

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

Jahresbericht 1995

Vorbemerkung

Das Jahr 1995 war für das ZIB erfolgreich und doch zugleich kritisch.

Der Erfolg spiegelte sich wider in dem weithin positiven Echo auf die Leistungen des ZIB. So urteilte etwa der Wissenschaftliche Beirat des ZIB auf seiner Sitzung am 30.6./1.7.95 über den Bereich Scientific Computing unter anderem: “Die Ergebnisse machen deutlich, daß das ZIB auch international zu den Spitzeninstitutionen gezählt werden muß. Es ist erfreulich, wie zwanglos und effektiv innerhalb der Projekte theoretische Grundlagenforschung auf dem Gebiet der Mathematik mit anwendungsorientierten Problemstellungen verknüpft wird.” Über den Bereich Rechenzentrum heißt es auszugsweise: “Der technische Stand des Rechenzentrums präsentierte sich sowohl in seiner Ausrüstung als auch in seiner Organisation (Benutzerbetreuung) als State-of-the-art. Das vom ZIB maßgeblich mitgestaltete Hochgeschwindigkeitsnetz im Berliner Raum ist in Deutschland einmalig ...”. Noch Ende des vorigen Jahres konnte zudem durch die Bestellung einer Cray T3E mit 128 Prozessoren ein weiterer Ausbau des Rechenzentrums in die Wege geleitet werden.

Als kritisches Moment für das ZIB erwies sich mein **Ruf** auf eine Professur für Technisch-wissenschaftliches Hochleistungsrechnen an die Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen (RWTH), verbunden mit dem Aufbau eines interdisziplinären Kompetenzzentrums. Erst im Frühjahr 1996 konnten schließlich die Voraussetzungen für mein Verbleiben am ZIB und an der FU geschaffen werden.

Im Dezember 1995 verstarb **Konrad Zuse**, der Patron des ZIB. Wir werden weiterhin versuchen, seinen Namen in Ehren zu halten durch unsere Arbeit, die sich am Geist seines Werkes orientiert. Im Zentrum seiner Überlegungen stand immer das konkrete rechenintensive Problem aus der Praxis, das auch bei uns im Vordergrund steht. In diesem Zusammenhang bleibt nach wie vor unser übergeordnetes Ziel: die Beschleunigung des Know-how Transfers aus der mathematischen Grundlagenforschung über die Entwicklung von Algorithmen und Software bis hin zur tatsächlichen Nutzung in Gesellschaft und Wirtschaft. Dazu müssen Methodenentwicklung, interdisziplinäre Forschung und Rechenzentrum auf höchstem Niveau unter **einem** institutionellen Dach in enger Anbindung an die Universitäten realisiert sein. Auf dieser Basis wurde im vergangenen Jahr besonders klar, daß das Konrad-Zuse-Zentrum als eine der wenigen Institutionen in der Bundesrepublik die Voraussetzungen für den Ausbau zu einem **Zentrum für High Performance Scientific Computing (HPSC)** geschaffen hat — eine Chance, falls auch die Politik sie rechtzeitig begreift!

Mit diesem Rückblick überreichen wir den nun fast schon zu umfangreichen Jahresbericht 1995 unseren Freunden und Gönnern sowie allen aufmerksamen Beobachtern des ZIB.

