aber dafür nur bedingt geeignet, denn es ist weder effizient noch ist es sehr sicher. Mit Hilfe des *Andrew File System* (AFS) oder – wenn für die benötigten Architekturen verfügbar – des *Distributed Computing Environment/Distributed File Service* (DCE/DFS), kann ein einheitlicher Namensraum und ein (effizienter) einheitlicher Datenzugriff in einer heterogenen Rechnerumgebung zur Verfügung gestellt werden. Auf welcher Maschine – welcher *Architektur* – die Daten liegen, wird für den Nutzer dann transparent. Auf mehrere physikalische Maschinen verteilte Client-Server-Applikationen sind in einer AFS- bzw. DCE/DFS-Umgebung mit geringerem Aufwand zu programmieren als in einer AFS(DCE/DFS)-losen. Nach der Testphase am ZIB werden AFS Installationen bei den Projektpartnern erfolgen. Es wurde die AFS Software beschafft und – jeweils AFS-Clients und AFS-Server – auf drei Maschinen (mit unterschiedlicher Sun-Hardware) des ZIB installiert. Auf einer SGI-Maschine des BRTB-Projektes *visual* wurde ein AFS-Client installiert und auch zeitweise aktiviert. Gleichzeitig wurde ein Konzept für einen einheitlichen Namensraum erarbeitet, das mit den Projektpartnern diskutiert werden wird, um für die Nutzer eine adäquate Arbeitsumgebung (einen *Datenraum*) zu schaffen. Der Einsatz von drei Server-Maschinen eröffnet gleichzeitig die Möglichkeit durch Datenreplikation, eine hohe Ausfallsicherheit zu gewährleisten, da System- und Applikationssoftware einmal auf einem Masterserver und gleichzeitig auf zwei Replikaservern abgelegt ist. Damit wird erreicht, daß ohne manuelle Eingriffe ein beliebiger Datenserver ausfallen kann und beim gleichzeitigen Ausfall von zwei Servern mit relativ geringen manuellen Eingriffen die Verfügbarkeit der Software erhalten bleibt. Dieses Verhalten wurde mit Hilfe der Pilotinstallation am ZIB getestet.

Kooperationsprojekte mit der Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung (GMD)

Seit 1987 kooperiert das ZIB mit dem Forschungszentrum für offene Kommunikationssysteme der GMD (GMD-FOKUS) im Rahmen verschiedener Projekte der DeTeBerkom. Im Berichtszeitraum waren vier Mitarbeiter des ZIB zur GMD abgeordnet und arbeiteten dort unter der fachlichen Verantwortung der GMD in den Fachbereichen Offene Verteilte Multimediale Anwendungen (OVMA) sowie Netzwerktechnologie und Hochleistungsprotokolle (NTHP) an den nachstehenden Projekten.

Offene Verteilte Multimediale Anwendungen

Bearbeiter: Klaus-D. Engel

Kooperation: GMD-FOKUS/Fachbereich OVMA, diverse Industrie- und Forschungsinstitutspartner in den verschiedenen Projekten der DeTeBerkom (IBM, DEC, SNI, L&U, HP, SEL, MacConsult, FhG, TU Berlin, u.a.)

Projektbeschreibung: Zielsetzung des Fachbereiches “Offene Verteilte Multimediale Anwendungen” der GMD-FOKUS ist die Unterstützung der Zusammenarbeit (joint working) von Nutzern der verschiedensten Anwendungsgebiete. Diese reichen vom medizinischen über den Verlagsbereich bis hin zum privaten Nutzer. Hierzu werden Forschungs- und Entwicklungsarbeiten auf den Gebieten “Multimediale Elektronische Post (Multimedia Mail)”, “Multimediale Zusammenarbeit (Multimedia Collaboration)” und “Globalzugreifbare Dienste (Globally accessible Services)” betrieben, die alle unter dem Obergebiet der “Multimedialen Teledienste (Multimedia Teleservices)” zusammengefaßt werden können. Die Arbeiten zeichnen sich dadurch aus, daß sowohl heterogene Software- als auch Hardwareplattformen zum Einsatz kommen. Der Hardwarebereich umfaßt PCs bis hin zu speziellen Workstations.

Im Berichtszeitraum bestand eine Mitarbeit im Rahmen der folgenden BERKOM-Projekte:

- Konzeption/Realisierung multimedialer Teledienste (BERMMTS) 7/92–3/95,
- Weiterentwicklung der Multimedia Teledienste (BERMME) 1/95–12/96,
- Konzeption und Realisierung von Multimedia Mail (BERMMM) 9/94–1/95.

Der Schwerpunkt der Tätigkeit lag in diesen Projekten auf dem Gebiet der Erzeugung, Speicherung, Verwendung und Auflösung externer Referenzen auf multimediale Dokumente. Hierbei werden insbesondere auch zeitbehaftete Informationstypen (Video und Audio) unterstützt. Es wurden Dienste entwickelt und

implementiert, die die Erzeugung, Speicherung und Auflösung externer Referenzen auf der Basis des ISO-Standards 10031 (Distributed Office Applications Model) ermöglichen. Diese Dienste wurden im Hinblick auf realzeitbehaftete Medien (Audio und Video) erweitert. Die Entwicklungen kommen u.a. auf folgenden Hardwareplattformen zum Einsatz: SUN (Sun-OS und Solaris), NeXt, IBM PC, Dec Alpha, HP, SGI. Die Dienste wurden zunächst auf einer OSI-Plattform entwickelt. Sie werden derzeit auf andere Plattformen (z.B. OMG/CORBA) portiert. Sie setzen auf OSI-Netzen oder TCP/IP-Netzen auf und können sowohl Schmalbandnetze (z.B. Ethernet) als auch Breitbandnetze (ISDN-B, ATM) nutzen.

Mit den Projekten "Multimedia Collaboration" (Conferencing, Joint Working) und "Globally accessible services" (Interactive TV, Video-on-demand, etc.) findet ein Software- und Gedankenaustausch statt, so daß die Kooperation sich z.T. auch auf diese Gebiete erstreckt.

Netzwerktechnologie und Hochleistungsprotokolle

Bearbeiter: C. Doelter, K. Jacobsen, M. Vogelsänger

Kooperation: GMD-FOKUS/Fachbereich NTHP, diverse Industrie- und Forschungsinstitute in RACE- und DeTeBerkom Projekten (IBM, BT, Oxford University, TU Berlin, Siemens, SNI, Bosch-Telenorma, usw.)

Projektbeschreibung: Im Rahmen des BERKOM-Projektes "BERMATE — Bergate mit ATM-Erweiterung" und des RACE-Projektes "LACE — Local Applied Customer Environment for Integrated Communications" wurden ein Inhouse ATM-LAN installiert, ein ATM-Netzadapter entwickelt und der Protokollstack zur Unterstützung des BERKOM Multimedia-Service MMM (Multimedia Mail) und MMC (Multimedia Collaboration) spezifiziert und implementiert. Der auf ST-II/XTP basierende Protokollstack wurde auf SUN-Sparc Rechnern in zwei verschiedenen Versionen implementiert; eine, bei der Applikations- und Kommunikationssoftware auf dem Host ablaufen, und eine weitere, bei der ein Frontendrechner die Kommunikation übernimmt und damit das Hostsystem entlastet. Der entwickelte ATM-Netzadapter ist modular aufgebaut und dadurch für ein breites Einsatzspektrum geeignet. Die Multiprozessor-Architektur und der Einsatz von FPGA-Bausteinen ermöglichte eine schnelle Anpassung an noch zu entwickelnde oder geänderte Standards. Verschiedene ATM Adaptation Layer (AAL) können durch einfaches Laden der Firmware vom Host bearbeitet werden. Der Austausch eines Moduls ermöglicht es, unterschiedliche physikalische Übertragungsmedien (z.B. TAXI oder SONET/SDH) zu verwenden. Das entwickelte TAXI-Interface kann wahlweise mit Leitungsgeschwindigkeiten von 100Mb/s bzw. 140Mb/s betrieben werden.

Effektiver Einsatz von Höchstleistungsrechnern in der Materialforschung

Bearbeiter: S. Bartmann

Kooperation: Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM), Berlin

Projektbeschreibung: Die Schwerpunkte dieses Projektes sind:

- Sicherstellung angemessener und stabiler Produktionsbedingungen im ZIB für die Rechenaufträge der BAM.
- Laufende Anpassung der technischen Datenkommunikation an den sachlich gebotenen technischen Stand.
- Optimierung von Software für den Höchstleistungsrechner.
- Methodische und technische Unterstützung der Endbenutzer in der BAM

Ein Arbeitsschwerpunkt im Berichtszeitraum war die Einrichtung eines modernen Graphikarbeitsplatzes und die Implementierung verteilter Anwendungen zwischen diesem Arbeitsplatzrechner und den Vektorrechnern des ZIB. Als technische Basis dieser verteilten Anwendungen dienen die in der BAM hauptsächlich eingesetzten Finite-Element-Programme ADINA und ABAQUS sowie die Graphik-Programme der Firmen CRAY Research und IWIS GmbH.

Die Kooperation mit der BAM umfaßt darüber hinaus auch die Entwicklung und Erschließung neuerer Rechenmethoden für ingenieurwissenschaftliche Anwendungen im Bereich der Materialforschung und –prüfung. Dieses Gebiet der Kooperation wird vom Forschungsbereich des ZIB betreut. Über die Projekte im Rahmen der Kooperation wird in Kapitel 3 berichtet.

Paralleles und verteiltes Rechnen

Bearbeiter: F. Fuchs–Kittowski, M. Grammel, H.C. Hege, G. Skorobohatyj, R. Wunderling

Beschreibung der Entwicklungsarbeiten und Serviceprojekte:

Anwenderunterstützung zur Programmierung des T3D-Parallelrechners: Im Hinblick auf die Installation des T3D-Parallelrechners am ZIB im November 1994 hat sich die Gruppe *paralleles Rechnen* vorab mit dessen Architektur, den damit verbundenen, teils neuartigen Programmiermodellen und der Programmierung des Rechners in C++, C und FORTRAN befaßt. Hierzu wurden über Netz Testläufe auf einem parallelen T3D-System sowie Emulationsläufe auf Y/MP-Systemen der Firma Cray Research in Eagan/USA, durchgeführt. Die hierbei gewonnenen Erkenntnisse und praktischen Erfahrungen wurden in Vorträgen, einer Vielzahl von Beratungsgesprächen und durch Dokumente an potentielle Nutzer des ZIB-T3D weitergegeben; die Dokumente stehen über den ZIB-WWW-Server zur Verfügung. Alle ZIB-internen Beratungsdienste zu den Themenbereichen paralleles und verteiltes Rechnen werden derzeit von der Arbeitsgruppe geleistet.

Implementierung und Parallelisierung von Kernalgorithmen der kombinatorischen Optimierung: Es wurden einige neuere Varianten des Minimum-Cut Algorithmus von Nagamochi/Ibaraki zur Bestimmung eines minimalen Schnittes in einem ungerichteten Graph implementiert und getestet, bei denen kein Maximalflußproblem gelöst wird, sondern Kanten bzw. Knoten kontrahiert werden. Die Variante nach Nagamochi/Ono/Ibaraki stellte sich als besonders effizient heraus; sie ist um den Faktor drei bis acht schneller als der Minimum-Cut-Algorithmus von Hao/Orlin, dem bis dato schnellsten. Wesentlich ist dabei die Kontraktionsreihenfolge, die als sogenanntes “legal ordering” der Knoten definiert ist und zur Laufzeit bestimmt wird; der Algorithmus ist daher nicht zur Parallelisierung geeignet. Das betreffende Programm wurde in die MATHPROG-Sammlung aufgenommen.

Daten- und Programmsammlung für den Bereich Mathematical Programming/Kombinatorische Optimierung: Die über das Netz zugänglichen Online-Sammlungen MP-TEST-DATA und MATHPROG von Testdaten bzw. Programmen wurden weiter ergänzt; sie stehen jetzt auch über den WWW-Server des ZIB zur Verfügung.

Visualisierungsservice

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

Kooperation: U. Weinberg (Hochschule für Film und Fernsehen und Fa. Terratools, Babelsberg), S. Träger, D. Urbaniak (Fa. Terratools, Babelsberg), E. Suschke (Humboldt–Universität zu Berlin)

Beschreibung der Entwicklungs– und Serviceprojekte: Schwerpunkte waren, wie auch in den Vorjahren, die Bereitstellung einer geeigneten Geräteausstattung, die Auswahl, Beschaffung und Anpassung von Fremd–Software, die Entwicklung eigener Visualisierungs–Software und die Durchführung von Projekten der Wissenschaftlichen Visualisierung.

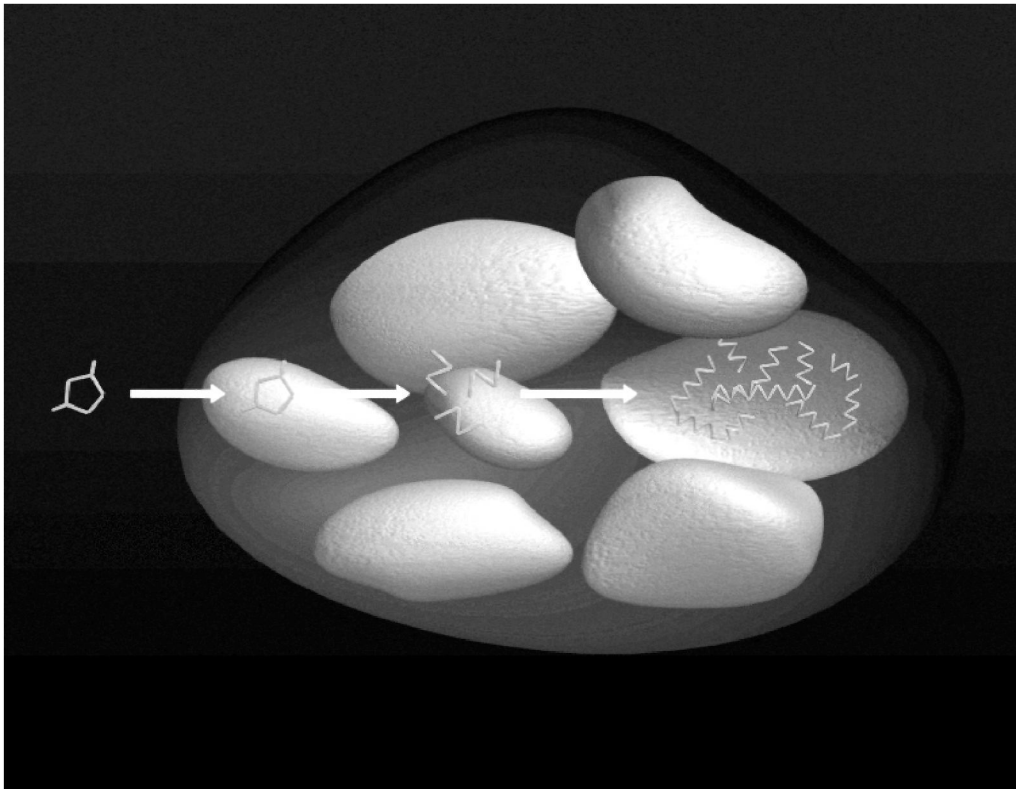
Filmische Dokumentation der wissenschaftlichen Arbeit des ZIB: Im ersten Halbjahr wurden erhebliche Anstrengungen unternommen, um den schon im Vorjahr begonnenen Film zur Darstellung der Arbeits- und Forschungsschwerpunkte am ZIB fertigzustellen. Die Hauptarbeit an den Computeranimationssequenzen wurde von der Gruppe *Visualisierung* im ZIB durchgeführt. Die Realaufnahmen, der endgültige Schnitt und die Vertonung wurden in Zusammenarbeit mit einer Videoproduktionsfirma erstellt.

Ausbau und Pflege der Geräteausstattung: Durch Installation eines plattenbasierten Videosequenzspeichers zur digitalen, unkomprimierten Aufzeichnung von Videofilmen wurde endlich eine Lücke in der Videogeräteausstattung geschlossen. Nach Überwindung technischer Schwierigkeiten konnte das Gerät in die bestehende Videoausstattung integriert werden und trägt nun die Hauptlast bei der Aufzeichnung rechnererstellter Videosequenzen. Zur flexibleren Nutzung der Videogeräte wurden diese in einem Rack mit Rangierfeld untergebracht, welches ein wahlfreies Koppeln der Geräte ermöglicht. Zur Herstellung hochwertiger Farbausgaben für Präsentationszwecke wurde ein Farbsublimationsdrucker beschafft und in Absprache mit der Abt. Interne RZ–Dienste Software entwickelt, die es erlaubt, Farbanpassungen benutzerfreundlich vorzunehmen.

Software–Evaluierung und –Weiterentwicklung: Für die interaktive Visualisierungsumgebung IRIS–Explorer 2.2 wurden neue Software–Module entwickelt, die über den FTP–Server des ZIB allgemein verfügbar gemacht werden. Die auf der Basis von GRAPE entwickelte Software zur Visualisierung von Daten auf Tetraedergittern wurde neu strukturiert. In einer internen Studie wurden mehrere kommerzielle sowie frei verfügbare Builder für graphische Benutzungsoberflächen verglichen. Es zeigte sich, daß keines der getesteten Produkte den speziellen Anforderungen, wie etwa Kompatibilität mit unverzichtbaren Software–Paketen, genügte; im Rahmen einer Studienarbeit wurde daher mit der Entwicklung einer eigenen Klassenbibliothek zur Erstellung von GUIs begonnen.

Software-Pflege: Wie in den vergangenen Jahren oblag die ZIB-interne Bereitstellung und Adaptierung von Grafik- und Visualisierungssoftware der Gruppe *Visualisierung*.

Anwender-Betreuung und -Information: Mitarbeiter aller Abteilungen des ZIB wurden in Grafik- und Visualisierungsfragen beraten und unterstützt. In Zusammenarbeit mit der Abt. Vektorrechner wurde ein Video- und Visualisierungsservice für externe Nutzer der ZIB-Rechner aufgebaut; des weiteren wurden Planungen und Vorarbeiten für das "Regionale Testbed für Breitbandnetze in der Region Berlin/Brandenburg" durchgeführt, siehe Projekt *Netzverteilte Visualisierung*. In Kooperation mit K. Polthier (FB Mathematik, TU Berlin) wurde im Sommer 1994 das institutsübergreifende "*Berliner Colloquium für Wissenschaftliche Visualisierung*" etabliert und monatlich am ZIB durchgeführt.



Visualisierung zur Simulation des Aufbaus biologischer Polymere (Standbild aus dem ZIB-Film)

Einsatz der Informationstechnik im Museum

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

Kooperation: Deutsches Historisches Museum, Bayerisches Nationalmuseum, Museum für Völkerkunde (Staatliche Museen zu Berlin), Museum für Volkskunde (Staatliche Museen zu Berlin), Museen in den neuen Bundesländern

Projektbeschreibung: 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 einen Kooperationsvertrag mit dem Institut für Museumskunde der Staatlichen Museen geregelt.

Mit dem Deutschen Historischen Museum (DHM) besteht seit September 1991 ein direkter Kooperationsvertrag. Am DHM wird GOS auf etwa 60 zum großen Teil vernetzten PC's unter dem Betriebssystemen OS/2 und DOS eingesetzt. Dabei wurden bisher (Januar 1995) etwa 120.000 Objekte nach einem sehr ausführlichen Kategorienschema (ca. 320 Kategorien) inventarisiert. Der Gesamtbestand des DHM wird auf ungefähr 600.000 Objekte geschätzt.

Seit Mitte 1992 gibt es eine intensive Zusammenarbeit mit dem Bayerischen Nationalmuseum in München. Im Sommer 1994 konnte die im Vorjahr projektierte Computergestützte Standortverwaltung den routinemäßigen Betrieb aufnehmen und die bisher manuell geführte Standortkartei ersetzen. Die Datenerfassung wurde von einem externen Erfassungsbüro vorgenommen, wodurch die umfangreichen Daten (160.000 Karteikarten mit durchschnittlich 350 Zeichen) sehr schnell, aber ohne inhaltliche Überarbeitung vorlagen.

Die für die Verwaltung der Objekte wichtigsten Angaben (Inventarnummer, Standortangabe) wurden bereits normalisiert und werden bei Neueingaben bzw. Korrekturen kontrolliert.

Im Herbst 1994 begann am Museum für Volkskunde der Staatlichen Museen zu Berlin ein Projekt zur Erfassung der kompletten Kartei (ca. 200.000 Objekte). Im Gegensatz zum Bayerischen Nationalmuseum wird die Erfassung hier von ABM-Kräften hausintern vorgenommen. Ziel des Projekts ist auch hier eine computerunterstützte Vereinheitlichung der vorhandenen Quellen bzw. die Gewinnung von geeigneten Schlagworten aus beschreibenden Texten.

Auch am Museum für Völkerkunde der Staatlichen Museen zu Berlin wird GOS in verschiedenen Abteilungen zur Inventarisierung benutzt.

Mitte 1992 wurde gemeinsam mit dem Institut für Museumswesen ein Projekt zur computermäßigen Umsetzung eines in der ehemaligen DDR für die meisten Museen verbindlichen Handbuchs zur Inventarisierung begonnen. Trotz der Auflösung dieses Instituts zum Jahresende 1993 konnte das Projekt durch eine Förderung der Robert-Bosch-Stiftung weitergeführt werden. An diesem Projekt sind zur Zeit (Januar 1995) etwa 25 Museen aus den neuen Bundesländern beteiligt.

5 Rechenzentrum

5.1 Aufgaben und Organisation

Das Rechenzentrum hat folgende Aufgaben:

- Betrieb und Ausbau des Landeshöchstleistungsrechners als Dienstleistungsangebot des ZIB an Universitäten und Forschungseinrichtungen im Land Berlin und im Norddeutschen Vektorrechnerverbund (NVV),
- Erschließung der anderen Höchstleistungsrechner im NVV für Benutzer aus Berlin,
- Unterstützung der Forschungsarbeit des ZIB durch Planung, Beschaffung und Erhaltung der Ausstattung mit Software und Geräten der Kommunikations- und Informationstechnik.

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

5.2 Ausbau des Landeshöchstleistungsrechners

Der Berliner Landeshöchstleistungsrechner bestand am Anfang des Berichtszeitraums aus einem Vektorrechner CRAY X-MP/216 als Computeserver (zwei Vektorprozessoren, 128 MByte Hauptspeicher, 1 GByte SSD) und einem Vektorrechner CRAY Y-MP2E/264 als File- und Computeserver (zwei Vektorprozessoren, 512 MByte Hauptspeicher). Die Konfiguration ist in Abbildung 1 dargestellt.

Die im vorigen Jahresbericht (1993) skizzierten Ausbaupläne konnten im Berichtszeitraum fast vollständig realisiert werden. Im September 1994 wurde mit der Cray Research Inc. ein Vertrag über einen heterogenen Parallelrechner, bestehend aus 256 RISC-Prozessoren und 4 Vektorprozessoren mit 16,5 GByte (verteilt) Hauptspeicher sowie Peripheriegeräten für Datenspeicherung und Rechnernetzanschluß geschlossen. Ferner wurde ein Multiprozessorvektorrechner CRAY J932 mit 8 Gigabyte gemeinsamem Hauptspeicher und 16 Vektorprozessoren vorgesehen, um der im vorigen Jahresbericht geschilderten Forderung nach großem Hauptspeicher auch für Benutzer der Vektorrechner entsprechen zu können. Als erste Ausbaustufe dieser Konfiguration wurde am 21. November 1994 ein massiv paralleler Rechner CRAY T3D SC192-464 installiert, in den der vorhandene File- und Computeserver integriert wurde. Damit stand am Jahresende am Berliner Landeshöchstleistungsrechner die etwa zehnfache Rechenleistung (im Vergleich zur Konfiguration am Jahresanfang) zur Verfügung.

Die Kapazität des Archivspeichers konnte im Berichtszeitraum verdoppelt werden (durch Verbesserungen in der Bandaufzeichnungstechnik), während die Plattenspeicherkapazität auf das dreifache gesteigert werden konnte. Diese Konfiguration war zum Zeitpunkt der Installation (21.11.94) der leistungsstärkste Supercomputer in Deutschland. Hervorzuheben ist, daß es im Rahmen eines Kooperationsvertrages mit dem Weierstraß-Institut Berlin (WIAS) gelungen ist, öffentliche Investitionsmittel sinnvoll zu kumulieren. Durch eine Beteiligung an dem Kaufpreis konnte das WIAS Rechenzeit in entsprechendem Umfang zugesichert erhalten; gleichzeitig konnte der Parallelrechner mit höherer Leistungsfähigkeit auf einer kostengünstigeren Basis bereitgestellt werden. Bestandteil der im November gelieferten Konfiguration war eine direkte ATM-Anbindung des T3D. Wegen Verzögerungen beim Projekt "Berlin Regional Testbed" konnte diese Anbindung aber im Berichtszeitraum lediglich in Verbindung mit einer speziellen Gegenstelle im Prozeßrechenzentrum der TUB in Betrieb genommen werden. Der Vektorrech-

ner CRAY X-MP/216 war bereits am Jahresanfang 1994 gegen ein System CRAY Y-MP4D/464 ausgetauscht worden. Diese Erweiterung wurde von der Herstellerfirma aufgrund einer Bitte des Berliner Senators für Wissenschaft und Forschung im Rahmen des Wartungsvertrages kostenneutral vorgenommen, als Beitrag der Firma zur Förderung der Forschung in Berlin und den neuen Bundesländern.

5.3 Software–Ausbau im Berichtszeitraum

Zur Versorgung der Anwendungsbereiche mit den Schwerpunkten

- Theoretische Chemie
- Theoretische Physik
- Ingenieurwissenschaften
- Umweltwissenschaften

konnte das Angebot an kommerziell entwickelter und Public-Domain-Software weiter ausgebaut werden. Zentrales Ereignis war auch für den Software-Bereich die Vorbereitung auf und schließlich die Installation des neuen Parallelrechners CRAY T3D im November 1994, so daß bereits binnen Jahresende die ersten Anwendungsprojekte auf dem neuen Parallelrechner in Betrieb gehen konnten.

Betriebssysteme

Als offenes Betriebssystem wird weiterhin UNIX in herstellerspezifischen Versionen von Cray Research, Silicon Graphics und Sun Microsystems auf den zentralen Rechnersystemen des ZIB eingesetzt. Auf den Vektorrechnern CRAY Y-MP wurde die Betriebssystemversion UNICOS 8.0 installiert. Der Parallelrechner CRAY T3D wird unter dem Mach-basierten UNICOS MAX in enger Kopplung mit dem integrierten UNICOS Host CRAY Y-MP4E betrieben. Für die Vorrechner *ufer* und *aventurin* ist für 1995 der Übergang auf die aktuellen Betriebssystemversionen SunOS 5.3 und IRIX 5.3 geplant.

CRAY Y-MP	CRAY T3D	SPARCserver <i>ufer</i>	Indigo <i>aventurin</i>
UNICOS 8.0	UNICOS MAX 1.2	SunOS 4.1	IRIX 4.0.5H

Compiler

Die Programmentwicklung für den Landeshöchstleistungsrechner erfolgt größtenteils in Fortran 77. Dieser Compiler wird auf allen zentralen Rechnersystemen in seiner jeweils aktuellen Version eingesetzt. Der neue Standard Fortran 90 konnte sich für den Bereich des Landeshöchstleistungsrechners bisher noch nicht durchsetzen. Im Informatikbereich gibt es einen Trend in Richtung C und insbesondere C++. Pascal wird wegen der geringen Nachfrage über das Jahr 1995 hinaus nicht mehr angeboten werden.

CRAY Y-MP	CRAY T3D	SPARCserver <i>ufer</i>	Indigo <i>aventurin</i>
CF77 6.0	CF77_M 6.0	Sun F77 1.4	Fortran 77 3.4
CF90 1.0		NAGware f90 2.0a	
SCC 4.0	SCC_M 4.0	Sun ANSI C 1.1	ANSI C 1.1
		GNU C 2.3	GNU C 2.3
C++ 1.0	C++ 1.0		C++ 3.0
		GNU C++ 2.3	GNU C++ 2.3
Pascal 4.2			
Lisp			

Programmierwerkzeuge

Mit den CrayTools stehen für den Landeshöchstleistungsrechner effiziente Werkzeuge zur Programmentwicklung und -optimierung (Debugger und Performance Utilities) zur Verfügung. Dies gilt mit Einschränkung auch für den neuen Parallelrechner CRAY T3D, allerdings muß hier das Angebot an Programmierwerkzeugen noch ausgebaut werden, um die Anwender bei der Entwicklung und Portierung ihrer Programme besser unterstützen zu können. Für verteilte Client-Server-Anwendungen wird auf allen zentralen Rechnersystemen im ZIB der de-facto Standard PVM in der von Cray Research optimierten Version Cray Network PVM-3 eingesetzt. Diese Version ist vollkompatibel zu der Public-Domain-Version PVM 3.3 des Oak Ridge National Laboratory. PVM steht als Cray MPP PVM-3 auch als Message Passing System auf dem Parallelrechner CRAY T3D zur Verfügung. Darüberhinaus bietet Cray Research mit der Shared Memory Access Library ein speziell für CRAY T3D entwickeltes und effizientes Message Passing System an. Zusätzlich wurden auf dem Parallelrechner der neue Message Passing Standard MPI sowie das vom Argonne National Laboratory und der GMD entwickelte Message Passing System PARMACS installiert, um die Portierung von Anwendungen, die mit den gleichen Message Passing Systemen bereits auf anderen Parallelrechnern entwickelt wurden, zu unterstützen.

CRAY Y-MP	CRAY T3D	SPARCserver <i>ufer</i>	Indigo <i>aventurin</i>
CrayTools 1.2	CrayTools 1.2		
Cray Network PVM-3	Cray MPP PVM-3	Cray Network PVM-3	Cray Network PVM-3
AIT 2.0			
	MPI		
	PARMACS 6.0		
	Shared Memory Access Library		

Bibliotheken

Für den Numerikbereich stehen wie bisher mit den CrayLibs sowie den IMSL Libraries (in Fortran 77) und den NAG Libraries (in Fortran 77 und C) effiziente Unterprogramm-bibliotheken zur Verfügung. Ergänzt wurde dieser Bereich um die IMSL Parallel Libraries (Fortran 77) für die Vektorrechner CRAY Y-MP. Für den neuen Parallelrechner CRAY T3D stehen bisher nur die CrayLibs Verfügung. Die Bereitstellung weiterer Bibliotheken (von IMSL und NAG sowie ScaLAPACK) ist für den Parallelrechner geplant.

CRAY Y-MP	CRAY T3D	SPARCserver <i>ufer</i>	Indigo <i>aventurin</i>
CrayLibs 1.2 (BLAS, FFT, LINPACK, EISPACK, LAPACK)	CrayLibs 1.2 (BLAS, BLACS, FFT, LAPACK)		BLAS
CERNLIB 93d		CERNLIB 93d	
IMSL Parallel Libraries 2.0			
IMSL Interactive Documentation Facility 1.1		IMSL Interactive Documentation Facility 2.0	
NAG Fortran Library Mark 15		NAG Fortran Library Mark 15	
NAG C Library Mark 2		NAG C Library Mark 2	
		NAG On-line Information Supplement	

Grafik und Visualisierung

Im Grafikbereich wird weiterhin als Basis-Software für Window-Oberflächen X11 und für Präsentationsgrafiken GKS eingesetzt. Dieses Basis-System wird durch die NAG Graphics Library und NCAR Graphics (in der aktuellen Version 3.2) ergänzt. Zur einfachen Erstellung von Präsentationsgrafiken wurde für die Vorrechner *ufer* und *aventurin* das Plotsystem Super Mongo beschafft.

CRAY Y-MP	SPARCserver <i>ufer</i>	Indigo <i>aventurin</i>
CVT 2.1 (X11R5, Motif, DGL, PEXlib, Tk, Tcl)	OpenWindows 3.0 (X11R4, XView)	X11R5, Motif, GL, IRIS Inventor 1.0
NewGKS	NewGKS	
XGKS	XGKS	
BIZEPS	BIZEPS	
GRIPS	GRIPS	
NAG Graphics Library Mark 3	NAG Graphics Library Mark 3	
NCAR Graphics 3.2	NCAR Graphics 3.2	NCAR Graphics 3.2
	SuperMongo	Super Mongo

Für die Visualisierung von Ergebnissen, die auf dem Landeshöchstleistungsrechner berechnet wurden, werden primär die Visualisierungsumgebungen AVS und IRIS Explorer eingesetzt. Für verteilte Visualisierungsanwendungen konnte neben dem bereits verfügbaren AVS 5 auch wieder IRIS Explorer in der aktuellen Version 2.0 für den Vektorrechner CRAY Y-MP bereitgestellt werden. Für Anwendungen aus der Strömungs- und Strukturmechanik wurde das Visualisierungssystem MPGS durch das Nachfolgeprodukt EnSight 5.2 ersetzt. Für Anwendungen aus der Bild- und Signalverarbeitung wird weiterhin das Visualisierungssystem Khoros 1.0 angeboten. Es soll im nächsten Jahr durch die neue Version 2.0 ersetzt werden. Für den Grafikserver *aventurin* wurde ein Videoservice entwickelt und bereitgestellt, der es den Benutzern ermöglicht, ihre Visualisierungsergebnisse als Videofilm aufzeichnen zu lassen.

CRAY Y-MP	SPARCserver <i>ufer</i>	Indigo <i>aventurin</i>
AVS 5.0	AVS 5.01	AVS 5.01
EnSight 5.2		EnSight 5.2
IRIS Explorer 2.0		IRIS Explorer 2.0
	Khoros 1.0	Khoros 1.0
		Videoservice

Chemie

Im Bereich Chemie wurden die Systeme GAUSSIAN92, MOLPRO, MOPAC und UniChem durch aktuelle Versionen ersetzt. Für MOLPRO94 und MOPAC wurden Help-Systeme auf dem Vorrechner *ufer* bereitgestellt. Für den Parallelrechner CRAY T3D sollen im Jahre 1995 erste Chemie-Pakete installiert werden, um Chemikern den Einsatz des Parallelrechners für ihre Projekte zu ermöglichen.

CRAY Y-MP	SPARCserver <i>ufer</i>	Indigo <i>aventurin</i>
AMBER 3.0A		
AMPAC 2.1		
CADPAC 5.1		
CHARMm 22.0		
DGauss 2.0		
GAMESS-UK		
GAMESS-USA		
GAUSSIAN 92		
GRADSCF 9.6		
GROMOS		
MNDO 91 3.1		
MOLPRO94	MOLPRO94 Help	
MOPAC 6.02	MOPAC Help	
RPAC 8.2		
SPARTAN 2.0		
UniChem 2.3		UniChem 2.3

Strukturmechanik

Im Bereich Strukturmechanik wurden auf dem Vektorrechner CRAY Y-MP die Finite-Elemente-Systeme ABAQUS und ADINA durch aktuelle Versionen ersetzt.

CRAY Y-MP
ABAQUS 5.4
ADINA 6.1

Informationssystem ZIBIS

Für die Darstellung des ZIB nach außen, für die interne Dokumentation innerhalb des ZIB sowie für die Rechnerdokumentation zum Berliner Landeshöchstleistungsrechner wurde das ZIB-Informationssystem ZIBIS auf Basis des World-Wide Web entwickelt und auf dem Vorrechner *ufer* installiert. Als Browser stehen Mosaic und Lynx zur Verfügung. Für die Rechnerdokumentation für den Landeshöchstleistungsrechner wurde neben ZIBDOC das Hypertextsystem CrayDoc von Cray Research installiert.

SPARCserver <i>ufer</i>
CrayDoc
Lynx
Mosaic
ZIBIS

5.4 Rechnernutzung

60% der Kapazität des Berliner Landeshöchstleistungsrechners (einschließlich der Berliner Anteile im NVV) sind für Großprojekte vorgesehen. Über die Zulassung von Großprojekten entscheidet der wissenschaftliche Zulassungsausschuß aufgrund ausführlich fachlich begründeter Anträge. Zur Vorbereitung von Großprojekten, für Projekte zur Unterstützung der Lehre oder im Rahmen besonderer Vereinbarungen werden von den Universitäten und dem ZIB Benutzer auch direkt zugelassen. Hierfür steht jeder Universität und dem ZIB ein eigenes Kontingent im Umfang von jeweils 10% der Gesamtkapazität des Berliner Landeshöchstleistungsrechners zur Verfügung. Der Zulassungsausschuß ist entsprechend den Vorschlägen der Berliner Universitäten vom Verwaltungsrat des ZIB eingesetzt worden und besteht aus Wissenschaftlern verschiedener Fachgebiete mit Erfahrung im Großrechnerbereich. Er teilt nach Prüfung des Antrages und seiner Begutachtung Rechenkapazität zu. Die Mitglieder des Zulassungsausschusses sind:

Prof. Dr. Elfriede Fehr, Freie Universität Berlin
Prof. Dr. Wolfram Koch, Technische Universität Berlin
Prof. Dr. Volkard Linke, Freie Universität Berlin (Vorsitzender)
Prof. Dr. Rolf Hermann Möhring, Technische Universität Berlin
Prof. Dr. Michael Müller-Preußker, Humboldt-Universität zu Berlin
Prof. Dr. Dietrich Stauffer, Universität zu Köln
Prof. Dr. Lutz Zülicke, Universität Potsdam

Der Ausschuß sieht seine Aufgabe in der unbürokratischen Unterstützung von förderungswürdigen Großprojekten. Er bewertet ihre wissenschaftliche Relevanz die Eignung der Aufgabenstellungen für die Lösung mit Höchstleistungsrechnern. Zur Zeit wird das vom Zulassungsausschuß zugeteilte Kontingent von Projekten der Fachgebiete Chemie, Physik, Geowissenschaften und Ingenieurwissenschaften der Berliner Universitäten sowie der Universitäten Leipzig, Halle/Merseburg und Dresden in Anspruch genommen. Eine Übersicht über die Nutzung der Rechner des NVV durch vom Zulassungsausschuß begutachtete Projekte im Berichtszeitraum gibt Tabelle 1. Da der Zulassungsausschuß erst zum Jahresanfang 1994 wirksam werden konnte, hat der Anteil dieser Großprojekte erst im Laufe des Berichtszeitraums nach und nach die geplante Höhe erreicht. Auch die Kontingentierungs- und Steuerungshilfsmittel des Rechenzentrums mußten dem neuen Vergabeverfahren angepaßt werden. Inzwischen ist das geschilderte Konzept für die Verteilung der Rechenzeit allgemein akzeptiert. Das Zeitraster für die Zuteilung von Rechenkapazität sind Jahresquartale.

Tabelle 1: Großprojekte des Berliner Landeshöchstleistungsrechners im NVV 1994

Fachgebiet Zahl der Projekte	Rechner Verbrauch entsprechend CPU-Stunden einer CRAY Y-MP)					
	Y-MP Kiel	Y-EL Kiel	S400 RRZN	Y-MP4D ZIB	Y-MP2E ZIB	X-MP ZIB
Chemie 17	351,74 2	263,18 2	1673,731 1	5978,87 14	3165,10 16	285,65 6
Ingenieurwiss. 3	– –	– –	25,65 1	153,91 3	4,73 3	147,74 3
Umweltwiss. 5	– –	– –	– –	2472,75 5	1130,42 5	1118,66 4
Physik 12	2421,33 3	2073,33 3	10348,72 3	2293,01 9	2,42 8	197,92 6

Die Tabelle zeigt, daß die aus Niedersachsen zurückgeholte Leistung im NVV den überwiegenden Bedarf der Großprojekte auf dem Gebiet der Physik decken konnte. Wegen ihres extrem hohen Vektorisierungsgrades ist die S400 im RRZN für diese Anwendungen das wirtschaftlichste und schnellste System. Die folgende Tabelle zeigt die wechselseitige Nutzung der Systeme im NVV. Es ist durchaus im Sinne des NVV, daß Niedersachsen, als das Land mit der damals schnellsten und neuesten Maschine, im Berichtszeitraum keine Leistung in Schleswig-Holstein oder Berlin abnahm:

Tabelle 2: Wechselseitige Rechnernutzung im NVV 1994

Rechner	Nutzung (in Prozent) durch		
	Berlin	Schleswig-Holstein	Niedersachsen
Y-MP4D Berlin (und X-MP)	74	26	–
Y-MP2E Berlin	69	31	–
Y-MP Kiel	18	82	–
Y-EL Kiel	23	77	–
S400 Hannover	23	4	73

Die insgesamt an den Vektorrechnern des ZIB abgegebene CPU-Zeit ist in der folgenden Tabelle 3 dargestellt. Die am Parallelrechner erbrachte CPU-Zeit fällt dagegen fast vollständig in die Abnahmeperiode und ist daher hier nicht wiedergegeben. Über den Parallelrechner werden erst im nächsten Tätigkeitsbericht Auslastungszahlen vorgelegt werden.

Tabelle 3: Von den Vektorrechnern des ZIB abgegebene CPU-Zeit 1994

Abgegebene CPU-Zeit in Stunden des jeweiligen Systems		
CRAY X-MP/216 Januar bis April 2 CPUs	CRAY Y-MP4D/464 April bis Dezember 4CPUs	CRAY Y-MP/264 Jahr 1994 2 CPUs
4.462,8	17.601,8	15.492,1

Die Praxis des ZIB, zur Unterstützung der Benutzer nicht nur Informatiker und Mathematiker und Programmierer, sondern möglichst Wissenschaftler aus den jeweiligen Anwendungsfächern einzusetzen, hat sich im Berichtszeitraum bewährt. Insbesondere die Vorbereitung und Durchführung der Leistungsmessungen für die neuen Höchstleistungsrechner und die Betriebseinführung des Parallelrechners konnte so auf die Bedürfnisse der einzelnen Projekte gut abgestimmt werden. Jedem Projekt am Parallelrechner wurde ein Betreuer des ZIB — möglichst aus dem Fachgebiet des Projektes — zugewiesen. Auch bei der Planung und Durchführung der Einführungskurse in die neue und schwierige Materie der Parallelrechnernutzung waren auf diese Weise die Interessen der verschiedenen Projektgruppen zu jeder Zeit kompetent im ZIB vertreten. Als Erfolg dieser Organisationsform werten wir, daß der Parallelrechner bereits 6 Wochen nach der Installation durch Anwendungen aus den Gebieten Physik und Strömungsmechanik gut ausgelastet werden konnte. Bereits kurz nach Ende des Berichtszeitraums mußte der Zulassungsausschuß gebeten werden, auch die Rechenleistung des massiv parallelen Rechners zu kontingentieren, weil sich vor der bis zu 93% ausgelasteten Anlage bereits Warteschlangen gebildet hatten.

5.5 Interne Dienstleistungen des Rechenzentrums

Die sachgerechte Ausstattung der Arbeitsplätze mit Workstations konnte auch im Berichtszeitraum entsprechend den bereitgestellten finanziellen Mitteln den Erfordernissen der Forschungsarbeit angepaßt und erweitert werden. Aus Drittmitteln konnte das ZIB zahlreiche neue Projekte anfangen, für deren Mitarbeiter geeignete Arbeitsplätze eingerichtet werden mußten. Auch kann sich das ZIB nicht der allgemeinen Tendenz verschließen, daß insbesondere durch neu auf den wissenschaftlichen "Markt" kommende Software die Anforderungen an die Systeme rasch wachsen und die Systeme daher immer schneller veralten. Dieser Prozeß muß verantwortungsvoll gesteuert werden. So wurden im Berichtszeitraum 18 neue Workstations beschafft und 6 ältere im Rahmen von Upgrades erneuert.