Berlin, im April 1996

Prof. Dr. Peter Deuffhard
Präsident

Inhaltsverzeichnis

1	Das ZIB – Aufgaben und Ziele	1
2	Forschung und Entwicklung	5
2.1	Zusammenfassung der Schwerpunkte	5
2.2	Projekte	13
2.2.1	Adaptive Multilevel–Methoden	13
	Adaptive Multilevel–FEM für nichtlineare parabolische Systeme in 2D	13
	Adaptive h - p -Methoden	15
	Eine adaptive Rothe–Methode für die zweidimensionale Wellen- gleichung	16
	Affin–konjugierte Newtonverfahren zur Minimierung strikt konve- xer Funktionale	18
	Adaptive Mehrgittermethoden zur Berechnung einzelner Eigen- lösungen von Helmholtz–Problemen	20
	Nichtkonforme Finite Element Multilevel Methoden für Probleme der Hydrodynamik	22
	Absorbierende Randbedingungen für die zweidimensionale Wellen- gleichung	23
	Wavelettechniken zur Scattered–Data–Approximation und zur Lö- sung von partiellen Differentialgleichungen	24
	Komplexitätsuntersuchungen an Klimamodellen	27
2.2.2	Chemie–und Verfahrenstechnik	29
	PDF–Simulation turbulenter Flammen	29
	Dimensionsreduktion bei der Simulation reaktiver Strömungen	31
	Weiterentwicklung von FD–basierten Linienmethoden	32
	Simulation eines Membranreaktors als Reaktions-Diffusions-System	33
2.2.3	Hochfrequente Elektrotechnik	34
	Anwendung von adaptiven Mehrgitter–Methoden zur Berechnung von Eigenlösungen in der integrierten Optik	34
	Adaptive Finite–Elemente–Verfahren zur Berechnung hochfrequen- ter elektromagnetischer Felder	36
	Simulation der Steuerung von Relaxationsoszillationen in Lasern	38
2.2.4	Numerik dynamischer Systeme	39
	Dynamische Dimensionsreduktion für ODE–Modelle	39
	Unterteilungsalgorithmen zur Approximation globaler Attraktoren und invarianter Maße	40

Numerik symmetrischer dynamischer Systeme	42
Adaptive Integratoren für Hamiltonsche Systeme	44
2.2.5 Molekülphysik	45
Nichtlineare Glättung von hochoszillatorischen Hamiltonischen Systemen in der Moleküldynamik	45
Quanten-Klassische Modelle für die Moleküldynamik	49
Visualisierung in der Quantenchemie	51
Umgebungseinflüsse mit Kontinuums-Modellen	53
Der Kontinuumslimites der nicht-kompakten Gitter-QED	54
2.2.6 Wissenschaftliche Software	55
Weiterentwicklung von KASKADE	55
Parallele adaptive Multilevel-Methoden	56
Objektorientierte Werkzeuge zur adaptiven Lösung von Differentialgleichungen	57
Parallele linear-implizite Extrapolationsverfahren	58
Parallelisierung der Gradientenberechnung in einem semi-empirischen Programm	59
Die kompakte Gitter-QED mit Wilson-Fermionen	60
Graphische Benutzeroberflächen für CodeLib-Software	61
Entwicklung informationstechnischer Werkzeuge für die Museumsdokumentation	63
2.2.7 Wissenschaftliche Visualisierung	64
Visualisierung von Vektorfeldern	64
Volume Rendering	66
Isoflächengenerierung aus Volumendaten	67
Echtzeit Temperaturüberwachung im Brandingenieurwesen mit Scattered Data Interpolation	69
Digitales Schnittstudio	70
2.2.8 Medizinische Therapieplanung	72
Generierung von Tetraedergittern für die Hyperthermie-Planung	72
Feldberechnung und Applikatormodellierung mit der VSIE- und der FDTD-Methode für die Hyperthermie	74
Temperaturberechnung und Optimierung für die Hyperthermie	75
Medizinische Visualisierung	77
2.2.9 Computeralgebra	79
Weiterentwicklung von REDUCE	79
Algorithmische Methoden für spezielle Funktionen und orthogonale Polynome	81
Algorithmische Summation unendlicher Reihen	82
Mehrparametrische Gleichungssysteme	83
Dünnbesetzte Gleichungssysteme	84
Anwenderprogramme in REDUCE	85