Tabelle 4: Rechnerausstattung des ZIB Ende 1994 (ohne Großgeräte)

Hersteller	Arbeitsplatzrechner (oder X-Terminal)	Server (und Arbeitsplatzrechner)	Zentrale Server
Apple	16	–	–
DEC	4	–	–
IBM	2	–	–
HP	2	1	–
SGI	10	5	1
SUN	95	23	12
Diverse X-Terminals	18	–	–
Diverse PC und Laptops	28	–	–
Summe	175	29	13

6 Publikationen

Die mit * gekennzeichneten Veröffentlichungen sind abrufbar über:

`ftp ftp.zib-berlin.de ... cd/pub`

oder

<http://www.zib-berlin.de/ZIBbib/Publications/>

6.1 Preprints

SC 94–01. Robert Weismantel. *On the 0/1 Knapsack Polytope.* *

Abstract: Given a set N of items and a capacity $b \in \mathbb{N}$, and let N_j be the set of items with weight j , $1 \leq j \leq b$. The 0/1 knapsack polytope is the convex hull of all 0/1 vectors that satisfy the inequality

$$\sum_{j=1}^b \sum_{i \in N_j} jx_i \leq b.$$

In this paper we first present a complete linear description of the 0/1 knapsack polytope for two special cases: (a) $N_j = \emptyset$ for all $1 < j \leq \lfloor \frac{b}{2} \rfloor$ and (b) $N_j = \emptyset$ for all $1 < j \leq \lfloor \frac{b}{3} \rfloor$ and $N_j = \emptyset$ for all $j \geq \lfloor \frac{b}{2} \rfloor + 1$. It turns out that the inequalities that are needed for the complete description of these special polytopes are derived by means of some “reduction principle”. This principle is then generalized to yield valid and in many cases facet defining inequalities for the general 0/1 knapsack polytope. The separation problem for this class of inequalities can be solved in pseudo polynomial time via dynamic programming techniques.

SC 94–02. Martin Grötschel; Alexander Martin; Robert Weismantel. *The Steiner Tree Packing Problem in VLSI-Design.* *

Abstract: In this paper we describe several versions of the routing problem arising in VLSI design and indicate how the Steiner tree packing problem can be used to model these problems mathematically. We focus on switch-box routing problems and provide integer programming formulations for routing in the knock-knee and in the Manhattan model. We give a brief sketch of cutting plane algorithms that we developed and implemented for these two models. We report on computational experiments using standard test instances. Our codes are able to determine optimum solutions in most cases, and in particular, we can show that some of the instances have no feasible solution if Manhattan routing is used instead of knock-knee routing.

SC 94–03. Jan Verschelde; Karin Gatermann. *Symmetric Newton Polytopes for Solving Sparse Polynomial Systems.* *

Abstract: The aim of this paper is to compute all isolated solutions to symmetric polynomial systems. Recently, it has been proved that modeling the sparse structure of the system by its Newton polytopes leads to a computational breakthrough in solving the system. In this paper, it will be shown how the Lifting Algorithm, proposed by Huber and Sturmfels, can be applied to symmetric Newton polytopes. This symmetric version of the Lifting Algorithm enables the efficient construction of the symmetric subdivision, giving rise to a symmetric homotopy, so that only the generating solutions have to be computed. Efficiency is obtained by combination with the product homotopy. Applications illustrate the practical significance of the presented approach.

SC 94–04. Andreas Hohmann. *Object Oriented Design of Multilevel Newton and Continuation Methods.* *

Abstract: We present a set of C++ classes that realize an abstract inexact Gauss Newton method in combination with a continuation process for the solution of parameter dependent nonlinear problems. The object oriented approach allows the continuation of different types of solutions within the same framework.

SC 94–05. Wolfram Koepf. *Algorithmic Work with Orthogonal Polynomials and Special Functions.* *

Abstract: In this article we present a method to implement orthogonal polynomials and many other special functions in Computer Algebra systems enabling the user to work with those functions appropriately, and in particular to verify different types of identities for those functions. Some of these identities like differential equations, power series representations, and hypergeometric representations can even be dealt with algorithmically, i. e. they can be computed by the Computer Algebra system, rather than only verified. The types of functions that can be treated by the given technique cover the generalized hypergeometric functions, and therefore most of the special functions that can be found in mathematical dictionaries. The types of identities for which we present verification algorithms cover differential equations, power series representations, identities of the Rodrigues type, hypergeometric representations, and algorithms containing symbolic sums. The current implementations of special functions in existing Computer Algebra systems do not meet these high standards as we shall show in examples. They should be modified, and we show results of our implementations.

SC 94–06. Svante Linusson. *Partitions with restricted block sizes, Möbius functions and the k -of-each problem.* *

Abstract: Given a list of n numbers in \mathbb{R} , one wants to decide whether every number in the list occurs at least k times. I will show that $(1 - \epsilon)n \log_3(n/k)$ is a lower bound for the depth of a linear decision tree determining this problem. This is done by using the Björner–Lovász method, which turns the problem into one of estimating the Möbius function for a certain partition lattice. I will also calculate the exponential generating function for the Möbius function of a partition poset with restricted block sizes in general.

SC 94–07. Bernd Gärtner; Günter M. Ziegler. *Randomized simplex algorithms on Klee–Minty cubes.* *

Abstract: We investigate the behavior of randomized simplex algorithms on special linear programs. For this, we develop combinatorial models for the Klee–Minty cubes and similar linear programs with exponential decreasing paths. The analysis of two randomized pivot rules on the Klee–Minty cubes leads to (nearly) quadratic lower bounds for the complexity of linear programming with random pivots. Thus we disprove two bounds conjectured in the literature. At the same time, we establish quadratic upper bounds for random pivots on the linear programs under investigation. This motivates the question whether some randomized pivot rules possibly have quadratic worst-case behavior on general linear programs.

SC 94–08. Folkmar A. Bornemann. *On the Convergence of Cascadic Iterations for Elliptic Problem.* *

Abstract: We consider nested iterations, in which the multigrid method is replaced by some simple basic iteration procedure, and call them *cascadic iterations*. They were introduced by Deuffhard, who used the conjugate gradient method as basic iteration (CCG method). He demonstrated by numerical experiments that the CCG method works within a few iterations if the linear systems on coarser triangulations are solved accurately enough. Shaidurov subsequently proved multigrid complexity for the CCG method in the case of H^2 -regular two-dimensional problems with quasi-uniform triangulations. We show that his result still holds true for a large class of smoothing iterations as basic iteration procedure in the case of two- and three-dimensional $H^{1+\alpha}$ -regular problems. Moreover we show how to use cascadic iterations in adaptive codes and give in particular a new termination criterion for the CCG method.

SC 94–09. Jens Lang. *High-Resolution Selfadaptive Computations on Chemical Reaction–Diffusion Problems with Internal Boundaries.* *

Abstract: Large chemical computations show the need for full adaptivity supporting the development of robust and highly efficient programs. For solutions possessing sharp moving spatial transitions, as travelling wavefronts or emerging boundary and internal layers, an automatic adjustment

of both the space and the time stepsize is generally accepted to be more successful in efficiently resolving critical regions of high spatial and temporal activity. In contrast to the widespread discretization sequence first space then time the reversed sequence first time then space is employed. Full adaptivity of the proposed algorithm is realized by combining embedded time discretization and multilevel finite element space discretization. In this paper the algorithm is described for one-dimensional problems. The numerical results show the significantly new perspectives opened by this approach.

SC 94–10. Jörg Ackermann; Bodo Erdmann; Rainer Roitzsch. *A Self-Adaptive Multilevel Finite Element Method for the Stationary Schrödinger Equation in Three Space Dimensions.* *

Abstract: An error controlled finite element method (FEM) for solving stationary Schrödinger equations in three space dimensions is proposed. The method is based on an adaptive space discretization into tetrahedra and local polynomial basis functions of order $p = 1-5$ defined on these tetrahedra. According to a local error estimator the triangulation is automatically adapted to the solution. Numerical results for standard problems appearing in vibrational motion and molecular structure calculations are presented and discussed. Relative precisions better than $1e-8$ are obtained. For equilateral H_3^{++} the adaptive FEM turns out to be superior to global basis set expansions in the literature. Our precise FEM results exclude in a definite manner the stability or metastability of equilateral H_3^{++} in its groundstate.

SC 94–11. Karin Gatermann. *Semi-invariants, equivariants and algorithms.* *

Abstract: The results from invariant theory and the results for semi-invariants and equivariants are summarized in a way suitable for the combination with Gröbner basis computation. An algorithm for the determination of fundamental equivariants using projections and a Poincaré series is described. Secondly, an algorithm is given for the representation of an equivariant in terms of the fundamental equivariants. Several ways for the exact determination of zeros of equivariant systems are discussed.

SC 94–12. Claudia Wulff; Andreas Hohmann; Peter Deuffhard. *Numerical Continuation of Periodic Orbits with Symmetry.* *

Abstract: We consider periodic orbits of autonomous parameter dependent ODEs. Starting from a shooting algorithm for the numerical computation of periodic orbits via an adaptive Poincaré-section we develop a pathfollowing algorithm for periodic solutions based on a tangential continuation method with implicit reparametrization. For ODE's equivariant w.r.t. a finite group we show that spatial as well as spatio-temporal symmetries of periodic orbits can be exploited within the (multiple) shooting

context. We describe how turning points, period doubling bifurcations and Hopf points along the branch of periodic solutions can be handled. Furthermore equivariant Hopf points and generic secondary bifurcations of periodic orbits with \mathbf{Z}_m -symmetry are treated. We tested the code with standard examples, e.g., the period doubling cascade in the Lorenz equations. To show the efficiency of the described methods we also used the program for an application from electronics, a ring oscillator with n inverters. In this example the exploitation of symmetry reduces the amount of work for the continuation of periodic orbits from $\mathcal{O}(n^2)$ to $\mathcal{O}(n)$.

SC 94–13. Nicht erschienen

SC 94–14. Atef Abdel–Aziz Abdel–Hamid; Ralf Borndörfer. *On the Complexity of Storage Assignment Problems.* *

Abstract: The *storage assignment problem* asks for the cost minimal assignment of containers with different sizes to storage locations with different capacities. Such problems arise, for instance, in the optimal control of automatic storage devices in flexible manufacturing systems. This problem is known to be \mathcal{NP} -hard in the strong sense. We show that the storage assignment problem is \mathcal{NP} -hard for *bounded sizes and capacities*, even if the sizes have values 1 and 2 and the capacities value 2 only, a case we encountered in practice. Moreover, we prove that no polynomial time ϵ -approximation algorithm exists. This means that almost all storage assignment problems arising in practice are indeed hard.

SC 94–15. Jochen Fröhlich. *Parameter Derivatives of the Jacobi Polynomials and the Gaussian Hypergeometric Function.* (Appeared in: *Integral Transforms and Special Functions* 2 (1994) pp. 252–266.) *

Abstract: The paper's main result is a simple derivation rule for the Jacobi polynomials with respect to their parameters, i.e. for $\partial_\alpha P_n^{\alpha,\beta}$, and $\partial_\beta P_n^{\alpha,\beta}$. It is obtained via relations for the Gaussian hypergeometric function concerning parameter derivatives and integer shifts in the first two arguments. These have an interest on their own for further applications to continuous and discrete orthogonal polynomials. The study is motivated by a Galerkin method with moving weight, presents all proofs in detail, and terminates in a brief discussion of the generated polynomials.

SC 94–16. Carlos E. Ferreira; Alexander Martin; Cid C. de Souza; Robert Weismantel; L.A. Wolsey. *Formulations and Valid Inequalities for the Node Capacitated Graph Partitioning Problem.* For the LATEX–Files please contact Prof. Dr. Wolsey, CORE, Voie du Roman Pays 34, B–1348 Louvain la Neuve, BELGIQUE. e–mail:wolsey@core.ucl.ac.be

Abstract: We investigate the problem of partitioning the nodes of a graph under capacity restriction on the sum of the node weights in each subset of

the partition. The objective is to minimize the sum of the costs of the edges between the subsets of the partition. This problem has a variety of applications, for instance in the design of electronic circuits and devices. We present alternative integer programming formulations for this problem and discuss the links between these formulations. Having chosen to work in the space of edges of the multicut, we investigate the convex hull of incidence vectors of feasible multicuts. In particular, several classes of inequalities are introduced, and their strength and robustness are analyzed as various problem parameters change.

SC 94–17. Carlos E. Ferreira; Alexander Martin; Cid C. de Souza; Robert Weismantel; L.A. Wolsey. *The Node Capacitated Graph Partitioning Problem: A Computational Study*. For the LATEX-Files please contact Prof. Dr. Wolsey, CORE, Voie du Roman Pays 34, B-1348 Louvain la Neuve, BELGIQUE. e-mail:wolsey@core.ucl.ac.be

Abstract: In this paper we consider the problem of k -partitioning the nodes of a graph with capacity restrictions on the sum of the node weights in each subset of the partition, and the objective of minimizing the sum of the costs of the edges between the subsets of the partition. Based on a study of valid inequalities, we present a variety of separation heuristics for so-called cycle, cycle with ears, knapsack tree and path-block-cycle inequalities. The separation heuristics, plus primal heuristics, have been implemented in a branch-and-cut routine using a formulation including the edges with non-zero costs and node variables. Results are presented for three classes of problems: equipartitioning problems arising in finite element methods and partitioning problems associated with electronic circuit layout and compiler design.

SC 94–18. Nicht erschienen

SC 94–19. Robert Weismantel. *Hilbert Bases and the Facets of Special Knapsack Polytopes*. *

Abstract: Let a set N of items, a capacity $F \in \mathbb{N}$ and weights $a_i \in \mathbb{N}$, $i \in N$ be given. The 0/1 knapsack polytope is the convex hull of all 0/1 vectors that satisfy the inequality

$$\sum_{i \in N} a_i x_i \leq F.$$

In this paper we present a linear description of the 0/1 knapsack polytope for the special case where $a_i \in \{\mu, \lambda\}$ for all items $i \in N$ and $1 \leq \mu < \lambda \leq b$ are two natural numbers. The inequalities needed for this description involve elements of the Hilbert basis of a certain cone. The principle of generating inequalities based on elements of a Hilbert basis suggests further extensions.

SC 94–20. Ulrich H.E. Hansmann; Yuko Okamoto. *Comparative Study of Multicanonical and Simulated Annealing Algorithms in the Protein Folding Problem.* *

Abstract: We compare a few variants of the recently proposed multicanonical method with the well known simulated annealing for the effectiveness in search of the energy global minimum of a biomolecular system. For this we study in detail Met-enkephalin, one of the simplest peptides. We show that the new method not only outperforms simulated annealing in the search of the energy groundstate but also provides more statistical-mechanical information about the system.

SC 94–21. Ulrich H.E. Hansmann. *Towards Ab Initio Prediction of Protein Conformations – The Multicanonical Approach.* *

Abstract: We demonstrate the effectiveness of the multicanonical algorithm for the tertiary structure prediction of peptides and proteins. Unlike to simulated annealing the relationship to the canonical ensemble remains exactly controlled. Hence, the new method allows not only the prediction of the lowest-energy conformation, but also the calculation of thermodynamic quantities at various temperature from one run.

SC 94–22. Peter Deuffhard; Michael Wulkow. *Simulationsverfahren für die Polymerchemie.* *

Abstract: Die enorme algorithmische Beschleunigung durch diskrete Galerkin-Methoden für abzählbare Differentialgleichungssysteme hat der Simulation von Polymerisationsprozessen neue, industriell relevante Problembereiche eröffnet, die mit den bis dahin verfügbaren Methoden nicht zugänglich waren.

SC 94–23. Peter Deuffhard; Ulrich Nowak; J. Weyer. *Prognoserechnungen zur AIDS-Ausbreitung in der Bundesrepublik Deutschland.* *

Abstract: Die Autoren sind sich darüber im klaren, daß zahlreiche Imponderabilien die Ergebnisse der vorgelegten Modellrechnungen beeinflussen können. Immerhin repräsentiert jedoch das vorgelegte mathematische Modell die Summe unserer derzeitigen Kenntnisse zur Fragestellung AIDS-Epidemie; neu hinzukommende Erkenntnisse lassen sich rasch einarbeiten und in ihren Konsequenzen überschauen. Die Entwicklung neuer effizienter numerischer Methoden spielte eine Schlüsselrolle bei der tatsächlichen Simulation dieses umfangreichen realitätsnahen mathematischen Modells.

SC 94–24. Wolfram Koepf. *Algebraische Darstellung transzendenter Funktionen.* *

Abstract: In this article algorithmic methods are presented that have been incorporated in computer algebra systems in the last five years. The methods can be used to identify transcendental functions. The essential

idea due to Zeilberger is to represent the functions by systems of holonomic differential and recurrence equations, and the identification procedure utilizes algorithms of Stanley and Zeilberger. Also a noncommutative version of the Buchberger algorithm can be applied.

SC 94–25. Andreas Hohmann. *Multilevel Newton h - p Collocation.* *

Abstract: We derive a simple accuracy matching strategy for inexact Gauss Newton methods and apply it to the numerical solution of boundary value problems of ordinary differential equations by collocation. The matching strategy is based on an affine contravariant convergence theorem, i. e. , the characteristic constants are invariant under affine transformations of the domain. The inexact Gauss Newton method is applied to an integral formulation of the BVP. As discretization for the arising linear subproblems we employ adaptive collocation at Gaussian nodes with varying local orders and stepsizes. The grids are chosen via adaptive refinement and order selection.

SC 94–26. Bernd Sturmfels; Robert Weismantel; Günter M. Ziegler. *Gröbner bases of lattices, corner polyhedra, and integer programming.* *

Abstract: We investigate the generating sets (“Gröbner bases”) of integer lattices which correspond to the Gröbner bases of the associated binomial ideals. Extending results in Sturmfels and Thomas, preprint 1994, we obtain a geometric characterization of the universal Gröbner basis in terms of the vertices and edges of the associated corner polyhedra. We emphasize the special case where the lattice has finite index. In this case the corner polyhedra were studied by Gomory, and there is a close connection to the “group problem in integer programming” Schrijver, p. 363. We present exponential lower and upper bounds for the size of a reduced Gröbner basis. The initial complex of (the ideal of) a lattice is shown to be dual to the boundary of a certain simple polyhedron.

SC 94–27. Philip J. Aston; Michael Dellnitz. *Symmetry Breaking Bifurcations of Chaotic Attractors.* *

Abstract: In an array of coupled oscillators *synchronous chaos* may occur in the sense that all the oscillators behave identically although the corresponding motion is chaotic. When a parameter is varied this fully symmetric dynamical state can lose its stability, and the main purpose of this paper is to investigate which type of dynamical behavior is expected to be observed once the loss of stability has occurred. The essential tool is a classification of Lyapunov exponents based on the symmetry of the underlying problem. This classification is crucial in the derivation of the analytical results but it also allows an efficient computation of the dominant Lyapunov exponent associated with each symmetry type. We show how these dominant exponents determine the stability of invariant sets possessing various

instantaneous symmetries and this leads to the idea of *symmetry breaking bifurcations of chaotic attractors*. Finally the results and ideas are illustrated for several systems of coupled oscillators.

SC 94–28. Sebastian Reich. *Smoothed Dynamics of Highly Oscillatory Hamiltonian Systems*. *

Abstract: We consider the numerical treatment of Hamiltonian systems that contain a potential which grows large when the system deviates from the equilibrium value of the potential. Such systems arise, e.g., in molecular dynamics simulations and the spatial discretization of Hamiltonian partial differential equations. Since the presence of highly oscillatory terms in the solutions forces any explicit integrator to use very small step-size, the numerical integration of such systems provides a challenging task. It has been suggested before to replace the strong potential by a holonomic constraint that forces the solutions to stay at the equilibrium value of the potential. This approach has, e.g., been successfully applied to the bond stretching in molecular dynamics simulations. In other cases, such as the bond-angle bending, this method fails due to the introduced rigidity. Here we give a careful analysis of the analytical problem by means of a smoothing operator. This will lead us to the notion of the smoothed dynamics of a highly oscillatory Hamiltonian system. Based on our analysis, we suggest a new constrained formulation that maintains the flexibility of the system while at the same time suppressing the high-frequency components in the solutions and thus allowing for larger time steps. The new constrained formulation is Hamiltonian and can be discretized by the well-known SHAKE method.

SC 94–29. Regina Urbaniak; Robert Weismantel; Günter M. Ziegler. *A Variant of the Buchberger Algorithm for Integer Programming*. *

Abstract: In this paper we modify Buchberger's S -pair reduction algorithm for computing a Gröbner basis of a toric ideal so as to apply to an integer program in inequality form with fixed right hand sides and fixed upper bounds on the variables. We formulate the algorithm in the original space and interpret the reduction steps geometrically. In fact, three variants of this algorithm are presented and we give elementary proofs for their correctness. A relationship between these (exact) algorithms, iterative improvement heuristics and the Kernighan–Lin procedure is established.

SC 94–30. Y. Pochet; R. Weismantel. *The Sequential Knapsack Polytope*.

Available **only** via **anonymous-ftp, www** *

Abstract: In this paper we describe the convex hull of all solutions of the integer bounded knapsack problem in the special case when the weights of the items are divisible. The corresponding inequalities are defined via an inductive scheme that can also be used in a more general setting.

SC 94–31. Roger Horsley; Volkard Linke; Paul E.L. Rakow; Gerrit Schierholz; Hinnerk Stüben. *Probing the Continuum Limit in Non-Compact QED: New Results on Large Lattices.* *

Abstract: We present new Monte Carlo results in non-compact lattice QED with staggered fermions down to $m_0 = 0.005$. This extends our previous investigations on the nature of the continuum limit of QED.

SC 94–32. Ulrich H.E. Hansmann; Yuko Okamoto. *Multicanonical Approach in Statistical Mechanics of Peptides.* *

Abstract: We test the performance of the multicanonical approach for biological molecules. The simulated molecules are frustrated systems with a complicated energy landscape. The resulting slowing down in simulations is alleviated by our ansatz. We perform a multicanonical simulation of nonpolar amino acids and study their α -helix propensities. The results are shown to be in agreement with recent experimental results.

SC 94–33. Wolfram Koepf. *Algorithms for the Indefinite and Definite Summation.* *

Abstract: The celebrated Zeilberger algorithm which finds holonomic recurrence equations for definite sums of hypergeometric terms $F(n, k)$ is extended to certain nonhypergeometric terms. An expression $F(n, k)$ is called hypergeometric term if both $F(n+1, k)/F(n, k)$ and $F(n, k+1)/F(n, k)$ are rational functions. Typical examples are ratios of products of exponentials, factorials, Γ function terms, binomial coefficients, and Pochhammer symbols that are integer-linear with respect to n and k in their arguments. We consider the more general case of ratios of products of exponentials, factorials, Γ function terms, binomial coefficients, and Pochhammer symbols that are rational-linear with respect to n and k in their arguments, and present an extended version of Zeilberger's algorithm for this case, using an extended version of Gosper's algorithm for indefinite summation.

In a similar way the Wilf-Zeilberger method of rational function certification of integer-linear hypergeometric identities is extended to rational-linear hypergeometric identities.

The given algorithms on definite summation apply to many cases in the literature to which neither the Zeilberger approach nor the Wilf-Zeilberger method is applicable. Examples of this type are given by theorems of Watson and Whipple, and a large list of identities ("Strange evaluations of hypergeometric series") that were studied by Gessel and Stanton. It turns out that with our extended algorithms practically all hypergeometric identities in the literature can be verified.

Finally we show how the algorithms can be used to generate new identities. REDUCE and MAPLE implementations of the given algorithms can be obtained from the author, many results of which are presented in the paper.

SC 94–34. Jens Lang. *Two-Dimensional Fully Adaptive Solutions of Reaction-Diffusion Equations.* *

Abstract: We present an adaptive Rothe method for two-dimensional problems combining an embedded Runge–Kutta scheme in time and a multilevel finite element discretization in space. The spatial discretization error is controlled by a posteriori error estimates based on interpolation techniques. A computational example for a thermodiffusive flame propagation model illustrates the high accuracy that is possible with the proposed method.

SC 94–35. Michel Schaffers. *Complete Linear Descriptions For Special Instances of the Single Source Fixed Charge Network Flow Design Problem.* *

Abstract: The multicommodity linear formulation of the Fixed Charge Network Flow Design problem is known to have significantly sharp linear relaxation lower bounds. However the tradeoff is the introduction of a large amount of artificial variables. We exhibit a class of special instances for which the lower bound is tight. Further we completely describe the polyhedron in the space of the natural variables.

SC 94–36. Jochen Fröhlich; Peter Deuffhard. *Moving Weight Galerkin Methods for Turbulent Reactive Flows.* *

Abstract: Adopting a statistical approach for the computation of turbulent combustion flows an approximation for the probability density function (PDF) of the composition variables is often required to treat the highly nonlinear reaction term in a satisfactory way. One class of methods currently being used are the moment methods which employ transport equations for low order statistical moments and use a parametrized shape of the PDF. A second class solves a transport equation for the joint PDF by a Monte Carlo method. In the present paper we develop an intermediate algorithm based on a Galerkin method for the PDF transport equation. The solution is developed in terms of an orthogonal or bi-orthogonal basis of a suitable Hilbert space. The unconventional use of the related weight function as a prefactor (moving weight approach) permits adaptivity and results in a generalization of the β -closure for bounded scalar quantities. We present the approximation procedure in detail and apply it to the evolution of the composition in a homogeneous well-stirred reactor. The extension to non-homogeneous flow simulations is straightforward.

SC 94–37. Detlev Stalling; Hans-Christian Hege. *Fast and Resolution Independent Line Integral Convolution.* *

Abstract: Line Integral Convolution (LIC) is a powerful technique for generating striking images and animations from vector data. Introduced in 1993, the method has rapidly found many application areas, ranging from computer arts to scientific visualization. Based upon locally filtering an input texture along a curved stream line segment in a vector field, it is able

to depict directional information at high spatial resolutions.

We present a new method for computing LIC images, which minimizes the total number of stream lines to be computed and thereby reduces computational costs by an order of magnitude compared to the original algorithm. Our methods utilizes fast, error-controlled numerical integrators. Decoupling the characteristic lengths in vector field grid, input texture and output image, it allows to compute filtered images at arbitrary resolution. This feature is of great significance in computer animation as well as in scientific visualization, where it can be used to explore vector data by smoothly enlarging structure of details.

We also present methods for improved texture animation, employing constant filter kernels only. To obtain an optimal motion effect, spatial decay of correlation between intensities of distant pixels in the output image has to be controlled. This is achieved by blending different phase shifted box filter animations and by adaptively rescaling the contrast of the output frames.

SC 94–38. Frank Schmidt; Reinhard März. *On the Reference Wave Vector of Paraxial Helmholtz Equations.* *

Abstract: The reference wave vector of the paraxial Helmholtz equation is determined using various strategies which result all in similar expressions. The effort for its evaluation is so small that the reference wave vector can be adapted for each propagation step of an arbitrary BPM-algorithm.

6.2 Technical Reports

TR 94–01. P. Deuffhard; H.C. Hege; E. Sedlmayr (eds.). *Scientific Computing in der Theoretischen Physik.* *

Abstract: Die von der DMV-Fachgruppe Scientific Computing in Kooperation mit dem gleichnamigen GAMM-Fachausschuss organisierte Tagung „Scientific Computing in der Theoretischen Physik“ fand vom 16. – 18. März 1994 am Fachbereich Mathematik und Informatik der Freien Universität Berlin statt. Ziel des Workshops war, die Kontakte zwischen den Fachleuten der Gebiete *Computational Physics* und *Scientific Computing* zu intensivieren. Schwerpunkte des Workshops waren numerische Simulation von Transportmodellen der Astrophysik und Halbleiterphysik, Multilevel-Methoden für partielle Differentialgleichungen sowie Monte-Carlo-Methoden und molekulardynamische Verfahren für Probleme der Statistischen Physik und Quantenfeldtheorie. Der Workshop fand ein äusserst positives Echo und führte über 70 Teilnehmer der verschiedenen Teilgebiete der Theoretischen Physik und ca. 50 Teilnehmer aus dem Bereich der Numerischen Mathematik zusammen.

TR 94–02. Wolfram Koepf; Dieter Schmersau. *Spaces of Functions Satisfying Simple Differential Equations.* *

Abstract: In several publications the first author published an algorithm for the conversion of analytic functions for which derivative rules are given into their representing power series $\sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$ at the origin and vice versa, implementations of which exist in MATHEMATICA, MAPLE and REDUCE. One main part of this procedure is an algorithm to derive a homogeneous linear differential equation with polynomial coefficients for the given function. We call this type of ordinary differential equations *simple*. Whereas the opposite question to find functions satisfying given differential equations is studied in great detail, our question to find differential equations that are satisfied by given functions seems to be rarely posed. In this paper we consider the family F of functions satisfying a simple differential equation generated by the rational, the algebraic, and certain transcendental functions. It turns out that F forms a linear space of transcendental functions. Further F is closed under multiplication and under the composition with rational functions and rational powers. These results had been published by Stanley who had proved them by theoretical algebraic considerations. In contrast our treatment is purely algorithmically oriented. We present algorithms that generate simple differential equation for $f + g$, $f \cdot g$, $f \circ r$ (r rational), and $f \circ x^{p/q}$ ($p, q \in \mathbb{N}_0$), given simple differential equations for f , and g , and give a priori estimates for the order of the resulting differential equations. We show that all order estimates are sharp. After finishing this article we realized that in independent work Salvy and Zimmermann published similar algorithms. Our treatment gives a detailed description of those algorithms and their validity.

TR 94–03. Wolfram Koepf. *On Families of Iterated Derivatives.* *

Abstract: We give an overview of an approach on special functions due to Truesdell, and show how it can be used to develop certain type of identities for special functions. Once obtained, these identities may be verified by an independent algorithmic method for which we give some examples.

TR 94–04. Christof Schütte. *A Quasiresonant Smoothing Algorithm for Solving Large Highly Oscillatory Differential Equations from Quantum Chemistry.* *

Abstract: In Quantum Chemistry the field of “Laser-Assisted Molecular Control” has received a considerable amount of attention recently. One key problem in this new field is the simulation of the dynamical reaction of a molecule subjected to external radiation. This problem is described by the Schrödinger equation, which, after eigenfunction expansion, can be written in the form of a large system of ordinary differential equations, the solutions of which show a highly oscillatory behaviour. The oscillations with

high frequencies and small amplitudes confine the stepsizes of any numerical integrator – an effect, which, in turn, blows up the simulation time. Larger stepsizes can be expected by averaging these fast oscillations, thus smoothing the trajectories. Standard smoothing techniques (averaging, filtering) would kill the whole process and thus, lead to wrong numerical results. To avoid this unwanted effect and nevertheless speed up computations, this paper presents a quasiresonant smoothing algorithm (QRS). In QRS, a natural splitting parameter δ controls the smoothing properties. An adaptive QRS-version (AQRS) is presented which includes an error estimation scheme for choosing this parameter δ in order to meet a given accuracy requirement. In AQRS δ is permanently adapted to the solution properties for computing the “chemically necessary information” only. The performance of AQRS is demonstrated in several test problems from the field “Laser-Assisted Selective Excitation of Molecules” in which the external radiation is a picosecond laser pulse. In comparison with standard methods speedup factors of the order of 10^2 are observed.

TR 94–05. Gerhard W. Zumbusch. *Visualizing Functions of the h - p -Version of Finite Elements.* *

Abstract: Results from finite-element-calculations are usually visualized by colored surface- and contour-line-plots or polygonal patches or simply displaced lines and grids. In computer graphics however more advanced techniques like texture-mapping and NURBS are well established and there exist efficient algorithms and implementations. We show that these techniques are not only easy to use, but form a very natural and far more efficient approach for visualization of higher order finite-element’s solutions like in p - and h - p -version. Texture-mapping is useful for displaying vector-valued data, too.

TR 94–06. Herbert Melenk (ed.). *The Complexity Barrier in REDUCE – a Case Study.* *

Abstract: The power of the symbolic math system REDUCE for solving large and difficult problems in science and engineering is demonstrated by a set of model problems. These include algebraic equation solving, formal variable elimination, formal power series, symbolic treatment of differential equations and applications from theoretical physics.

TR 94–07. W. Dalitz; M. Grötschel; J. Lügger; W. Sperber. *Neue Perspektiven eines verteilten Informationssystems für die Mathematik.*

Available **only** via **anonymous-ftp, www** *

Abstract: Die Kombination von elektronischer Fachinformation mit den neuen Mitteln der Kommunikation eröffnet neue Perspektiven für die Mathematik in Deutschland. Aufbauend auf das laufende, BMFT-geförderte Projekt “Fachinformation” der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV) plant die

DMV eine Querschnittsaktivität für die Mathematik. Diese soll nicht nur die mathematischen Fachbereiche und Forschungsinstitute einbeziehen, sondern auch mathematische Forschungslabors aus der Industrie und die Informationsversorger der Mathematik, insbesondere die wissenschaftlichen Verlage, die TIB Hannover, die Bibliotheken der Universitäten und – nicht zuletzt – das FIZ Karlsruhe mit dem Zentralblatt für Mathematik.

Auf der technischen Grundlage des Internet und seiner weltweit verbreiteten Informationsdienste (Gopher, WAIS, WorldWideWeb, Hyper-G, ftp und e-mail) soll ein verteiltes, mathematisches Informationssystem geschaffen werden, bei dem die Partner des gemeinsamen Vorhabens ihre örtlichen Ressourcen untereinander und zugleich weltweit verfügbar machen. Diese Ziele sind durch konsequenten Einsatz von Software erreichbar, die nach dem Client-Server-Modell strukturiert und die im Internet verbreitet bzw. anerkannt ist.

Die Bereitstellung von Technik reicht keineswegs aus. Ohne die Schaffung einer personellen, organisatorischen und technischen Infrastruktur ist die Durchführung eines solchen Projekts nicht möglich. Als Maßnahmen sind – für alle Partner – geplant:

- Schaffung der Funktion des Informationsbeauftragten
- Einrichtung eines gemeinsamen “Forums für mathematische Information”
- Errichtung und Betreuung von mathematischen Informationsstationen
- Teilnahme an nationalen und internationalen Standardisierungsmaßnahmen
- Workshops und regelmäßige Schulungen, Öffentlichkeitsarbeit

Als Aktivitäten – mit Focus auf mathematische Fachinformation – sind folgende Teilaufgaben und Pilotvorhaben bei allen Partnern geplant:

- Einrichtung von elektronischen Informationssystemen
- Verteiltes elektronisches Angebot von Preprints und Skripten (Volltexte)
- Verteiltes elektronisches Angebot von Software- und Datensammlungen
- Zugriff auf globale Informationssysteme in der Mathematik
- Organisation eines Lebenden Mathematischen Museums
- Zugriff auf elektronische Kataloge von Bibliotheken, insbesondere Fachbereichsbibliotheken
- Schaffung eines organisatorischen Rahmens für elektronische mathematische Journale
- Elektronisches Angebot von eingescannten historischen Dokumenten und Büchern
- Schaffung einer Organisationsform für elektronisches Reviewing
- Erprobung von Verfahren zur elektronischen Lieferung von Dokumenten
- Elektronische Projektorganisation

Das Vorhaben zielt ab auf die Schaffung einer informationstechnischen Infrastruktur für Datenbank-Retrieval, e-mail, “Electronic Conferencing” und fachspezifische Informationsnetze in exemplarischer Form für Wissenschaft und Industrie – auch für andere Fachgebiete.

TR 94–08. W. Dalitz; M. Grötschel; J. Lügger; W. Sperber. *New Perspectives of a Distributed Information System for Mathematics.*

Available **only** via **anonymous-ftp, www** *

Abstract:

Combining electronic specialized information, such as electronic information retrieval from central databases, with the new means of communication opens up new perspectives for mathematics in Germany. Based on the current Fachinformationsprojekt (Specialized Information Project) run by the Deutsche Mathematiker-Vereinigung (DMV) and supported by the Federal Minister for Research and Technology (BMFT), the DMV is planning a new infrastructure activity for mathematics. This activity will not only include mathematical university departments and research institutes, but also partners from mathematical research laboratories in industry as well as suppliers of mathematical information, in particular, scientific publishing houses, the Technical Information Library (TIB) Hannover, university libraries and – last but not least – the Fachinformationszentrum (FIZ) Karlsruhe with the Zentralblatt für Mathematik.

On the technical basis of the Internet and its worldwide information services (Gopher, WAIS, World Wide Web, Hyper-G, ftp and e-mail), a distributed mathematical information system is to be created, whose partners make their local resources available both to other partners and to the worldwide Internet community. These aims can be achieved by means of the consequent use of software that is structured according to the client-server model and distributed and accepted within the Internet. Providing the technical equipment, however, is by far not enough. Without the creation of a personal, technical and organizational infrastructure, realization of such a project will not be possible. For every partner the realization of the following measures is envisaged:

- Establishing an *Information Coordinator* at every participating institution
- Creation of a *Forum for Mathematical Information*
- Installation and maintenance of *Mathematical Information Stations*
- Participation in national and international *Standardization Activities*
- Regular workshops and training courses, public relations

The following activities (carried out by all partners or within pilot projects by special groups) focusing on mathematical and mathematics-related information are planned:

- Set up of *Electronic Information Systems* by all partners
- *Distributed* electronic offer of *Preprints* and scripts (full texts) by all partners
- *Distributed* electronic offer of *Software and Data Collections* by all partners
- Access to *Global Information Systems in Mathematics*
- Organization of a *Living Museum of Mathematics*
- Access to *Electronic Library Catalogs*, esp. to libraries of university departments
- Electronic offer of *Scanned Historical Books and Documents*
- Creation and management of *Electronic Mathematical Journals*

- Creation of a framework for various kinds of *Electronic Reviewing*
- Testing of new methods for *Electronic Document Delivery*
- *Electronic Project Organization*

The project aims, at its beginning, at the creation of an information infrastructure for database retrieval, e-mail, electronic conferencing and subject-specific information networks. Its focus is on mathematics in Germany. The general scope, however, is broader. The project is open for discussion, coordination, and cooperation with partners in other areas of science, industry or in other countries. It is also hoped that this project may form an example along which other models of electronic information and communication can be developed. Moreover, the project is also meant to enhance the offer from German mathematics to the worldwide “give and take” within the Internet community.

TR 94–09. Wolfram Koepf. *REDUCE Package for the Indefinite and Definite Summation.* *

Abstract: This article describes the REDUCE package ZEILBERG implemented by Gregor Stölting and the author. The REDUCE package ZEILBERG is a careful implementation of the Gosper (The sum package contains also a partial implementation of the Gosper algorithm.) and Zeilberger algorithms for indefinite, and definite summation of hypergeometric terms, respectively. An expression a_k is called a *hypergeometric term* (or *closed form*), if a_k/a_{k-1} is a rational function with respect to k . Typical hypergeometric terms are ratios of products of powers, factorials, Γ function terms, binomial coefficients, and shifted factorials (Pochhammer symbols) that are integer-linear in their arguments.

TR 94–10. Konrad Zuse. *Discrete Mathematics and Rechnender Raum (Computing Space) –Part 1–. Cellular Structured Space (Rechner Raum) and Physical Phenomena –Part 2–.*

Abstract: The first part of the report contains a lecture presented at “Scientific Computing in der Theoretischen Physik”, a workshop organized by the DMV-Fachgruppe Scientific Computing in cooperation with the GAMM-Fachauschuß Scientific Computing at Freie Universität Berlin in March 1994. To complete this lecture, a slightly modified version of TR 93–12 is appended.

6.3 Beiträge in Zeitschriften

1. J. Ackermann, B. Erdmann, R. Roitzsch: *A self-adaptive multilevel finite element method for the stationary Schrödinger equation in three space dimensions.* J. Chem. Phys., **101** (9) 7643–7650 (1994)

2. U. Ascher, H. Chin, S. Reich: *Stabilization of DAEs and invariant manifolds*. Numer. Math., **67** 131–149 (1994)
3. F. Bornemann: *Adaptive solution of one-dimensional scalar conservation laws with convex flux*. In: Adaptive Methods — Algorithms, Theory and Applications, Proc. Ninth Gamm–Seminar Kiel 1993, W. Hackbusch, G. Wittum (eds.), Vieweg, Braunschweig, Wiesbaden (1994)
4. A. Brandt, M. Brandt: *On the distribution of the number of packets in the fluid flow approximation of packet arrival streams*. Queueing Systems, **17** 275–315 (1994)
5. W. Dalitz, M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber: *Neue Wege für die Fachinformation – am Beispiel der Mathematik*. DFN–Mitteilungen, **34** 4–7 (1994)
6. W. Dalitz, M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber: *Verteiltes Informationssystem für die Mathematik – Kurzfassung eines Projektplans der DMV*. Rundbrief “Numerische Software” der gemeinsamen Fachgruppe 2.2.2 der Gesellschaften DMV, GAMM und GI, **8** 3–5 (1994)
7. W. Dalitz, M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber: *Neue Perspektiven eines verteilten Informationssystems für die Mathematik*. Rundbrief der GAMM, 8–28 (Sept. 1993)
8. W. Dalitz, M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber: *New Perspectives of a Distributed Electronic Information System for Mathematics – Part I*. Newsletter of the European Mathematical Society, **13** 6–17 (1994)
9. W. Dalitz, M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber: *New Perspectives of a Distributed Electronic Information System for Mathematics – Part II*. Newsletter of the European Mathematical Society, **14** 6–14 (1994)
10. P. Deuffhard: *Cascadic Conjugate Gradient Methods for Elliptic Partial Differential Equations: Algorithm and Numerical Results*. In: D.E. Keyes, J. Xu (eds.), Proceedings of the Seventh International Conference on Domain Decomposition, Oct. 27–30, 1993. Contemporary Mathematics **180**, AMS (1994).
11. P. Deuffhard, M. Wulkow: *Simulationsverfahren für die Polymerchemie*. Konrad–Zuse–Zentrum Berlin, Preprint SC 94–22 (1994). In: Bachem, Jünger, Schrader (eds.): Mathematik in der Praxis, Springer–Verlag (to appear).