Symmetrie Paket in Maple	86
2.2.10 Theorie der ganzzahligen Optimierung	87
Testmengen in der Ganzzahligen Programmierung	87
Stabile Mengen und Färbungen in perfekten Graphen	88
Algorithmische Fragestellungen aus der Geometrie	89
Ganzzahlige und gemischt ganzzahlige Rucksackprobleme	90
Polyedrische Untersuchung kombinatorischer Optimierungsprobleme	91
Gittermethoden für die ganzzahlige Programmierung	92
2.2.11 Lösung allgemein–linearer und gemischt–ganzzahliger	
 Optimierungsprobleme	93
Parallelisierung des Pricings beim Dualen Simplex Verfahren	93
Lösung ganzzahliger Programme	94
Ein paralleles Branch-and-Cut-Framework zur Lösung großer kombinatorischer Optimierungsprobleme	95
Simplex–Algorithmen	96
Parallele Sparse–LU–Zerlegung für den T3D–Parallelrechner	97
Dekomposition von Matrizen	98
Optimale Blockauswahl bei der Kraftwerkseinsatzplanung	100
2.2.12 Nichtlineare Methoden in der ganzzahligen	
 Optimierung	102
Semidefinite Relaxationen für kombinatorische Optimierungsprobleme	102
Eigenwertmethoden für Diskrete Optimierungsprobleme	104
2.2.13 Stochastische Optimierung	105
Struktur, Stabilität und Lösungsverfahren in der stochastischen Optimierung	105
Anwendungen der stochastischen Optimierung und Wahrscheinlichkeitstheorie in Nachrichtenverkehrstheorie und elektrischer Lastverteilung	107
Optimale Lastverteilung mit unvollständiger Information unter Echtzeit–Bedingungen	109
2.2.14 On– und Offline Transportprobleme	110
Echtzeit–Optimierung komplexer Transportsysteme	110
Fahrzeugeinsatzplanung im Behindertentransport	112
Fahrzeugumlaufplanung im Öffentlichen Personennahverkehr	114
Effiziente Kommissionierung von Glückwunschkarten	116
2.2.15 Optimierungsprobleme in der Telekommunikation	117
Dimensionierung des E–Plus Mobilfunknetzes	117
Frequenzzuweisung in Mobilfunknetzen	119
Approximation von Überlaufströmen in Systemen mit selektiver Trunk-Reservation für heterogene Quellen	121

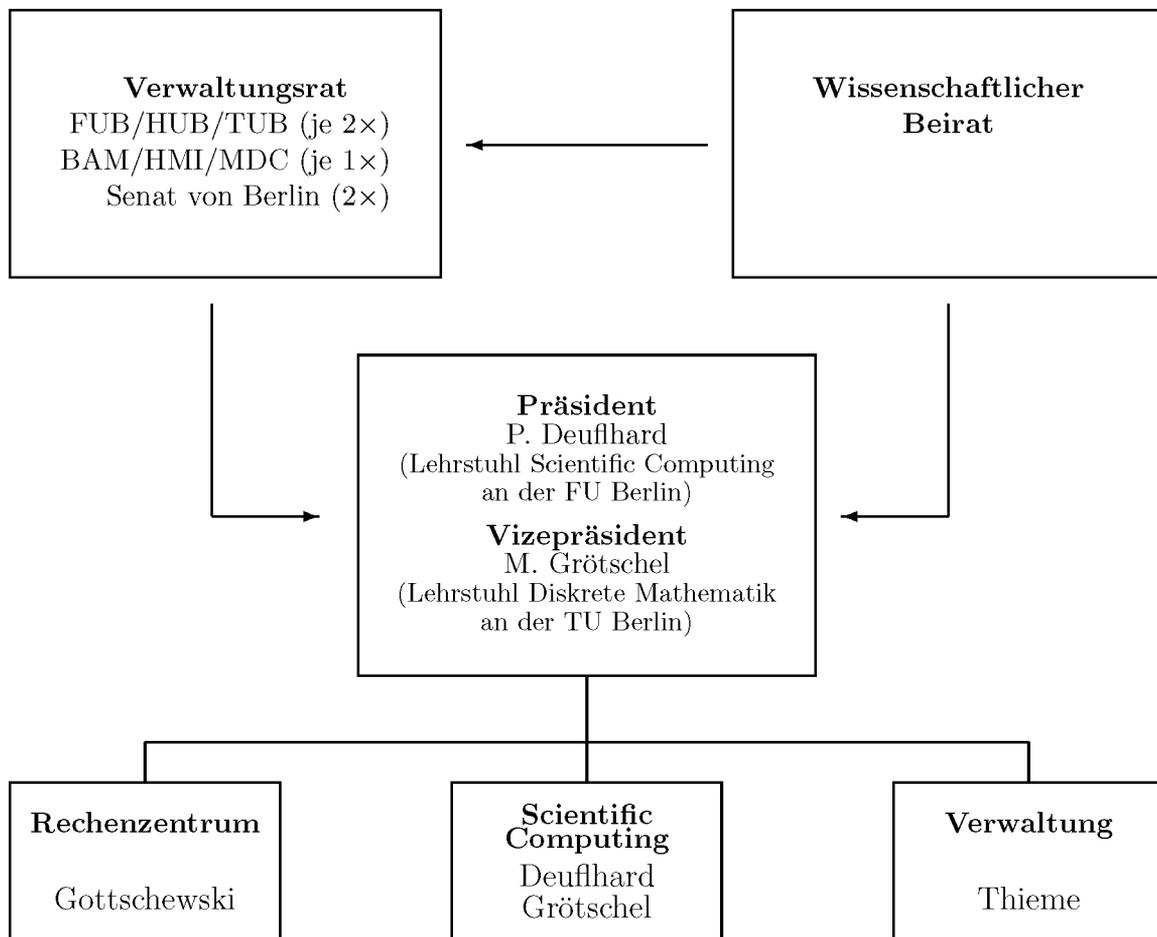
Routing in ATM-Netzwerken	123
Dimensionierung von ACD-Systemen mit Zwangsansage und ungedul- digen Kunden	124
2.2.16 Statistische Modellierung von Ursache-Wirkungsbeziehungen	125
Projection Pursuit Verfahren	125
Modellwahl und Genauigkeitsaussagen in nichtlinearen heteroscedastischen Regressionsmodellen	126
3 Wissenschaftliche Dienstleistungen	128
Neue Wege der wissenschaftlichen Informationsversorgung: Bedingungen, Chancen und Risiken	128
Verteiltes Informationssystem für die Mathematik	130
Das Projekt "Fachinformation" der DMV	133
Elektronische Informationsangebote für die Mathematik	137
Informationsserver für die International Mathematical Union (IMU) und den International Congress of Mathematicians Berlin 1998 (ICM'98)	138
Hyper-G: Tutorials und Lehrbuch	139
Berliner Regionales Testbed (BRTB) – Projekt	140
Netzverteilte Visualisierung	141
Videoaufzeichnung	143
Objekt-Orientierte Visualisierungsumgebung – Oorange	145
Einheitliche Datenumgebung auf heterogenen Rechnernetzen	147
Effektiver Einsatz von Höchstleistungsrechnern in der Materialforschung	148
Kooperationsprojekte mit der (GMD – Forschungszentrum Informationstechnik GmbH)	149
DOC++ — ein Dokumentationssystem für C++	152
iCC — ein instrumentierendes C++ Frontend	153
Einsatz der Informationstechnik im Museum	154
4 Rechenzentrum	155
4.1 Aufgaben und Organisation	155
4.2 Der Berliner Landeshöchstleistungsrechner	155
4.3 Software-Ausbau im Berichtszeitraum	159
4.4 Rechnernutzung	163
4.5 Interne Dienstleistungen des Rechenzentrums	164
5 Publikationen und Auszeichnungen	166
5.1 Preprints	166
5.2 Technical Reports	182
5.3 Beiträge in Zeitschriften/Tagungsbänden	188

5.4	Monographien	195
5.5	Habilitationen	196
5.6	Dissertationen	197
5.7	Diplomarbeiten	197
5.8	Auszeichnungen und Rufe	199
5.9	Herausgabe von Zeitschriften	199
6	Produkte	200
6.1	Symbolische Verfahren (REDUCE, Mathematica, Maple)	200
6.2	Code++	202
6.3	CodeLib	202
6.4	GOS — Datenbank für kulturgeschichtliche Daten	204
7	Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern	205
7.1	Vorträge und Gastaufenthalte	205
7.2	Vorlesungen und Seminare	225
7.3	Mitveranstalter von auswärtigen Tagungen	227
7.4	Ausstellungen und externe Vorführungen	230
8	Gäste am ZIB	231
8.1	Gastvorträge	231
8.2	Gastaufenthalte	237
8.3	Tagungen und Veranstaltungen des ZIB	240
9	Organisatorisches	242
9.1	Organe	242
9.2	Satzung	243
9.3	Wissenschaftlicher Beirat	243
9.4	Mitgliedschaften	243
9.5	ZIB-Fellows	244
9.6	Selbstverwaltung	244
9.7	Wirtschaftliche Situation	244
9.8	Personelle Entwicklung	245
10	Ansprechpartner	246

1 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



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 Bereiche 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.