12. P. Deuffhard, U. Nowak, J. Weyer: *Prognoserechnungen zur AIDS-Ausbreitung in der Bundesrepublik Deutschland*. Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, Preprint SC 94-23 (1994). In: Bachem/Jünger/Schrader (eds.): *Mathematik in der Praxis*, Springer-Verlag (to appear).
13. B. Erdmann, R.H.W. Hoppe, R. Kornhuber: *Adaptive Multilevel-Methods for Obstacle Problems in 3 Space Dimensions*. In: W. Hackbusch, G. Wittum (eds.): *Adaptive Methods — Algorithms, Theory and Computations*. Vieweg, Braunschweig, p. 120-142 (1994)
14. J. Fröhlich: *Parameter derivatives of the Jacobi Polynomials and the Gaisian Hypergeometric function*. *Integral Transforms and Special Functions*, **2** 252-266 (1994)
15. J. Fröhlich, K. Schneider: *An adaptive wavelet Galerkin algorithm for one- and two-dimensional flame computations*. *Eur. J. Mech. B/Fluids*, **13**, 439-471 (1994)
16. B. Gärtner, G.M. Ziegler: *Randomized simplex algorithms on Klee-Minty cubes*. In: Proc. 35th Annual "Symposium on Foundations of Computer Science" (FOCS), November 20-22, 1994, Santa Fe NM, IEEE Computer Society Press, Los Alamitos CA, 502-510 (1994)
17. K. Gatermann: *A remark on the detection of symmetry of attractors*. In P. Chossat (Ed.), *Dynamics, Bifurcation and Symmetry, New Trends and New Tools*, S. 123, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (1994)
18. K. Gatermann, B. Werner: *Secondary Hopf Bifurcation Caused by Steady-state Steady-state Mode interaction*. In J. Chaddam, M. Golubitsky, W. Langford, B. Wetton (Eds.), *Pattern Formations: Symmetry Methods and Applications* (1994)
19. M. Grammel, G. Back, R. Wunderling, H.C. Hege: *Ein paralleles C++ Programmiermodell für ein objektorientiertes B&C-Framework*. GI/ITG-Workshop, Mitteilungen der Fachgruppe PARS der Gesellschaft für Informatik, **13**, 50-59 (1994)
20. M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber: *Wissenschaftliches Publizieren und Elektronische Fachinformation im Umbruch — ein Situationsbericht aus der Sicht der Mathematik*. In: *Überblicke Mathematik*, 153-174 (1994)
21. R.H.W. Hoppe, R. Kornhuber: *Adaptive Multilevel-Methods for Obstacle Problems*. *SIAM J. Numer. Anal.* **31** p. 301-323 (1994)
22. M. Jünger, A. Martin, G. Reinelt, R. Weismantel: *Quadratic 0/1 optimization and a decomposition approach for the placement of electronic circuits*. In: *Mathematical Programming*, **63** 257-279 (1994)

23. W. Koepf: *An asymptotic version of the Goldbach Conjecture*. The International DERIVE Journal **1** 115–123 (1994)
24. W. Koepf: *Von der Bieberbachschen Vermutung zum Satz von de Branges sowie der Beweisvariante von Weinstein*. Jahrbuch Überblicke Mathematik 1994, Vieweg, Braunschweig–Wiesbaden, 175–193 (1994)
25. W. Koepf: *Taylor polynomials of implicit functions, of inverse functions, and of solutions of ordinary differential equations*. Complex Variables **25** 23–33 (1994)
26. W. Koepf: *A package on formal power series*. Mathematica Journal **4**, 62–69 (1994)
27. W. Koepf: *On families of iterated derivatives*. SIGSAM Bulletin **28**, 10–26 (1994)
28. W. Koepf: *A uniqueness theorem for functions of positive real part*. Journal of Mathematical Sciences **28**, 78–90, (1994)
29. W. Koepf, A. Ben–Israel: *Schmiegegleichheit in der Analysis*. Didaktik der Mathematik **22**, 113–129 (1994)
30. W. Koepf, A. Ben–Israel: *The definite nature of indefinite integrals*. The International DERIVE Journal **1**, 115–131 (1994)
31. W. Koepf, D. Schmersau: *Bounded nonvanishing functions and Bateman functions*. Complex Variables **25**, 237–259 (1994)
32. B. Leimkuhler, S. Reich: *Symplectic integration of constrained Hamiltonian systems*. Math. Comp., **63** 589–605 (1994)
33. J. Lügger: *Mathematisches Publizieren und die elektronische Welt*. DMV–Mitteilungen, **2** 4–6 (1994)
34. J. Manz, G. Paramonov, M. Polasek, Ch. Schütte: *Overtone State–selective Isomerization by Series of Infrared Picosecond Laser Pulses: Model Simulations for $(Be_2H_3SD^-)$* . Israel Journal of Chemistry, **34** 115–125 (1994)
35. M. Padberg, D. Alevras: *Order Preserving Assignments*. In: Naval Research Logistics (1994)
36. J. Polzehl: *Regression–Based Short–Term Prediction of Electrical Load for a Power System*. In: ASA Proceedings of Physical & Engineering Sciences Section (1994)
37. S. Reich: *A Momentum conserving symplectic integrators*. Physica D, **76** 375–383 (1994)

38. V. Reiner, G.M. Ziegler: *Coxeter–associahedra*. *Mathematika*, **41** 364–393 (1994)
39. J. Richter–Gebert, G.M. Ziegler: *Zonotopal tilings and the Bohne–Dress theorem*. In: Proc. “Jerusalem Combinatorics ’93” (H. Barcelo, G. Kalai, eds.), *Contemporary Mathematics* **178**, American Math. Society (1994)
40. W. Römisch, R. Schultz: *Quantitative stability of two–stage stochastic programs*. *ZAMM – Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, **74** T587–T589 (1994)
41. B.E. Sagan, Y.–N. Yeh, G.M. Ziegler: *Maximizing Möbius functions on subsets of Boolean algebras*. *Discrete Mathematics*, **126** 293–311 (1994)
42. I.O. Stamatescu, K. Akemi, Ph. de Forcrand, M. Fujisaki, H.C. Hege et al QCDTARO collaboration: *Monte Carlo Calculations for Quantum Chromodynamics using a Massively Parallel Computer*. *Int. J. Mod. Phys. C5*, **2** p. 213 (1994)
43. R. Wunderling, M. Grammel, H.C. Hege: *Parallele LU–Zerlegung großer, unsymmetrischer, dünn besetzter Matrizen bei hohen Kommunikationslatenzen*. *GI/ITG–Workshop, Mitteilungen der Fachgruppe PARS der Gesellschaft für Informatik*, **13**, 191–200 (1994)
44. G.M. Ziegler: *A new local criterion for the lattice property*. *Algebra Universalis*, **31** 608–610 (1994)
45. G.M. Ziegler: *Shellability of chessboard complexes*. *Israel J. Mathematics*, **87** 97–110 (1994)
46. G.M. Ziegler: *Three problems about 4–polytopes*. In: Proc. NATO Advanced Study Institute on “Polytopes: Abstract, convex and computational”, Toronto 1993 (eds. T. Bisztriczky, P. McMullen, A. Weiss), Kluwer Academic Publishers 499–502 (1994)
47. G.M. Ziegler: *Gröbner bases and integer programming*. In: EIDMA mini-course “Computer Algebra with emphasis on discrete algebra and geometry”, Eindhoven, 12 pages (September 1994)

6.4 Monographien

P. Deuffhard, F. Bornemann:

Numerische Mathematik II. Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen

Walter de Gruyter, Berlin, New York (1994), ISBN 3-11-013937-5

Zeitabhängige Prozesse endlichdimensionaler Zustandsgrößen werden durch Anfangswertprobleme gewöhnlicher Differentialgleichungen oder durch differentiell-gebraische Probleme mathematisch beschrieben. Der vorliegende Band Numerische Mathematik II behandelt Methoden zu ihrer effizienten numerischen Lösung im interdisziplinären Kontext des Gebietes Scientific Computing (Wissenschaftliches Rechnen). Die Darstellung der Lösungsmethoden orientiert sich an einer möglichst eingängigen begrifflichen Abstimmung der Gebiete Numerik von Differentialgleichungen und Analysis dynamischer Systeme. Die Vererbung von Eigenschaften kontinuierlicher Differentialgleichungen auf ihre Diskretisierungen zieht sich wie ein roter Faden durch das ganze Buch. Der Inhalt umfaßt Differentialgleichungsmodelle, die Existenz- und Eindeigkeitstheorie sowie die Herleitung, Analyse und Implementierung effizienter adaptiver Integratoren bis hin zur Angabe von öffentlich verfügbarer Software.

Das Buch richtet sich an Studierende der Mathematik und der Naturwissenschaften. Vorausgesetzt werden grundlegende Kenntnisse der Numerischen Mathematik sowie elementare Kenntnisse der Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen.

Konzeptionell schließt Band II unmittelbar an den einführenden Band Numerische Mathematik I an.

P. Deuffhard, A. Hohmann:

Numerical Analysis. A First Course in Scientific Computation

Walter de Gruyter, Berlin, New York (1994), ISBN 3-11-013882-4

Dieses Buch ist die englische Übersetzung der überarbeiteten Auflage des deutschen Lehrbuches "Numerische Mathematik I. Eine algorithmisch orientierte Einführung". Es richtet sich an Studierende der Mathematik, Natur- und Ingenieurwissenschaften sowie an bereits im Beruf stehende Mathematiker, Naturwissenschaftler und Ingenieure aus Forschung und Entwicklung in Industrie und Hochschulen. Ziel ist die Förderung des algorithmischen Denkens. Die Übersetzung wurde im Berichtszeitraum fertiggestellt und wird Anfang 1995 erscheinen.

W. Koepf:

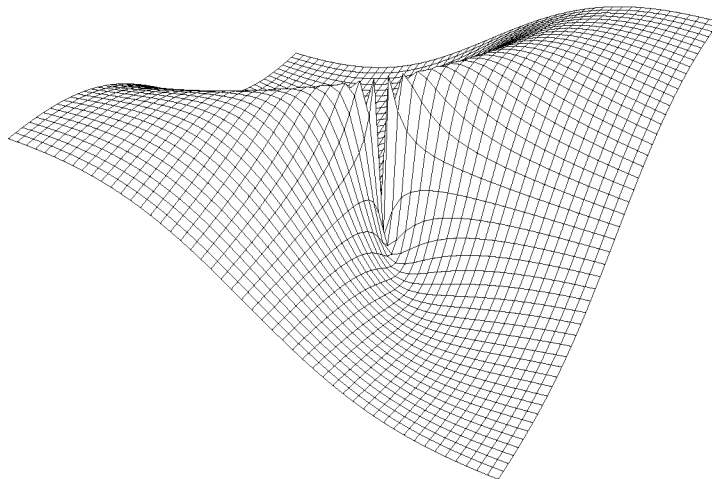
Höhere Analysis mit DERIVE

Vieweg-Verlag, Braunschweig-Wiesbaden (1994), ISBN 3-528-06594-X

Die Miniaturisierung der Computertechnologie sowie die Verbreitung von Computeralgebrasystemen hat zur Folge, daß in der zukünftigen mathematischen Lehre dieser neuen Situation Rechnung getragen und die graphischen, numerischen und symbolischen Fähigkeiten solcher Systeme als Hilfsmittel eingesetzt werden sollten.

Im vorliegenden Forschungsprojekt wurde im Rahmen meiner Vorlesungsaktivität des Analysis-Zyklus am Fachbereich Mathematik/Informatik der Freien Universität Berlin, bei der das Computeralgebrasystem DERIVE als Hilfsmittel zur didaktischen Präsentation des Analysis-Lehrstoffes Verwendung fand, im Berichtszeitraum eine deutsche Lehrbuchversion der mehrdimensionalen Analysis fertiggestellt [1].

Die Abbildung wird in diesem Buch zum besseren Verständnis mehrdimensionaler Funktionen herangezogen.



Die unstetige Funktion $\frac{xy}{x^2 + y^2}$, die koordinatenweise stetig ist

G.M. Ziegler:

Lectures on Polytopes

Springer Verlag (1994), ISBN 3-540-94365-X

Die “Lectures on Polytopes” basieren auf einer Vorlesung an der Technischen Universität Berlin. Sie präsentieren eine Fülle von Ideen, Methoden und Resultaten aus der modernen Polytoptheorie. Die klare und geradlinige Darstellung verwendet hunderte von Zeichnungen. Trotz des elementaren Stils werden für fast alle Resultate vollständige Beweise angeboten. Zum Verständnis wird nur etwas Lineare Algebra vorausgesetzt. Trotzdem wird der Leser rasch von den Grundlagen zu aktuellen Forschungsthemen und interessanten ungelösten Problemen geführt.

Die “Lectures on Polytopes”

- entwickeln die wesentlichen Grundtatsachen der Polytoptheorie, unter Betonung der *Methoden*, die dazu führen (Fourier–Motzkin–Elimination, Schlegel–Diagramme, Schälbarkeit, Gale–Diagramme, orientierte Matroide)
- diskutieren wichtige Beispiele und elegante Konstruktionen (zyklische und nachbarschaftliche Polytope, Zonotope, Minkowskisummen, Permutaeder and Assoziaeder, Faserpolytope, die Lawrence–Konstruktion)
- zeigen die Begeisterung an neuesten Arbeiten und Fortschritten (Kalai’s neue Durchmesserstrahlen, Konstruktion nicht–rationaler Polytope, der Pflasterungssatz von Bohne und Dress, das Upper Bound Theorem, nicht erweiterbare Schälungen)

Sie bieten interessante und anregende Lektüre für Forscher genauso wie für Studenten.

6.5 Habilitationen

Dr. Rüdiger Schultz, Abt. Kombinatorische Optimierung: *Structure and Stability in Two–Stage Stochastic Programming.* Humboldt–Universität zu Berlin (1994)

6.6 Dissertationen

Atef Abdel–Aziz Abdel Hamid, Abt. Kombinatorische Optimierung: *Combinatorial Optimization Problems Arising in the Design and Management of an Automatic Storage System.*

Betreuer (TU Berlin und ZIB): Prof. Dr. M. Grötschel

Carlos Eduardo Ferreira, Abt. Kombinatorische Optimierung: *On Combinatorial Optimization Problems Arising in Computer System Design.*
Betreuer (TU Berlin und ZIB): Prof. Dr. M. Grötschel

Andreas Hohmann, Abt. Numerik: *Inexact Gauss Newton Methods for Parameter Dependent Nonlinear Problems..*
Betreuer (FU Berlin und ZIB): Prof. Dr. P. Deuffhard

Ulrich Nowak, Abt. Numerische Software–Entwicklung: *Adaptive Liniennethoden für nichtlineare parabolische Systeme in einer Raumdimension.*
Betreuer (FU Berlin und ZIB): Prof. Dr. P. Deuffhard

Christof Schütte, Abt. Numerik: *A Quasiresonant Smoothing Algorithm for Solving Large Highly Oscillatory Differential Equations from Quantum Chemistry.*
Betreuer (FU Berlin und ZIB): Prof. Dr. P. Deuffhard

6.7 Diplomarbeiten

Diplomarbeiten von Studentischen Hilfskräften des ZIB, die unter wesentlicher Betreuungsleistung am ZIB entstanden sind und von Studenten, die ihre Arbeiten im Rahmen von ZIB–Forschungsprojekten geschrieben haben und im ZIB betreut wurden, soweit sie im Berichtszeitraum abgeschlossen wurden.

Freie Universität Berlin

Andreas Fischer, Abt. Numerik: *Adaptive Multilevelmethoden für die Kirchhoffplatte.*
Betreuer (FU Berlin und ZIB): Prof. Dr. P. Deuffhard

Tilmann Friese, Abt. Numerik: *Eine adaptive Spektralmethode zur Berechnung periodischer Orbits.*
Betreuer (FU Berlin und ZIB): Prof. Dr. P. Deuffhard

Clemens Klein–Robbenhaar, Abt. Numerik: *Eine Algorithmus zur Pfadverfolgung großer nichtlinearer Systeme unter Ausnutzung von Sparse–Strukturen.*
Betreuer (FU Berlin und ZIB): Prof. Dr. P. Deuffhard

Technische Universität Berlin

Andreas Buchwald, Abt. Kombinatorische Optimierung: *Heuristiken für die Fahrzeugumlaufplanung im ÖVPN.*
Betreuer (TU Berlin und ZIB): Prof. Dr. M. Grötschel

Andreas Lauschke, Abt. Kombinatorische Optimierung: *Ein mathematisches Modell für die Optimierung von Inspektionsintervallen.*

Betreuer (TU Berlin und ZIB): Prof. Dr. M. Grötschel

Claudia Lipp, Abt. Kombinatorische Optimierung: *Facetten von Stabile-Mengen-Polytopen.*

Betreuer (TU Berlin und ZIB): Prof. Dr. M. Grötschel

Stefan Münchhagen, Abt. Kombinatorische Optimierung:

Ein Branch&Cut-Verfahren zur Lösung von Set-Partitioning-Problemen.

Betreuer (TU Berlin und ZIB): Prof. Dr. M. Grötschel

Maren Wiedermann, Abt. Kombinatorische Optimierung: *Facetten von Set-Covering-Polytopen.*

Betreuer (TU Berlin und ZIB): Prof. Dr. M. Grötschel

6.8 Auszeichnungen

Prof. Dr. P. Deuffhard: Gerhard Damköhler-Medaille 1994, verliehen vom Kuratorium der Deutschen Vereinigung für Chemie- und Verfahrenstechnik.

Prof. Dr. G. Ziegler: Gerhard-Hess-Preis, Förderpreis im Gerhard-Hess-Programm der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG)

6.9 Herausgabe von Zeitschriften

P. Deuffhard

- Annals of Numerical Mathematics, J.C. Baltzer, Basel/Schweiz
- Journal of Computational Mathematics, Science Press, Beijing
- Journal Computers & Mathematics, Pergamon Press, Oxford, New York, Seoul, Tokyo
- Numerische Mathematik, Springer International

M. Grötschel

- Discrete & Computational Geometry
- Computational and Applied Mathematics
- Computing
- Mathematical Programming A
- Mathematical Programming B

- Mathematics of Operations Research
- SIAM Journal on Discrete Mathematics
- Surveys of Mathematics for Industry
- Zeitschrift für Operations Research

W. Koepf

- The International DERIVE Journal

7 Produkte

7.1 Symbolische Verfahren

7.1.1 REDUCE

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 Joint Institute for Nuclear Research (Dubna, Rußland), Queen Mary and Westfield College (London), Technische Universität Prag (Tschechien) und Academia Sinica (Beijing, PR China) sowie Händler in Japan und Polen.

Beiträge des ZIB zu REDUCE:

BOOLEAN	Boolesche Algebra (H. Melenk)
DEFINT	Bestimmte Integrale, auch mit unendlichem Intervall (W. Neun, K. Gaskell)
FPS	Differentialgleichungen und symbolische Potenzreihen (W. Neun, W. Koepf)
GNUPLOT	Interface zum Grafikpaket GNUPLOT (H. Melenk)
GROEBNER	Gröbner Basen und Lösen algebraischer Gleichungssysteme (H. Melenk, H. M. Möller, W. Neun)
IDEALS	Rechnen in polynomialen Idealen (H. Melenk)
LININEQ	Lösen linearer Ungleichungssysteme (H. Melenk)
MSOLVE	Lösen modularer Gleichungen und Systeme (H. Melenk)
NCPOLY	Nichtkommutative Polynome (H. Melenk, J. Apel)
NUMERIC	Numerische (approximative) Algorithmen (H. Melenk)
REACTION	Chemische Reaktionssysteme (H. Melenk)
SPECFN	Spezielle Funktionen (W. Neun, C. Cannam et al.)
SYMMETRY	Blockdiagonalformen symmetrischer Matrizen (K. Gatermann)
TAYLOR	Multivariate abgebrochene Taylorreihen (R. Schöpf)
ZEILBERG	symbolische Summation (W. Koepf, G. Stölting)

Diese Pakete sind entweder Bestandteil des Systems REDUCE oder – falls sie nach der letzten Version entwickelt wurden – über anonymous FTP abrufbar.

7.1.2 Mathematica

POWERSERIES

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

pub/PowerSeries und ferner in der Datenbank MathSource unter der Nummer 0207-379 erhältlich.

7.1.3 Maple

FPS

D. Gruntz, W. Koepf: *Ein Maple Package für die Behandlung von Differentialgleichungen und symbolischen Potenzreihen*. Das Package ist auf dem Server `ftp.zib-berlin.de` über anonymous ftp im Verzeichnis `pub/FPS` erhältlich. Es ist ferner Teil der `share library` der MAPLE Version V.3.

SUMMATION

W. Koepf, G. Stölting: *Ein Maple Package für die symbolische Summation*. Das Package ist auf dem Server `ftp.zib-berlin.de` über anonymous ftp im Verzeichnis `pub/summation` erhältlich.

7.2 code++

Eine C++ Klassenbibliothek für gewöhnliche Differentialgleichungen A. Hohmann: *An Implementation of Extrapolation Codes in C++*. Die Bibliothek ist über den anonymen ftp-Zugang `ftp.zib-berlin.de` im Verzeichnis `pub/code++` verfügbar

`elib.ZIB-Berlin.de (130.73.108.11)`

in dem Verzeichnis `pub/code++`.

7.3 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. Die Software ist über den anonymen ftp-Zugang:

`ftp.zib-berlin.de`

in dem Verzeichnis `pub/codelib` verfügbar.