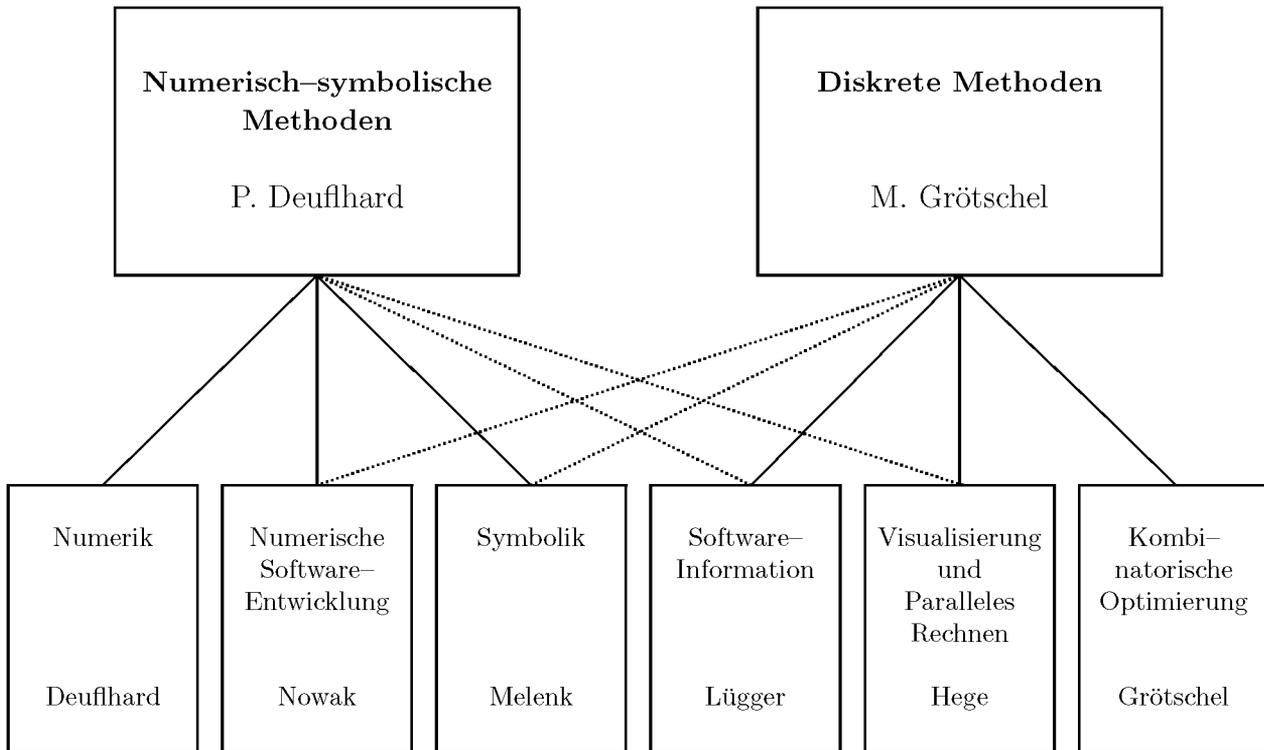
Diskrete Methoden

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. Daneben sind in den letzten zwei Jahren Arbeiten im Gebiet der nichtlinearen und stochastischen Optimierung sowie der Statik getreten, die die Forschung in den Bereich der diskreten Optimierung ergänzen.

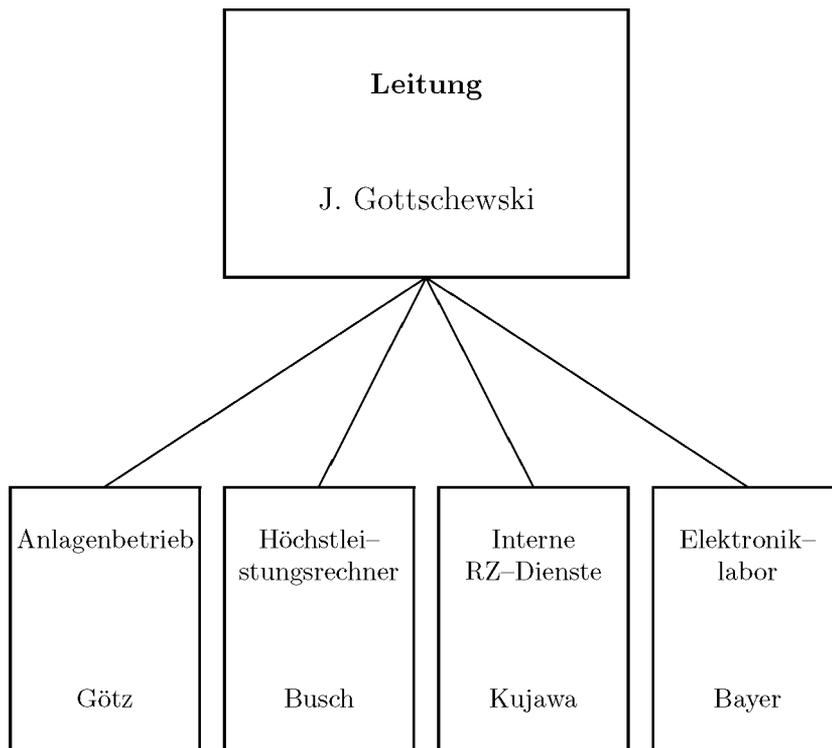
Abteilung Visualisierung und Paralleles Rechnen. Aufgabe der Gruppe Visualisierung ist die Entwicklung und Implementierung von Darstellungsmethoden der wissenschaftlichen Visualisierung, die Bereitstellung geeigneter Visualisierungs–Hardware und –Software sowie die Unterstützung hausinterner Anwender.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



2 Forschung und Entwicklung

2.1 Zusammenfassung der Schwerpunkte

Zur Orientierung innerhalb der Fülle der anschließend dargestellten Einzelprojekte (in diesem Jahresbericht immerhin 127) sollen vorab die wichtigsten Fortschritte im Bereich Forschung und Entwicklung zusammengefaßt werden. Im Unterschied zu den Vorjahren wurde die Einteilung in Grundlagenprojekte und Anwendungsprojekte aufgelöst, weil innerhalb der einzelnen Projekte typischerweise methodische Grundlagen und Anwendungen untrennbar verknüpft sind — dies ist eben gerade ein Kennzeichen von Scientific Computing. Stattdessen gliedern sich die Projekte nach inhaltlichen Schwerpunkten.

Der Bereich **Numerisch-symbolische Methoden** umfaßt die Abteilungen *Numerik*, *Numerische Software-Entwicklung* und *Symbolik*. Im Berichtszeitraum sind über die Projektarbeit die fachlichen Kontakte zur Abteilung *Visualisierung und Paralleles Rechnen* im Gebiet Visualisierung besonders eng geworden, so daß diese Anteile im folgenden mit dargestellt werden.

Im Berichtszeitraum wurden die methodischen Schwerpunkte

- Adaptive Multilevel-Methoden für partielle Differentialgleichungen
- Numerik dynamischer Systeme
- Computeralgebra
- Wissenschaftliche Software
- Wissenschaftliche Visualisierung

aus den vorigen Jahren mit neuen Impulsen weitergeführt. Schwerpunkte aus Sicht der Anwendungen lagen in den Bereichen

- Chemie- und Verfahrenstechnik
- Molekülphysik
- Hochfrequente Elektrotechnik
- Medizinische Therapieplanung.

Im folgenden sollen nun diese Schwerpunkte inhaltlich zusammengefaßt werden. Die Zuordnung einzelner Projekte ist naturgemäß nicht eindeutig, ihre Vernetzung wird im Zusammenhang beschrieben.