7.3.1 Große nichtsymmetrische lineare Gleichungssysteme

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

7.3.2 Nichtlineare Gleichungssysteme und Ausgleichsrechnung

NLEQ1 Newton-Verfahren, vollbesetzte Jacobi-Matrix, ohne Rangstrategie

NLEQ1S Newton-Verfahren, dünnbesetzte Jacobi-Matrix, ohne Rangstrategie

NLEQ2 Newton-Verfahren, vollbesetzte Jacobi-Matrix, mit Rangstrategie

NLSCON Gauss-Newton-Verfahren für nichtlineare Ausgleichsrechnung, evtl. mit nichtlinearen Gleichungsbeschränkungen (mnemotechnisch für: Nonlinear Least Squares with nonlinear equality CONstraints)

GIANT Inexaktes Newton-Verfahren für sehr große Systeme, iterative Lösung der linearen Gleichungssysteme (mnemotechnisch für: Global Inexact Affinvariant Newton Techniques)

7.3.3 Lösung von Anfangswertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen

EULEX Nichtsteife Systeme erster Ordnung, explizite Euler-Diskretisierung mit h -Extrapolation

DIFEX1 Nichtsteife Systeme erster Ordnung, explizite Mittelpunktsregel mit h^2 -Extrapolation

DIFEXM Nichtsteife Systeme zweiter Ordnung, Störmer-Diskretisierung mit h^2 -Extrapolation

KEPLEX Nichtsteife Systeme zweiter Ordnung, Kepler-Diskretisierung mit h^2 -Extrapolation

EULSIM Steife Systeme erster Ordnung, semi-implizite Euler-Methode mit h -Extrapolation

METAN1 Steife Systeme erster Ordnung, semi-implizite Mittelpunktsregel mit h^2 -Extrapolation

LIMEX Extrapolationsverfahren mit h -Extrapolation, linear-implizite differentiell-algebraische Systeme

LIMEXS LIMEX-Variante für große Systeme mit dünnbesetzter Jacobimatrix

MEXX h -Extrapolationsverfahren für differentiell-algebraische Systeme aus der Mehrkörperdynamik

LARKIN Simulation großer chemischer Reaktionskinetik

7.3.4 Lösung von Randwertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen

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

7.3.5 Stationäre partielle Differentialgleichungen

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

7.3.6 Instationäre partielle Differentialgleichungen

- KARDOS Reaktions- Diffusionsgleichungen in 1D unter Verwendung eines speziellen KASKADE-Baukastens
- KASTIO Parabolischer Gleichungslöser (2D, 3D)

7.3.7 Freie Randwertprobleme für partielle Differentialgleichungen

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

7.3.8 Gemischt symbolisch-numerische Verfahren

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

7.4 GOS — Datenbank für kulturgeschichtliche Daten

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

8 Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB–Mitarbeitern

8.1 Vorträge und Gastaufenthalte

D. Alevras

18.08.94 *Order Preserving and Contiguous Polytopes*. 15th International Symposium on Mathematical Programming, University of Michigan, Ann Arbor, Michigan, USA

N. Ascheuer

11.02.94 *On–line Hamiltonian path problems*. 13. Berliner Algorithmen Tag, Berlin

25.05.94 *The Asymmetric Travelling Salesman Problem with precedence constraints*. Science Workshop, Giens, Frankreich

18.08.94 *A Branch&Cut approach to the Sequential Ordering Problem*. 15th International Symposium on Mathematical Programming, University of Michigan, Ann Arbor, Michigan, USA

31.08.94 *Solving Asymmetric Travelling Salesman Problems with side constraints by Branch&Cut*. International Conference on Operations Research OR'94, TU Berlin

R. Borndörfer

01.02.94 *On Combinatorial optimization problems arising in computer system design*. CORE, Louvain la Neuve, Belgien

19.08.94 *Solving Set Partitioning Problems arising in Handicapped People's Transport*. 15th International Mathematical Programming Symposium, Ann Arbor, Michigan, USA

23.08.94 *Solving Set Partitioning Problems by Branch&Cut*. Workshop on “Algorithmic Approaches to large and complex combinatorial Optimization Problems”, Giens, France

31.08.94 *Solving Set Partitioning Problems arising in Handicapped People's Transport*. International Conference on Operations Research 1994, TU Berlin

10.11.94 *Optimization in Handicapped People's Transport*. Workshop “Optimization in Production and Transportation”, Scheveningen, Niederlande

F. Bornemann

10.10.94 *On the convergence of cascadic iterations.* Polnisch–Deutscher Workshop “Adaptive Techniques for Scientific Modelling”, Warschau, Polen 9.–10.10.199

16.12.94 *Kaskadische Mehrgitterverfahren.* Albert–Ludwigs–Universität Freiburg

M. Brandt

31.08.94 *Mean Sojourn Times in a Processor Sharing System with Queues of Different Types.* International Conference on Operations Research OR’94, TU Berlin

H. Busch

14./18.03.94 *Unicos 8.0 Experiences.* Cray User Group Conference, San Diego/USA

06.05.94 *Fairer Batch — was erwarte ich vom URM?* Arbeitskreis UNICOS, INPRO Berlin

27./28.10.94 *ZIB Rechnerplanung: Schnelle Rechner — schnelle Netze.* Arbeitskreis UNICOS, Zürich/Schweiz

W. Dalitz

19.02.94 *OPT–NET: A Communication Facility of the Special Interest Group for Optimization of the German Mathematical Association.*
Joint meeting of “DMV–Projekt Fachinformation” und “Euromath Advisory Board”, Universität – GH Paderborn 18.–20.02.94

19.12.94 *Strukturüberlegungen für das Verteilte Informationssystem der Mathematik.*
Hyper–G Tutorial, Fachbereich Mathematik FU Berlin 19.–20.12.94

P. Deuffhard

07.02.94 *Neuere Ergebnisse zum Kaskadenprinzip bei partiellen Differentialgleichungen.* Mathematisches Institut, Universität München

17.03.94 *Das Kaskadenprinzip für partielle Differentialgleichungen.* Workshop “Scientific Computing in der Theoretischen Physik”, Berlin

28.04.94 *Adaptive Multilevel FEM for PDE’s from Technology and Medicine.* Warsaw University, Poland

- 19.05.94** *Die neue Rolle der Mathematik: Scientific Computing in Medizin und Technologie.* Harnack-Haus, Berlin
- 21.06.94** *Gruppendynamik der Numerik — Anstöße zur Kooperation.* Zentrum für Interdisziplinäre Forschung, Universität Bielefeld
- 06.09.94** *Recent Progress in Dynamical Process Simulation.* Tagung ECMI 94, Universität Kaiserslautern
- 20.09.94** *Hyperthermie: adaptive Multilevel-Methoden in 3-D und ihre klinische Anwendung.* DMV Jahrestagung 1994, Duisburg
- 09.10.94** *Adaptive Discrete Galerkin Methods for Polyreaction Simulation.* Polish-German Workshop “Adaptive Techniques for Scientific Models”, University of Warsaw, Poland
- 17.10.94** *Das Kaskadenprinzip zur numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen.* Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät, RWTH Aachen
- 27.10.94** *Das Kaskadenprinzip zur effizienten numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen.* Technische Universität Chemnitz-Zwickau
- 11.11.94** *Adaptive Galerkin-Methoden für dynamische Systeme.* Zentrum für Nichtlineare Dynamik, Institut für Mathematik, Universität Potsdam
- 18.11.94** *Das Kaskadenprinzip zur numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen.* Institut für Angewandte Mathematik, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
- 23.11.94** *Adaptive Multilevel FEM for PDE's.* Charles University, Prague
- 08.12.94** *Adaptive Multilevelmethoden für zeitabhängige PDG-Systeme.* Siemens, Erlangen

B. Erdmann

- 28.05.94** *KASKADE – ein Baukasten zur Programmierung von adaptiven Finite-Elemente-Methoden.* Workshop über “Parallele Lösung großer Gleichungssysteme” TU Chemnitz-Zwickau 27.–28.05.1994

C. Ferreira

- 01.02.94** *On Combinatorial optimization problems arising in computer system design.* CORE, Louvain la Neuve, Belgien

H.–H. Frese

21.04.94 *Visualisierungsservice am ZIB. Workshop Videoaufzeichnung in der wissenschaftlichen Visualisierung*, Konrad–Zuse–Zentrum Berlin

J. Fröhlich

07.09.94 *An adaptive Galerkin method for the PDF transport equation of turbulent reactive flows*. 8th Conference on the European Consortium for Mathematics in Industry, Kaiserslautern

23.09.94 *Le calcul de la composition dans des écoulements turbulents reactifs*. Université Nice–Sophia–Antipolis, Nice/France

06.10.94 *Eine adaptive Galerkinmethode zur Modellierung des Reaktionstermines in turbulenten reaktiven Strömungen*. 9. DGLR–Fach–Symposium, AG Stab, Erlangen

K. Gatermann

10.02.94 *Dynamische Systeme am ZIB. Arbeitstagung Nichtlineare Dynamik*, FU Berlin

24./30.07.94 *Solving symmetric systems of nonlinear equations using symbolic methods, Bifurcation and Symmetry, Numerical Methods in Mathematics and Applications*. Marburg, 24.–30 Juli 1994.

20.09.94 *Invariante, Äquivariante und die Lösung von Gleichungssystemen*. DMV–Tagung, Duisburg

R. Götz

04.11.94 *Accounting and Performance Evaluation unter UNIX*. Deutschsprachige Internationale SAS Benutzerkonferenz, Hannover

J. Gottschewski

07.02.94 *HPSC — ein integraler Bestandteil der Forschung*. Vortrag im Rahmen der Aus- und Fortbildung von Fach- und Führungskräften aus Entwicklungsländern der Carl Duisberg Gesellschaft e.V., Konrad–Zuse–Zentrum Berlin

25.05.94 *ZIB and some aspects of Supercomputing in Northern Germany*. Cray Research, Inc., Eagan/USA

14.12.94 *Überlegungen zum Supercomputing*. Seminar des Arbeitskreises Supercomputing im ZKI, Dresden

M. Grammel

- 20.09.94** *Ein paralleles Programmiermodell für ein objektorientiertes Branch&Cut-Framework.* GI-Workshop, Potsdam
- 17.11./2.12.94** *Programmierung des Cray T3D mit PVM und Shared-Memory-Primitiven.* Vortragsreihe über Architektur und Programmierung des neuen Parallelrechners Cray T3D, ZIB

M. Grötschel

- 17.02.94** *Schnitte, Metriken und Gitter.* gemeinsames mathematisches Kolloquium der Technischen Universität München und der LMU München
- 18.02.94** *New perspectives of distributed information systems for mathematics.* Joint meeting of “DMV-Projekt Fachinformation” und “Euromath Advisory Board”, Universität – GH Paderborn 18.–20.02.94
- 28.02.94** *Diskrete Mathematik: Theorie, Algorithmen, Anwendungen.* 28. Bundestagung für Didaktik der Mathematik, Universität – GH Duisburg, Duisburg 28.02.–04.03.94
- 15.03.94** *Solving Real-World Decision Models.* “Developments in Polyhedral Combinatorics” Fifteenth Annual D.R. Fulkerson Lectures Series, Cornell University, Ithaca, New York, USA
- 17.03.94** *Combinatorial Optimization Techniques in Computer Design and Manufacturing.* “Developments in Polyhedral Combinatorics” Fifteenth Annual D.R. Fulkerson Lectures Series, Cornell University, Ithaca, New York, USA
- 18.03.94** *Design of Survivable Communication Networks.* “Developments in Polyhedral Combinatorics” Fifteenth Annual D.R. Fulkerson Lectures Series, Cornell University, Ithaca, New York, USA
- 03.05.94** *Das Zerlegen von Mengen: Könnte das jemanden interessieren?* Mathematik-Olympiade an der Universität Magdeburg, Magdeburg
- 12.05.94** *Optimierung: Ein Überblick.* Tagung des Cusanuswerkes, Mathematisches Forschungszentrum Oberwolfach, Oberwolfach 11.–15.05.94
- 12.05.94** *Lineare Programmierung und Konvexitätstheorie.* Tagung des Cusanuswerkes, Mathematisches Forschungszentrum Oberwolfach, Oberwolfach
- 13.05.94** *Schnittebenenverfahren und polyedrische Kombinatorik.* Tagung des Cusanuswerkes, Mathematisches Forschungszentrum Oberwolfach, Oberwolfach

- 14.05.94** *Einsatz diskreter Mathematik in Verkehr und Transport.* Tagung des Cusanuswerkes, Mathematisches Forschungszentrum Oberwolfach, Oberwolfach
- 14.05.94** *Elektronische Information und Kommunikation in der Mathematik.* Konferenz der Mathematischen Fachbereiche, Universität Frankfurt, Frankfurt/Main
- 15.05.94** *Anwendungen diskreter Mathematik in der industriellen Produktion.* Tagung des Cusanuswerkes, Mathematisches Forschungszentrum Oberwolfach, Oberwolfach
- 10.06.94** *Kombinatorische Optimierungsprobleme beim Entwurf und der Fertigung von Computern.* Fachbereich Informatik, Universität Saarbrücken, Saarbrücken
- 14.06.94** *Zur Lösung großer praktischer kombinatorischer Optimierungsprobleme.* Abschlußkolloquium des DFG–Schwerpunktes “Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung”, Irsee 12.–15.06.94
- 22.06.94** *Routenplanung im öffentlichen Nahverkehr.* Kolloquium der Mathematik und Informatik der Freien Universität Berlin, Berlin
- 24.06.94** *Optimierung: eine Möglichkeit zur sinnvollen Verwendung knapper Ressourcen.* Forschungstag der Technischen Universität Berlin, Berlin
- 28.06.94** *Der Stand der Diskussion in der Mathematik bezüglich des verteilten elektronischen Informationssystems — Vorbereitungen, neue Aspekte und Tendenzen.* 5. WORKSHOP des DMV–Projektes Fachinformation, Universität Halle–Wittenberg, Halle/Saale 27.–29.06.94
- 03.–11.08.94** ICM’94 International Congress of Mathematicians, ETH Zürich, Schweiz
- 19.08.94** *On integer programs arising in the design of main frames computers.* 15th International Symposium on Mathematical Programming, University of Michigan, Ann Arbor, Michigan, USA 15.–19.08.94
- 30.8.–02.09.94** International Conference on Operations Research, TU Berlin
- 07.09.94** *New Approaches to VLSI–Routing.* 8th Conference of the European Consortium for Mathematics in Industry (ECMI), Universität Kaiserslautern 06.–10.09.94
- 18.–24.09.94** Jahrestagung der Deutschen Mathematiker–Vereinigung, Universität–GH Duisburg

10.–11.10.94 Workshop im Rahmen des BMFT-Förderprogramms “Anwendungsorientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik”, Wissenschaftszentrum Schloß Thurnau, Bayreuth

27.10.94 *Kombinatorische Optimierungsprobleme beim öffentlichen Nahverkehr*, Mathematisches Kolloquium der Universität Düsseldorf, Düsseldorf

28.10.94 *Chip-Verdrahtung mit polyedrischen Methoden*. Kolloquium der Mathematik und Informatik der Universität zu Köln, Köln

H.Ch. Hege

17.11./2.12.94 *Cray T3D — Architektur und Hardware*. Vortragsreihe über Architektur und Programmierung des neuen Parallelrechners Cray T3D, ZIB

09.12.94 *Simulation und Visualisierung in der Hyperthermieplanung*. Festvortrag anlässlich der Einweihung des Parallelrechners Cray T3D, ZIB

15.12.94 *Physik und Computergrafik — eine fruchtbare wechselseitige Beziehung*. Theoretisches Colloquium, Fachbereich Physik der Universität Freiburg

R. Kornhuber

28.01.94 *Monotone Mehrgittermethoden für Variationsungleichungen*. TU Darmstadt

25.04.94 *Monotone Mehrgittermethoden für Variationsungleichungen*. Institut für Angewandte Analysis und Stochastik, Berlin

20.05.94 *Monotone Mehrgittermethoden für nichtlineare Variationsprobleme*. Universität Stuttgart

27./28.05.94 *Monotone Multigrid Methods for Nonlinear Variational Problems*. Workshop Parallele Lösung großer Gleichungssysteme, TU Chemnitz-Zwickau

05.07.94 *Monotone Mehrgittermethoden für nichtlineare Variationsprobleme*. Universität Gesamthochschule Kassel

26./28.09.94 *Monotone Multigrid Methods for Elliptic Variational Inequalities*. GAMM-Workshop on Multilevel Methods, Meisdorf (Harz)

W. Koepf

- 01.03.94** *Konzeption eines Leistungskurses Analysis unter Einbeziehung von DERIVE.* Lehrerfortbildungskurs Wingst, ganztägiger Workshop mit Vortrag
- 24.03.94** *Algorithmic work with orthogonal polynomials and special functions.* The Rhine Workshop on Computer Algebra, Karlsruhe
- 06.04.94** *Algorithmische Bestimmung von Differentialgleichungen.* GAMM Jahrestagung, Braunschweig
- 02.05.94** *Einführung in MATHEMATICA am PC.* Universität Potsdam
- 29.06.94** *Möglichkeiten des Einsatzes von DERIVE und MATHEMATICA.* Universität Jena
- 13.07.94** *Calculus projects with DERIVE.* The First International DERIVE Conference, Plymouth, England
- 20.09.94** *Automatische Erzeugung von Rekursionen hypergeometrischer Funktionen.* DMV-Tagung 1994, Duisburg
- 15.11.94** *DERIVE im Analysisunterricht der Oberstufe.* 41. MNU-Tagung, Bremerhaven
- 07.12.94** *Das Identifikationsproblem für transzendente Funktionen.* Universität Paderborn

J. Lang

- 20.07.94** *Adaptives Lösen von Reaktions-Diffusions-Gleichungen.* Josef-Egle-Institut, Stuttgart
- 21.07.94** *KARDOS — ein Programmpaket zur Simulation von eindimensionalen Reaktions-Diffusions-Gleichungen.* Fachhochschule für Technik, Stuttgart
- 19.09.94** *Two-dimensional fully adaptive solution of reaction-diffusion equations.* 7. International Seminar on Numerical Solution of Differential Equations and Applications, Halle/Saale
- 09.10.94** *High-Resolution Schemes for Reaction-Diffusion-Problems.* Polish-German Workshop on Adaptive Techniques for Scientific Modelling, Warschau/Polen
- 01.12.94** *Numerische Lösung von Reaktions-Diffusions-Gleichungen.* Martin-Luther-Universität, Halle/Wittenberg

A. Loebel

- 16.08.94** *Solving very large vehicle scheduling problems in public mass transit.*
15th International Symposium on Mathematical Programming, Ann Arbor,
Michigan, USA
- 31.08.94** *Solving very large vehicle scheduling problems in public mass transit.*
Operations Research '94, Berlin
- 11.10.94** *Fahrzeugumlaufplanung im ÖPNV.* BMFT-Workshop "Anwendungs-
orientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik" im Schwer-
punkt Optimierung, Wissenschaftszentrum Schloß Thurnau
- 11.11.94** *Optimizing the Multiple Depot Vehicle Scheduling Problem in Public
Mass Transit.* Workshop "Optimization in Production and Transportation,
Scheveningen, Niederlande

J. Lügger

- 04.02.94** *Planungen für ein verteiltes elektronisches Fachinformationssystem für
die Mathematik in Deutschland.*
Treffen des AK "Fachinformation" der Gesellschaft für Informatik, GMD
Darmstadt
- 18.03.94** *DMV-Projekt "Fachinformation" und Aspekte der Planungen für ein
verteiltes, elektronisches Fachinformationssystem für die Mathematik.*
Treffen der AG "Elektronisches Publizieren" des Arbeitskreises "Fachinfor-
mation" der GI, Institut für Informatik, TU München
- 28.05.94** *Aspects of a Distributed Information System for Mathematics in Ger-
many.*
EmC Workshop on EMIR, Euromath Center, Kopenhagen 27.–28.05.94
- 08.06.94** *Neue Perspektiven eines Verteilten Informationssystems für die Ma-
thematik in Deutschland.*
19. DFN-Betriebstagung, Berlin 07.–08.06.94
- 28.06.94** *Design Überlegungen für ein verteiltes Informationssystem für die Ma-
thematik in Deutschland.*
5. Workshop des DMV-Projekts "Fachinformation", Martin-Luther-Universität,
Halle-Wittenberg 27.–29.06.94
- 12.07.94** *Das Lebende Mathematische Museum als Teil des Verteilten Informa-
tionssystems für die Mathematik.*
5th Annual Göttingen Workshop on the History of Modern Mathematics,
Staats- und Universitätsbibliothek Göttingen 11.–13.07.94

29.11.94 *New Perspectives of a Distributed Information System for Mathematics in Germany.*

NSC'94 – The Network Service Conference 1994, London 28.–30.11.94

01.12.94 *Towards a Distributed Information System for Mathematics – the German Perspective and First Steps of the DMV.*

Kurzvortrag im Rahmen einer Podiumsdiskussion zur Konferenz “The Future of Mathematical Communication”, Mathematical Science Research Institute, Berkeley, California/USA 30.11.–03.12.94

19.12.94 *Strukturüberlegungen für das Verteilte Informationssystem der Mathematik.*

Hyper-G Tutorial, Fachbereich Mathematik FU Berlin 19.–20.12.94

A. Martin

11.02.94 *Packing Steiner trees by cutting planes.* UTD, Dallas, TX, USA

07.03.94 *The Steiner tree packing problem: A polyhedral approach.* Rice University, Houston, USA

23.05.94 *Optimum packing of paths on the wheel.* Workshop “Solving hard combinatorial optimization problems”, Giens, Frankreich

23.06.94 *Packing Steiner trees (and paths) by cutting planes.* Televerkets Forskningsinstitutt Oslo, Norwegen

18.08.94 *Optimum packing of paths on the wheel: The noncrossing case.* 15th Symposium on Mathematical Programming, Ann Arbor, USA

19.08.94 *Solving multiple knapsack problems by cutting planes.* 15th Symposium on Mathematical Programming, Ann Arbor, USA

30.11.94 *Routing in VLSI-design by cutting planes.* Universität São Paulo, Brasilien

H. Melenk

28.08.94 *The REDUCE Computer Algebra System – Overview.* Symposium “Computer Algebra in Science and Engineering”, Bielefeld

29.08.94 *Automatic symbolic solution of nonlinear algebraic equation systems.* Symposium “Computer Algebra in Science and Engineering”, Bielefeld

U. Nowak

- 04.02.94** *Theorie und Praxis iterativer Methoden für nichtsymmetrische lineare Gleichungssysteme.* Disputationsvortrag, FB Mathematik und Informatik, FU Berlin
- 17.03.94** *Adaptive Linienmethoden für nichtlineare parabolische Systeme in einer Raumdimension.* Workshop “Scientific Computing in der Theoretischen Physik”, Berlin
- 07.09.94** *Adaptive Linienmethoden für nichtlineare parabolische Systeme in einer Raumdimension.* HMI Berlin, Bereich “Solare Energetik”
- 13.10.94** *Numerische Simulation mit selbstadaptiven Extrapolationsverfahren.* 9. Symposium “Simulationstechnik”, Stuttgart

J. Polzehl

- 16.03.94** *Projection Pursuit based Discriminant Analysis.* Universität of New South Wales, Sydney, Australien
- 30.03.94** *Short-Term Load Forecast for a Power Network.* Centre for Mathematics and its Applications, Australian National University, Canberra, Australien
- 14.06.94** *Regression-Based Short-Term Prediction of Electrical Load for a Power System.* Spring Research Conference on Statistics in Industry and Technology, Chapel Hill, USA
- 25.06.94** *Projection Pursuit Discriminant Analysis.* 57th Annual Meeting of the Institute of Mathematical Statistics, Chapel Hill, USA
- 14.12.94** *Bias corrected bootstrap criteria for bandwidth selection in density estimation.* Forschungsseminar Mathematische Statistik, IAAS, Berlin

S. Reich

- 18.06.94** *Smoothed dynamics of highly oscillatory Hamiltonian systems.* IMA Summer School: Molecular Dynamics, Minneapolis, USA
- 09.10.94** *Soft constraints in molecular dynamics.* National Institute of Health, Bethesda, USA

F. Schmidt

- 17.02.94** *Discrete Transparent Boundary Condition for Fresnel's Equation*. Integrated Photonics Research Conference, San Francisco, USA
- 11.04.94** *Phase-adaptive basis functions for a multilevel finite element solution of the paraxial wave equation*. Linear and Nonlinear Integrated Optics Conference, Lindau
- 16.11.94** *Entwicklung von adaptiven Multilevel-Methoden zur Berechnung von Eigenlösungen der Helmholtzgleichung für Halbleiterstrukturen der integrierten Optik*. Statusseminar zum BMBF-Förderprogramm "Anwendungsorientierte Verbundvorhaben auf dem Gebiet der Mathematik", Kiel

Ch. Schütte

- 07.09.94** *Manipulation of Chemical Reactivity: Fast Simulation of Laser-Induced Excitation of Molecules*. ECMI-Tagung, Kaiserslautern
- 09.10.94** *A Quasiresonant Smoothing Algorithm for Highly Oscillatory ODEs from Quantum Chemistry*. Polnisch-Deutscher Workshop "Adaptive Techniques for Scientific Modelling", Warschau, Polen 9.-10.10.199

R. Schultz

- 12.01.94** *A Fritz John Optimality Condition using the Approximate Subdifferential (nach Glover/Craven)*. Forschungsseminar "Numerik Stochastischer Modelle", Humboldt-Universität zu Berlin
- 23.01.94** *Algebraic Prerequisites for Stochastic Integer Programming*. Minisymposium on Stochastic Programming, Berlin
- 05.04.94** *Asymptotic Properties of Two-Stage Stochastic Integer Programs*. Combinatorial Optimization 94 (CO 94), Amsterdam, Niederlande
- 23.05.94** *Two-Stage Stochastic Integer Programs: Structure, Stability and Algorithms*. Stochastics and Optimization Seminar, Department of Civil Engineering and Operations Research, Princeton University, USA
- 26.05.94** *Stability Analysis of Stochastic Programs — A Tutorial*. Sixteenth Symposium on Mathematical Programming with Data Perturbations, Washington D.C., USA
- 26.05.94** *Stability of Stochastic Integer Programs*. Sixteenth Symposium on Mathematical Programming with Data Perturbations, Washington D.C., USA

- 08.06.94** *Mathematical Programming with Data Perturbations — A Review*. Forschungsseminar "Numerik Stochastischer Modelle", Humboldt-Universität zu Berlin
- 15.06.94** *Stochastische Ganzzahlige Optimierungsmodelle*. Abschlußkolloquium, DFG-Schwerpunkt "Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung", Irsee
- 30.06.94** *Two-Stage Stochastic Integer Programs*. Seventh French-German Conference on Optimization, Dijon, France
- 19.08.94** *Approaching to Quantitative Stability in Stochastic Integer Programming*. 15th International Symposium on Mathematical Programming, Ann Arbor, Michigan, USA
- 31.08.94** *Some Models and Algorithms for Power Dispatch in the Eastern Part of Germany*. International Conference on Operations Research OR'94, Berlin
- 11.10.94** *Zur Modellierung der optimalen Blockauswahl in Kraftwerkssystemen*. BMFT-Workshop "Anwendungsorientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik", Thurnau
- 02.11.94** *Polyedrische Unterteilungen in linearen stochastischen Optimierungsaufgaben*. Forschungsseminar "Numerik stochastischer Modelle", Institut für Mathematik, Humboldt-Universität zu Berlin
- 04.11.94** *Stochastic Integer Programming*. Vierzehnter Berliner Algorithmen-Tag, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin
- 28.11.94** *Struktur, Stabilität und Lösungsverfahren in der stochastischen ganzzahligen Optimierung*. Institut für Mathematik, Universität Würzburg
- 20.12.94** *Gröbner-Basen und ganzzahlige lineare Optimierung*. Habilitation, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät II, Humboldt-Universität zu Berlin

U. Schwarz

- 22.12.94** *Visualisierungsmethoden zur diskreten Sinus-Gordon Gleichung*. Workshop "Experimentelle, insbesondere computergraphische Methoden in der Mathematik", Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

W. Sperber

15.09.94 *Nutzung der neuen Kommunikationstechnologien für die Abwicklung von Forschungsvorhaben vom Antrag bis zum Ergebnistransfer.* Kurzvortrag auf der Sitzung des Arbeitskreises Projektmanagementsystem, BMFT Bonn

D. Stalling

10.10.94 *Linienintegral-Faltungsmethode zur Visualisierung von Vektorfeldern.* Berliner Colloquium für Wissenschaftliche Visualisierung

Th. Steinke

07.02.94 *UniChem-Präsentation.* Vortrag im Rahmen der Aus- und Fortbildung von Fach- und Führungskräften aus Entwicklungsländern der Carl Duisberg Gesellschaft e.V., Konrad-Zuse-Zentrum Berlin

10.08.94 *UniChem at ZIB: Applications and Problems.* UniChem Advisory Board Meeting, Eagan/USA

22.09.94 *Verteilte Anwendungen in der Chemie.* Präsentation zur Eröffnung des Berliner Metropolitan Area Networks (MAN) gemeinsam mit dem Landesamt für Informationstechnik Berlin (LIT) im Berliner Rathaus

H. Stüben

30.09.94 *Probing the Continuum Limit in Non-Compact QED: New Results on Large Lattices.* The XII International Symposium on Lattice Field Theory "LATTICE 94", Bielefeld

17.11.+2.12.94 *Programmierung des Cray-T3D in CRAFT.* Im Rahmen einer Vortragsreihe über Architektur und Programmierung des neuen Parallelrechners Cray T3D, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin

R. Weismantel

08.03.94 *The 0/1 knapsack polytope.* Center of Operations Research and Econometrics, Louvain-la-Neuve, Belgien

03.05.94 *Hilbert bases and the facets of special knapsack polytopes.* Center of Operations Research and Econometrics, Louvain-la-Neuve, Belgien

24.05.94 *The node capacitated graph partitioning problem.* Conference "Solving Hard and Complex Combinatorial Optimization Problems", Giens, Frankreich

- 11.07.94** *Hilbert bases and the facets of special knapsack polytopes.* Euroconference on Combinatorial Geometry, Anogia, Kreta
- 18.08.94** *On the 0/1 knapsack polytope.* Symposium on Mathematical Programming, Ann Arbor, MI, USA
- 18.08.94** *The Node Capacitated Graph Partitioning Problem.* Symposium on Mathematical Programming, Ann Arbor, MI, USA
- 31.08.94** *Solving Graph Partitioning Problems under Side Constraints.* International Conference on Operations Research, Berlin
- 27.09.94** *Schnittebenen für Rucksackprobleme.* Vorlesung, TU Graz, Österreich

R. Wunderling

- 20.09.94** *Parallele LU-Zerlegung großer, unsymmetrischer, dünn besetzter Matrizen bei hohen Kommunikationslatenzen.* GI-Workshop, Potsdam

G.M. Ziegler

- 07.01.94** *Kurze Wege und lange Umwege: Zur Kombinatorik und Geometrie des Simplex-Verfahrens.* Mathematisches Kolloquium, Universität Magdeburg
- 28.01.94** *Some random walks on directed graphs suggested by linear programming problems.* Journée “Graphes et Combinatoire” Seminaire Berge-Rosenstiehl, CAMS – E.H.E.S.S.
- 01.02.94** *Fünf Türme auf einem Schachbrett und ihr “Komplex”.* Mathematisches Institut, Universität Darmstadt
- 09.04.94** *Three problems on four-dimensional polytopes.* Eighthundred and ninety-second meeting of the American Mathematical Society, Polytechnic University, Brooklyn, New York, Special Session on “Discrete Geometry”
- 13.04.94** *Random walks on digraphs corresponding to some interesting linear programs.* Massachusetts Institute of Technology (MIT), Cambridge, MA, USA
- 19.04.94** *Klee-Minty cubes and the upper bound problem — on the geometry of the simplex algorithm.* Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University, New York, USA
- 23.05.94** *Combinatorics of 4-dimensional polytopes.* Konferenz über “Diskrete Geometrie”. Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

- 12.06.94** *Polytopes, incidence theorems, and the non-Steinitz theorem.* (On work by Jürgen Richter-Gebert), Invariant Methods in Discrete and Computational Geometry Williamstadt, Curacao (Netherlands Antilles)
- 04.07.94** *Topology of subspace arrangements I.* Centre International de Rencontres Mathématiques (C.I.R.M.), Marseille-Luminy, France
- 30.08.94** *On low-dimensional polytopes.* First Euroconference on Crete: “Combinatorial Geometry”, Kreta
- 01.09.94** *Randomized simplex algorithms on Klee-Minty cubes.* International Conference on Operations Research in Berlin
- 05.09.94** *Constructing the permuto-associahedron (and the cyclo-associahedron).* International Conference on Convexity, Marne-la-Vallée
- 19.09.94** *Recent progress on polytopes.* Jahrestagung der Deutschen Mathematiker-Vereinigung in Duisburg
- 26/30.11.94** Zwei Vorträge: *Gröbner bases and integer programming.* EIDMA Course on “COMPUTER ALGEBRA with emphasis on discrete algebra and geometry” Euler Institute of Discrete Mathematics and its Applications, Eindhoven
- 07.11.94** *Homotopy limits and applications.* Mathematics Colloquium, University of California at Davis, USA
- 23.11.94** *Homotopielimiten und Anwendungen.* Oberseminar Algebraische Topologie, Universität Göttingen

G. Zumbusch

- 27.05.94** *Symmetrische Hierarchische Polynome auf dem Simplex.* Workshop “Parallele Lösung großer Gleichungssysteme”, TU Chemnitz-Zwickau, 27.–28.5.1994
- 25.08.94** *Symmetric Hierarchical Polynomials for the $h - p$ -Version.* J. Bolyai Math. Soc. 6th International Conference on Numerical Methods, TU Miskolc, Ungarn, 22.–26.8.1994
- 10.10.94** *Symmetric Hierarchical Polynomials for the $h - p$ -Version.* Polnisch-Deutscher Workshop “Adaptive Techniques for Scientific Modelling”, Warschau, Polen 9.–10.10.1994
- 08.12.94** *Adaptive FEM für Thermomechanik und Realisierung in C++.* Vortrag vor der Arbeitsgruppe ZFE T SE 3 der Siemens AG, Erlangen

8.2 Vorlesungen und Seminare

F. Bornemann: FU Berlin

WS 93/94 Finite-Elemente-Methoden für elliptische und parabolische Probleme (Vorlesung)

SS 94 Multilevel-Vorkonditionierung und Gebietszerlegungsmethoden (Seminar)

WS 94/95 Theorie und Numerik nichtlinearer hyperbolischer Erhaltungssätze (Vorlesung)

M. Brandt: HU Berlin

WS 93/94 Funktionentheorie III (Vorlesung)

P. Deuffhard: FU Berlin

SS 94 Numerische Mathematik I (Vorlesung)

WS 94/95 Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen / Numerik II (Vorlesung)

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

WS 93/94 Numerik dynamischer Systeme (Seminar)

P. Deuffhard, Ch. Schütte: FU Berlin

WS 94/95 Iterative Löser für große lineare Gleichungssysteme (Seminar)

M. Grötschel: TU Berlin

SS 94 Lineare Optimierung (Vorlesung)

WS 94/95 Kombinatorische Optimierung (Vorlesung)

M. Grötschel, R. Weismantel, R. Borndörfer: TU Berlin

WS 94/95 Vollständige Beschreibung spezieller Polyeder (Seminar)

W. Koepf: FU Berlin

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

SS 94 Problemlösen mit MATHEMATICA (Seminar)

J. Polzehl: HU Berlin

WS 93/94 Statistische Programmpakete (Vorlesung)

WS 94/95 Statistische Verfahren in S-plus (Vorlesung)

R. Schultz: HU Berlin

WS 94/95 Stochastische Optimierung (Vorlesung)

G.M. Ziegler: TU Berlin

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

SS 94 Zähltheorie (Vorlesung)

WS 94/95 Offene Probleme der Polytoptheorie (Seminar)

8.3 Mitveranstalter von auswärtigen Tagungen

P. Deuffhard

06.–10.09.94 8th Conference of the European Consortium for Mathematics in Industry (ECMI-Konferenz), Universität Kaiserslautern

09.–10.10.94 Polish–German Workshop on “Adaptive Techniques for Scientific Modelling”.

Veranstalter:

- M. Dryja, Institute of Applied Mathematics and Mechanics, Warsaw University
- M. Niezgódka, Interdisciplinary Centre for Mathematical and Computational Modelling (ICM), Warsaw University
- P. Deuffhard, ZIB

Thematische Schwerpunkte:

- Computational Chemistry – Simulation and Visualization
- Adaptive Multilevel Finite Element Methods
- Free Boundary Value Problems

M. Grötschel

18.–20.02.94 Joint Meeting of DMV-Projekt “Fachinformation” and Euromath Advisory Board, Paderborn

27.–29.06.94 5. WORKSHOP des DMV-Projekts “Fachinformation”, Universität Halle-Wittenberg, Halle/Saale

30.08.–02.09.94 International Conference on Operations Research, TU Berlin

06.–10.09.94 8th Conference of the European Consortium for Mathematics in Industry (ECMI-Konferenz), Universität Kaiserslautern

10.–11.10.94 WORKSHOP im Rahmen des BMFT-Förderprogramms “Anwendungsorientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik”
Wissenschaftszentrum Schloß Thurnau, Bayreuth

G.M. Ziegler

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

9 Gäste am ZIB

9.1 Gastvorträge

- 18.01.94** Prof. Dr. Wolfgang Mackens (Universität Hamburg):
Der Newton-Pfad in der unrestringierten Optimierung.
- 24.01.94** Dr. Leen Stougie (Instituut voor Actuarie & Econometrie, Universität von Amsterdam, Amsterdam, Niederlande):
The on-line euclidean travelling salesman problem.
- 25.01.94** Prof. Dr. Rüdiger Verfürth (Ruhr-Universität Bochum):
A-posteriori-Fehlerschätzer für nichtlineare Probleme.
- 01.02.94** Prof. Dr. Iouri Kouznetsov (Centrum voor Wiskunde en Informatica, Kruislaan, Niederlande):
Numerical Detection and Continuation of Codimension Two Homoclinic Bifurcations.
- 14.02.94** Prof. Dr. Anders Björner (Kungl. Tekniska Högskolan, Stockholm, Schweden):
A common generalization of several f -vector theorems.
- 14.02.94** Prof. Dr. Gil Kalai (Hebrew University, Jerusalem, Israel):
Some recent progress in combinatorics.
- 15.02.94** Dr. Jarausch (RWTH Aachen, Lehrstuhl für Mathematik):
Zur Analyse stationärer und periodischer Lösungen von Systemen von parabolischen Differentialgleichungen mit Hilfe von singulären Räumen als reduzierter Basis.
- 17.02.94** Dr. Martin Wetter (Universität Dortmund):
Simulation magnetischer Elementardipole zur Bestimmung transienter Eigenschaften von Ferromagnetika.
- 01.03.94** Prof. Valery P. Il'in (Academy of Sciences, Novosibirsk, Rußland):
On an Approach to Improvement of Difference Solutions.
- 16.03.94** Dr. Ulrich Hansmann (Florida State University, USA):
Ab-Initio-Vorhersage von Proteinstrukturen — der multikanonische Ansatz.
- 16.03.94** Prof. Dr. Konrad Zuse:
Rechnender Raum.
- 24.03.94** Dipl. Informatikerin Renate Knecht (Forschungszentrum Jülich GmbH, ZAM):
Erfahrungen mit dem Einsatz von Parallelrechnern im Forschungszentrum Jülich.

- 26.03.94** Prof. Dr. Ivo Marek (Charles University, Prague, Tschechische Republik):
A Model of an Amplification Effect Measured in the Cascade of Vision.
- 23.04.94** Prof. Dr. Giovanni Rinaldi (Istituto di Analisi dei Sistemi ed Informatica del CNR, Rom, Italien):
Solution of maxcut and equicut problems by branch and cut.
- 27.04.94** Dr. Frank M. Kappe (Institut für Informationsverarbeitung und computergestützte neue Medien, Technische Universität Graz, Graz, Österreich):
Hyper-G: Ein verteiltes Hypermedia-System.
- 06.05.94** Prof. Dr. Gerhard Wanner (Université Genève, Schweiz):
Hamilton'sche Systeme und symplektische Diskretisierungen.
- 31.05.94** Prof. Dr. Hans True (Technical University of Denmark, Dänemark):
Interessante mathematische Aspekte in der Eisenbahnfahrzeugdynamik.
- 02.06.94** Prof. Dr. Victor Boltyanski (Steklow Mathematical Institute, University of Moscow, Moskau, Rußland):
The tent method.
- 02.06.94** Prof. Dr. P. S. Soltan (Dept. of Mathematics, State University Kishinev, Kishinev, Moldawien):
Applications of the Helly Dimension.
- 07.06.94** Dr. Olaf Becken (Universität Rostock, FB Informatik):
Einfache Differentialgleichungen und Computeranalytik.
- 14.06.94** Prof. Dr. Shi Zhong-Ci (Academia Sinica, Volksrepublik China):
Nonconforming Finite Element Methods.
- 18.06.94** Prof. Dr. H.P. Dikshit (Indira Gandhi National Open University, Indien):
Computing and Mapping Properties of Wachspress Finite Elements.
- 24.06.94** Prof. Dr. Matteo Fischetti (University of Padua, Padua, Italien):
Odd Cycles and 0, 1/2-cuts.
- 07.07.94** Prof. Dr. Ellis Johnson (Georgia Institute of Technology, Atlanta, USA):
Column Generation with Applications to Airline Crew Scheduling.
- 07.07.94** Prof. Dr. Thomas Liebling (Département de Mathématiques, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne, Schweiz):
Geometric combinatorial optimization and applications to modeling of growth processes.

- 11.07.94** Prof. Dr. Werner C. Rheinboldt (University of Pittsburgh, USA):
On a-posteriori error estimates for parametrized nonlinear PDE's.
- 15.07.94** Zoltan Kormos (Institute for Computer Research, University of Bukarest, Bukarest, Rumänien):
A parallel algorithmen for the shortest path problem.
- 19.07.94** Prof. Dr. Linda Petzold (University of Minnesota, USA):
Formulation and Numerical Solution of Constrained Multibody Dynamic Systems.
- 04.08.94** Prof. Richard Stanley (Dept. of Mathematics, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, USA):
A symmetric function generalization of the chromatic polynomial of a graph.
- 04.08.94** Dr. Volkmar Welker (Institut für Experimentielle Mathematik, Universität-Gesamthochschule Essen):
Komplexe von zusammenhängenden Hypergraphen.
- 05.09.94** Prof. Dr. Ulrich Pinkall (Sfb 288 Differentialgeometrie und Quantenphysik, FB Mathematik, Technische Universität Berlin):
Visualisierung in der Mathematik am Sfb 288.
- 09.09.94** Dr. Hans Petter Langtangen (SINTEF, Norwegen):
Diffpack: Software for PDEs.
- 13.09.94** Prof. Karmeshu (School of Computer and Systems Sciences, New Delhi):
Nonlinear Stochastic Models of Innovation Diffusion.
- 23.09.94** Prof. Dr. Jinchao Xu (The Pennsylvania State University, USA):
Unified Theories on Some Domain Decomposition Methods.
- 01.10.94** Prof. Dr. G. Dziuk (Universität Freiburg, Institut für Angewandte Mathematik):
Numerische Methoden für die krümmungsabhängige Bewegung von freien Rändern.
- 17.10.94** Prof. Dr. Satoru Fujishige (University of Tsukuba, Tsukuba, Japan):
Signed posets and bisubmodular functions.
- 24.10.94** Dr. Rade T. Živalejević (Mathematisches Institut, Universität Belgrad, Belgrad, Serbien):
Geometric partitions of masses and point sets in R^d .
- 25.10.94** Dr. Mei Zhen (Universität Marburg):
Hopf Bifurcation of Parabolic Differential Equations on the Square with Robin Boundary Conditions.

- 01.11.94** Prof. Dr. Boris N. Khoromskij (Joint Institut for Nuclear Research, Dubna, Rußland):
On Fast Interface Solvers for Biharmonic Dirichlet Problem in Polygonal Domains.
- 02.11.94** Dr. Michel Schaffers (Center for OR and Econometrics, Université Catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgien):
Efficient algorithms and proof of polyhedral characterization for the fixed charge single source network flow design problem.
- 04.11.94** Prof. Dr. William H. Cunningham (Dept. of Combinatorics and Optimization, University of Waterloo, Kanada):
Separation from the stable set polytope.
- 04.11.94** Prof. Dr. Hans Jürgen Prömel (Institut für Informatik, Humboldt-Universität zu Berlin, Berlin):
Probabilistische Argumente und algorithmische Probleme in der Graphentheorie.
- 04.11.94** Valeska Naumann (Technische Universität Berlin):
Maße zur Bestimmung des Abstandes zur Serien-Parallelität.
- 04.11.94** David Alberts (Institut für Informatik, Technische Universität Berlin):
Durchschnittliche Laufzeit dynamischer Graphenalgorithmen.
- 07.11.94** Dr. Ing. Wolfgang Baumann, Dipl.-Ing. Kai Grunert (Hermann-Föttinger-Institut für Thermo- und Fluidodynamik, TU Berlin):
Interaktive verteilte Strömungssimulation und Visualisierung.
- 08.11.94** Robert C. Melville (AT&T Bell Laboratories, USA):
Entwicklung eines zwei-dimensionalen Fortsetzungsverfahrens und Anwendungen zur Analyse elektronischer Schaltungen.
- 23.11.94** Dr. Dimitris Alevras (Stern School of Business, University of New York, New York, USA):
The minimum cut polyhedron.
- 29.11.94** Prof. Dr. Stefan Müller (Universität Freiburg):
Mathematical Models for Microstructures.
- 30.11.94** Martin Löbbing (Universität Dortmund):
Algorithmen zur Verarbeitung Boolescher Funktionen mittels binärer Entscheidungsgraphen (BDDs).
- 30.11.94** Martin Sauerhoff (Universität Dortmund):
Algorithmen zur Verarbeitung Boolescher Funktionen mittels binärer Entscheidungsgraphen (BDDs).
- 09.12.94** Prof. Dr. Achim Bachem (Fachbereich Mathematik der Universität zu Köln):
Ultraschnelle mikroskopische Verkehrssimulation.

12.12.94 Prof. Dr. Dietmar Saupe (Universität Freiburg):

Fraktale Bildcodierung.

13.12.94 Prof. Dr. Dietmar Saupe (Universität Freiburg):

Das inverse Problem zu iterierten Funktionensystemen: Bildcodierung.

9.2 Gastaufenthalte

Dr. Dimitris Alevras (Stern School of Business, New York University,
New York, USA)

01.07.94–30.06.95

(Postdoc–Fellowship, Gast des ZIB)

Dr. Joachim Appel (Universität Leipzig)

04.10.94–07.10.94

(Gast des ZIB)

Dr. Atef Abdel–Aziz Abdel–Hamid (Universität Kairo, Ägypten)

01.08.91–03.07.94

(DAAD–Stipendiat, Gast des ZIB)

Carol Beaty (Cray Research, Inc., Eagan/USA)

12./15.12.94

(Gast des ZIB)

Prof. Dr. Anders Björner (Kungl. Tekniska Högskolan, Stockholm, Schweden)

09.02.–20.02.94

(DFG–Förderung)

Michael Boettinger (Deutsches Klimarechenzentrum GmbH, Hamburg)

21.04.94

(Gast des ZIB)

Prof. Dr. Victor Boltyanski (Steklov Mathematical Institute, Universität
Moskau, Rußland)

27.04.94

(Gast des ZIB)

Prof. Dr. William H. Cunningham (Dept. of Combinatorics and Optimization,
University of Waterloo, Waterloo, Kanada)

03.–05.11.94

(Gast des ZIB)

Dr. Michael Dellnitz (Universität Hamburg)

31.01.94 + 31.05.94

(Gast des ZIB, Zuse–Fellow)

Prof. Dr. Keith Dennis, (Cornell University, Ithaca, USA)
14.04.–15.04.94
(Gast des ZIB)

Prof. Dr. Csaba Fabian (Academia de Studii Economice, Bukarest, Rumänien)
29.08.–03.09.94
(Gast des ZIB)

Dr. Carlos Ferreira (Universität São Paulo, São Paulo, Brasilien)
01.08.91–01.04.94
(DAAD–Stipendiat)

Prof. Dr. B. Fiedler (jetzt FU Berlin, derzeit Uni Stuttgart)
01.01.94 – 31.03.94
(Gast des ZIB, damals Zuse–Fellow)

Prof. Dr. Matteo Fischetti (University of Padua, Padua, Italien)
13.06.–01.07.94
(DFG–Förderung)

Prof. Dr. Satoru Fujishige (University of Tsukuba, Tsukuba, Japan)
16.10.–20.10.94
(Gast des ZIB)

Dr. Vladimir Gerdt (Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Rußland)
27.09.94 – 30.09.94
(Gast des ZIB)

Dr. U. Hansmann (Florida State University, USA)
13.03.94–18.03.94 & 01.07.94–30.09.94
(Gast des ZIB)

Dr. A.C. Hearn (RAND Corporation, Santa Monica, California)
27.05.94 – 05.06.94
(Gast des ZIB)

Prof. Dr. Friedrich Hirzebruch (Max–Planck–Institut für Mathematik, Bonn)
19.05.–21.05.94
(Gast des ZIB)

Prof. Dr. Gil Kalai (Hebrew University, Jerusalem, Israel)
13.02.–20.02.94
(Gast des ZIB)

B. Kalhoff (Universität Kiel, Rechenzentrum)
21.04.94
(Gast des ZIB)

Dr. Frank M. Kappe (Institut für Informationsverarbeitung und computer-
gestützte neue Medien, Technische Universität Graz, Graz, Österreich)

27.04.94

(Gast des ZIB)

Kent Koeninger (Cray Research, Inc., Eagan/USA)

27.06.94

(Gast des ZIB)

Zoltan Kormos (Institute for Computer Research, University of Bukarest,
Bukarest, Rumänien)

01.06.–31.08.94

(Gast des ZIB)

Prof. Dr. Yuri Kuznetsov (USSR Academy of Sciences, Moscow, Rußland)

28.09.94–29.09.94

(Gast des ZIB)

Prof. Dr. Thomas Liebling (Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne,
Schweiz)

06.07.–09.07.94

(Wissenschaftlicher Beirat des ZIB)

Dr. Svante Linusson (Kungl. Tekniska Högskolan Stockholm, Stockholm,
Schweden)

17.01.–18.03.94

(Gast des ZIB)

Martin Löbbing (FB Informatik, Universität Dortmund, Dortmund)

28.11.–04.12.94

(Gast des ZIB)

Irene Loiseau (Departamento de Computacion, Facultad de Cs. Ex. y Na-
turales, Universidad Nacional de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentinien)

21.08.–10.09.94

(Deutsch–argentinische Zusammenarbeit in Wissenschaft und Technik, gefördert
vom Bundesministerium für Forschung und Technologie)

Prof. Dr. Horst Martini (FB Mathematik, Technische Universität Chemnitz–
Zwickau, Chemnitz)

02.–03.06.94

(Gast des ZIB)

Dr. Vincent Moulton (Mathematisches Institut, Universität Bielefeld)

17.– 29.10.94

(Gast des ZIB)

Graciela Nasini (Departamento de Matemática, Universidad Nacional de Rosario, Rosario, Argentinien)

21.08.–10.09.94

(Deutsch–argentinische Zusammenarbeit in Wissenschaft und Technik, gefördert vom Bundesministerium für Forschung und Technologie)

Prof. Dr. Andrew Odlyzko (AT&T Bell Laboratories, Murray Hill, New Jersey, USA)

25.–29.06.94

(Gast des ZIB)

Stephan Olbrich (Universität Hannover, RRZN)

21.04.94

(Gast des ZIB)

Prof. Dr. Manfred Padberg (New York University, New York, USA)

22.–26.08.94

(Gast des ZIB)

Prof. Dr. Roger Penrose (Oxford University, Oxford, England)

20.–21.05.94

(Gast des ZIB)

Rolf Rabenseifner/Dr. Ulrich Lang (Rechenzentrum Uni Stuttgart)

24.02.94

(Gast des ZIB)

Prof. Dr. Werner C. Rheinboldt (University of Pittsburgh, USA)

06.–11.07.94

(Wissenschaftlicher Beirat des ZIB)

Prof. Dr. Giovanni Rinaldi (Istituto di Analisi dei Sistemi ed Informatica del CNR, Rom, Italien)

22.–24.03.94

(DFG–Förderung, Gast des ZIB)

Prof. Dr. Joachim Römelt (Bayer AG, Leverkusen)

07.–08.07.94

(Wissenschaftlicher Beirat des ZIB)

Martin Sauerhoff (FB Informatik, Universität Dortmund, Dortmund)

28.11.–04.12.94

(Gast des ZIB)

Dr. Michel Schaffers (Center for OR and Econometrics, Université Catholique de Louvain, Louvain–la–Neuve, Belgien)

01.10.94–30.09.95

(Gast des ZIB)

Prof. Dr. Dieter Schütt (Siemens AG, München)
06.–08.07.94
(Wissenschaftlicher Beirat des ZIB)

Kim Snyder (Cray Research, Inc., Eagan, USA)
05./08.12.94
(Gast des ZIB)

Prof. Dr. P. S. Soltan (Dept. of Mathematics, State University of Kishinev,
Moldawien)
02.–03.06.94
(Gast des ZIB)

Prof. Richard Stanley (Dept. of Mathematics, Massachusetts Institute of
Technology, Cambridge, USA)
04.08.94
(Gast des ZIB)

Dr. Leen Stougie (Instituut voor Actuarie & Econometrie, Universiteit
von Amsterdam, Niederlande)
23.–25.01.94
(Gast des ZIB)

Dr. Edmund Suschke (Humboldt–Universität zu Berlin)
21.04.94
(Gast des ZIB)

Florian Theil (Universität Marburg)
15.03.94
(Gast des ZIB)

Dr. Volkmar Welker (Institut für Experimentielle Mathematik, Universität–
Gesamthochschule Essen)
04.08.94
(Gast des ZIB)

Dr. Thomas Wolf (University of London, Großbritannien)
15.–27.08.94
(Gast des ZIB, Zuse–Fellow)

Prof. Dr. Laurence Wolsey, (Center for OR and Econometrics Université Catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgien)

27.–29.11.94

(EG–Twinning–Projekt)

Dr. Rade T. Živalejević (Mathematisches Institut, Universität Belgrad, Belgrad, Serbien)

01.–31.10.94

(Gast des ZIB)

9.3 Tagungen und Veranstaltungen des ZIB

18./19.02.94 Joint Meeting of DMV–Project “Specialized Information” and Euromath Advisory Board, Universität Paderborn

Veranstalter: M. Grötschel

Vom 18. – 19.02.94 fand an der Universität–Gesamthochschule Paderborn ein gemeinsamer Workshop der Teilnehmer des DMV-Projekts “Fachinformation” mit dem Teilnehmern des Euromath-Projekts zu Fragen der elektronischen Information und Kommunikation in der Mathematik statt. Das Workshop hatte zwei wesentliche Ziele. Die Vorträge dienten vor allem der gegenseitigen Information. Die DMV stellte ihr Projekt eines verteilten Informationssystems für die Mathematik vor, das Euromath Advisory Board informierte über die wesentlichen Ergebnisse des Euromath Projekts. Das zweite Ziel war die Vorstellung und die Demonstration der Euromath–Software. Alle Teilnehmer des Workshops hatten Gelegenheit, sich am Computer über den Leistungsumfang und die Möglichkeiten dieses SGML–Editors zu informieren und die Software zu testen.

15./18.03.94 “Workshop Scientific Computing in der Theoretischen Physik”, veranstaltet von der DMV–Fachgruppe Scientific Computing in Kooperation mit dem GAMM–Fachausschuß Scientific Computing, FU Berlin.

Veranstalter:

- P. Deuffhard (ZIB)
- Ch. Hege (ZIB)
- E. Sedlmayr (TUB)

Thematische Schwerpunkte:

- Numerische Lösung von partiellen Differentialgleichungen der Physik
- Numerische Lösung von Transport–Gleichungen der Physik

- Verfahren zur Lösung von Problemen der Statischen Physik und Quantenfeldtheorie: moderne Monte-Carlo-Verfahren (Cluster-, Multilevel-Monte-Carlo- und Hybrid-MC-Verfahren)

21.04.94 “Workshop Videoaufzeichnung in der Wissenschaftlichen Visualisierung”

28.04.94 “Berliner Arbeitskreis Information”, J. Lügger, W. Dalitz: *Die Internet-Tools als Basis verteilter Informationssysteme*. Vortrag und Demonstration im Konrad-Zuse-Zentrum

27.–29.06.94 5. Workshop des DMV-Projektes “Fachinformation” in Halle

Der 5. Workshop innerhalb des DMV-Projekts “Fachinformation” fand vom 27. – 29. Juni am Fachbereich Mathematik der Martin-Luther Universität Halle-Wittenberg statt. Im Mittelpunkt des Workshops stand das wissenschaftliche Publizieren in der Mathematik. Der Workshop machte deutlich: Der Eröffnungsvortrag wurde von A. Odlyzko, einem der prominentesten Vertreter elektronischer Information und Kommunikation in der Mathematik, gehalten. Der Vortrag machte deutlich: das bisherige klassische Publikationssystem entspricht weder den heutigen, geschweige denn den zukünftigen Anforderungen an ein Informationssystem. Der Zugang und das Auffinden von Informationen sind umständlich und kaum mehr finanzierbar. Odlyzko, einer der renommiertesten Vertreter elektronischer Informations und Kommunikation in der Mathematik, entwarf mit seinem Vortrag die Vision eines neuen Systems für das wissenschaftliche Publizieren. Jeder Wissenschaftler hat das Recht, im Netz zu publizieren. Die Qualitätsprüfung erfolgt nach Odlyzko über ein System spontaner und formaler Bewertungsmechanismen. Dieses Modell führt zu einem neuen Rollenverständnis und zu einer neuen Rollenverteilung im wissenschaftlichen Publizieren. Der Wissenschaftler als Produzent und Nutzer der Informationen muss ins Zentrum des Publikationsprozesses rücken. M. Grötschel als Vertreter der DMV entwickelte in seinem Vortrag die Konzeption eines verteilten Informationssystems für die Mathematik. Nicht zuletzt hat dieser Workshop mit dazu beigetragen, daß inzwischen von den mathematischen Fachbereichen in Deutschland eine flächendeckende Struktur von Informationsservern aufgebaut worden ist und eine allgemeine Diskussion über das Medium elektronische Information und Kommunikation in den Wissenschaften in Gang gekommen ist.

26.09.94 Workshop “Simulation biologischer Makromoleküle”

Veranstalter:

- P. Deuffhard, ZIB
- Ch. Schütte, ZIB
- U. Hansmann, Gastwissenschaftler des ZIB, (ab Oktober 1994, ETH Zürich)

Beteiligte Institute:

- Freie Universität Berlin
 - Institut für Kristallographie
 - Institut für Med./Techn. Physik und Lasermedizin
 - Institut für Pharmazie
- Humboldt–Universität zu Berlin
 - Institut für Biochemie
 - Institut für Biophysik
 - Institut für Physik
 - Institut für Medizinische Immunologie
- Max–Delbrück–Centrum für Molekulare Medizin
- Fritz–Haber–Institut der Max–Planck–Gesellschaft
- Hahn–Meitner–Institut
- Schering AG

18./19.10.94 Workshop Organisation und Kosten des Computereinsatzes bei Inventarisierung und Katalogisierung im Museum. in Zusammenarbeit mit: Institut für Museumskunde der Staatlichen Museen zu Berlin.

04.11.94 Berliner Algorithmntag

Konrad–Zuse–Zentrum Berlin

Veranstalter: M. Grötschel

24.11.94 Workshop mit den Industriepartnern im Rahmen des BMFT–Förderprogramms “Anwendungsorientierte Verbundvorhaben auf dem Gebiet der Mathematik” im Themenbereich “Mathematische Optimierung und Steuerung technischer Systeme”

Konrad–Zuse–Zentrum Berlin

Veranstalter: M. Grötschel

19./20.12.94 Hyper-G Tutorial

FB Mathematik, FU Berlin

Veranstalter: W. Dalitz, G. Heyer, W. Sperber

Die Abteilung Software-Information führte im Dezember 1994 ein zweitägiges Tutorial zu dem globalen Hypertextsystem Hyper-G durch, um die Fachinformationsbeauftragten der Mathematik und andere Interessenten am "Verteilten Informationssystem für die Mathematik" mit der Benutzung dieses Systems vertraut zu machen. Dabei stand insbesondere die Erstellung und Strukturierung des Informationsangebotes im Vordergrund. Im Rahmen der Vorbereitung des Projektes "Verteiltes Informationssystem für die Mathematik" der DMV hat das ZIB den mathematischen Fachbereichen Hyper-G zum Aufbau ihrer Informationsserver empfohlen.

Das Tutorial fand in Zusammenarbeit mit dem FB Mathematik der FU Berlin in dessen Räumen statt.

In diesem Zusammenhang wurden die Konzepte des geplanten "Verteilten Informationssystems für die Mathematik" und ein "Vorschlag zur Strukturierung des Informationsangebotes von mathematischen Fachbereichen" vorgestellt und diskutiert.

Die 27 Teilnehmer begrüßten die konzeptuellen Vorteile von Hyper-G gegenüber WWW, wie die integrierte Suchfunktionalität, die Orientierungshilfen für den Benutzer und die konsistente Verwaltung von Dokumenten und Hypertext-Links in einer Datenbank. Sie sahen aber auch, daß Hyper-G noch nicht voll ausgereift war, da einige Funktionen noch nicht wie vorgesehen arbeiteten und einige andere noch nicht implementiert waren, was die Bedienung zum Teil etwas umständlich machte.

Fragebögen zur Bewertung und persönliche Gespräche mit den Teilnehmern ergaben eine fast durchweg positive Bewertung der Vorträge, der Betreuung an den Rechnern und der verteilten Unterlagen.

WS 94/95 Oberseminar: "Nichtlineare Dynamik", organisiert von Prof. Dr. Bernhard Fiedler (FU Berlin), Dr. Klaus Schneider (IAAS), Dr. Karin Gatermann (ZIB)

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 1994 ¹ wie folgt zusammen:

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

Im Jahre 1994 tagte der Verwaltungsrat am 9. Dezember 1994.

Präsident des ZIB ist Prof. Dr. Peter Deuffhard.

Als Vizepräsident amtiert Prof. Dr. Martin Grötschel.

10.2 Satzung

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

¹Durch Gesetzesänderung ist der Verwaltungsrat ab 1995 um Vertreter der Humboldt-Universität zu Berlin und des Max-Delbrück-Centrums für Molekulare Medizin erweitert worden.

10.3 Wissenschaftlicher Beirat

Aufgabe des Wissenschaftlichen Beirates ist die Beratung des ZIB in wissenschaftlichen und technischen Fragen sowie die Unterstützung und Förderung der Arbeit des ZIB, insbesondere bei der Herstellung und Aufrechterhaltung von Kooperationen mit Universitäten, Forschungseinrichtungen und der Industrie.

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

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

Der Wissenschaftliche Beirat tagte erstmals am 8. Juli 1994.

10.4 Mitgliedschaften

Das ZIB ist Mitglied folgender Organisationen:

1. CRAY User Group
2. DFN
3. DMV
4. ECMI
5. Forum für Zukunftsenergien
6. NAG Users Association
7. SIAM
8. Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung e.V. — zK&I

10.5 ZIB–Fellows

Präsident und Vizepräsident vergeben an wenige ausgewählte Wissenschaftler das Konrad–Zuse–Fellowship, in dessen Rahmen im Jahre 1994 die folgenden Projekte bearbeitet wurden:

- Dr. Michael Delnitz (Universität Hamburg) *Symbolisch–numerische Methoden für dynamische Systeme*

- Prof. Dr. R. Hoppe (TU München)
Numerische Lösung freier Randwertprobleme
- Prof. Dr. Chr. Lubich (Universität Würzburg)
Mehrkörpersysteme
Die Mitgliedschaft als ZIB-Fellow endete zum 01.04.1994 aufgrund des Wechsels auf eine C4-Professur am Mathematischen Institut der Universität Tübingen.
- Dr. Thomas Wolf (University of London)
Symbolische Lösung von Differentialgleichungen und Differentialgleichungssystemen; symbolisches Rechnen in der allgemeinen Relativitätstheorie
- Prof. Dr. Günter Ziegler (TU Berlin) – ab 01.01.1995
Algebraische und kombinatorische Aspekte der ganzzahligen Optimierung

10.6 Selbstverwaltung

Der Personalrat setzte sich im Jahre 1994 wie folgt zusammen:

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

Vertrauensmann der Schwerbehinderten ist Wolfgang Maibauer.
 Frauenvertreterin war bis 10.11.1994 Barbara Märschütz.

10.7 Wirtschaftliche Situation

Die wirtschaftliche Situation des ZIB zeichnete sich nach wie vor durch eine – in Anbetracht der finanziellen Schwierigkeiten der öffentlichen Hand und der industriellen Kooperationspartner – erfreuliche Kontinuität aus. Reduzierungen des Zuschusses durch den Senat von Berlin konnten durch sparsame Wirtschaftsführung aufgefangen werden. Für die entscheidungsreifen investiven Vorhaben standen die erforderlichen Finanzmittel zur Verfügung. Ohne die Gehälter und Dienstbezüge der planmäßigen Mitarbeiter beliefen sich die Ausgaben im Jahre 1994 auf insgesamt 28.345,9 TDM; davon entfielen auf den konsumtiven Bereich 11.345,1 TDM und auf Investitionen 17.000,8 TDM.

Das Land Berlin leistete einen Zuschuß von 24.935,0 TDM. Die eigenen Erträge aus Kooperationen und Drittmittelprojekten betragen im Berichtsjahr 3.410,9 TDM.

10.8 Personelle Entwicklung

Für die planmäßigen Mitarbeiter (86,5 Stellen, davon 7 Beamten- und 79,5 Angestelltenstellen) waren im Haushaltsplan des Landes Berlin nach Durchschnittssätzen 7.477,3 TDM ausgewiesen.

Unabhängig von ihrer Finanzierung – entwickelte sich die Zahl der Beschäftigten wie folgt:

	31.12.93	31.12.94
Leitung	5	4
Wissenschaftliches Personal	58	72
Datenverarbeitung/Technik	33	29
Verwaltung/Bibliothek	15	17
Studentische Hilfskräfte	19	32
Insgesamt	130	154

11 Ansprechpartner

Präsident:	Prof. Dr. Peter Deuffhard Inhaber des Lehrstuhls <i>Scientific Computing</i> am Fachbereich Mathematik der Freien Universität Berlin Tel. (030) 896 04 – 101
Vizepräsident:	Prof. Dr. Martin Grötschel Inhaber des Lehrstuhls <i>Diskrete Mathematik</i> am Fachbereich Mathematik der Technischen Universität Berlin Tel. (030) 896 04 – 210
Numerik:	Peter J. Deuffhard/ 896 04 – 101 Folkmar A. Bornemann 896 04 – 172
Numerische Software- Entwicklung:	Ulrich Nowak 896 04 – 175
Symbolik:	Herbert Melenk 896 04 – 195
Kombinatorische Optimierung:	Martin Grötschel/ 896 04 – 210 Robert Weismantel 896 04 – 213
Visualisierung und Paralleles Rechnen:	Hans-Christian Hege 896 04 – 141
Software- Information:	Joachim Lügger 896 04 – 173
Rechenzentrum:	Jürgen Gottschewski 896 04 – 130
Höchstleistungsrechner:	Hubert Busch 896 04 – 135
Verwaltung:	Henry Thieme 896 04 – 100
Bibliothek:	Regine Kossick 896 04 – 233

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

Weitere Informationen über das ZIB sowie sämtliche Publikationen sind über unseren WWW-Server unter

<http://www.zib-berlin.de/German>

zu erhalten.