Adaptive Multilevel–Methoden. Die Entwicklung von adaptiven Multilevel–FEM für Diffusions–Reaktionssysteme hat nun einen industriell relevanten Stand erreicht, was sich auch in entsprechender Kooperation mit Partnern aus der Chemie — und der Verfahrenstechnik niederschlägt. Desgleichen ist die schnelle Lösung von Helmholtz–Eigenwertproblemen bei komplizierter Geometrie für die Integrierte Optik interessant (BMBF–Förderung), bisher erst im selbstadjungierten Fall: hier wurde die Linie von McCormick auf den volladaptiven Fall übertragen und mit CG als Glätter sowie simultaner Unterraum–Iteration perfektioniert. Zunächst rein theoretische Projekte betreffen die mathematisch fundierte Übertragung der Konzepte auf neue Problemklassen wie die 2D–Wellengleichung und die inkompressiblen Navier–Stokes–Gleichungen in 2D. Hierbei sowie für erste Komplexitätsstudien bei Klimamodellen sind Nachfolgeprojekte in Aussicht. Versuche mit Wavelet–Ansätzen in der Verbrennung beziehen sich — wie in dem Gebiet leider bisher noch weitgehend üblich — auf periodische Randbedingungen.

Chemie– und Verfahrenstechnik. Wie oben beschrieben, sind die adaptiven Multilevel–FEM in dem Programmsystem KARDOS seit kurzem für zwei Raumdimensionen bei komplizierter Geometrie hervorragend entwickelt. Die alternativ im ZIB betriebene Entwicklung auf dem Sektor adaptive Linienmethoden für Diffusions–Reaktionssysteme haben zu einem interessanten Anwendungsprojekt der VW–Stiftung im Bereich Aerosolbildung geführt. Als übergreifendes Projekt wird das Thema “reduzierte Chemie” sowohl von Seiten der Verbrennungschemie als auch im DFG–Schwerpunkt “Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme” betrieben und gefördert; erste einfach implementierbare und mathematisch saubere dynamische Splitting–Kriterien wurden hergeleitet und haben sich bewährt.

Hochfrequente Elektrotechnik. Das Gebiet Integrierte Optik wird seit einigen Jahren mit sichtbaren Erfolgen am ZIB betrieben. Neueste Entwicklungen betreffen die schon oben erwähnte schnelle Berechnung von Eigenmoden für die niedrigen Eigenwerte, bisher noch im verlustfreien Fall (BMBF–Förderung). Weitere Projekte in Kooperation mit dem Heinrich–Hertz–Institut und der Industrie sind für die nahe Zukunft geplant. Fortschritte erwarten wir auch durch die Einführung von divergenzfreien Vektorelementen (Whitney–Elementen), die sich speziell bei Tetraedergittern zur Realisierung in einer adaptiven Multilevel–FEM zu eignen scheinen — erste Resultate liegen vor. Hier ergibt sich hoffentlich auch eine Verbesserung in Richtung Simulation des elektrischen Feldes bei der Hyperthermie. Die Arbeiten über aktive integriert–optische Bauelemente wie Quanten–Well–Laser sind zu einem vorläufigen Abschluß gekommen, wobei die Technik nichtlinearer Glättung mit Gewinn angewendet wurde, die auch in der Moleküldynamik zunehmend eine Rolle spielt.

Numerik dynamischer Systeme. Über die schon erwähnte dynamische Dimensionsreduktion (auch: adaptive AIM) wurden innerhalb des DFG-Schwerpunkts “Dynamische Systeme” neuartige Multilevel-Algorithmen für Mengenabbildungen konstruiert, die sich zur effizienten Berechnung von globalen Attraktoren und sogar von invarianten Maßen eignen. Symmetrie-Aspekte werden in diesem Zusammenhang ebenfalls seit einiger Zeit im ZIB zur Komplexitätsreduktion benutzt. Bei tatsächlicher Berechnung einzelner Trajektorien in der Moleküldynamik spielen symplektische oder zumindest reversible Diskretisierungsmethoden für Hamiltonsche Systeme eine Schlüsselrolle: anstelle der bisher nahezu ausschließlich verwendeten Methoden mit konstanter Schrittweite werden zeitschrittgesteuerte explizite Verlet-artige Methoden entwickelt.

Molekülphysik. Wichtigstes und zugleich erfolversprechendes Thema in der Simulation der Moleküldynamik sind nichtlineare Glättungsmethoden. Hier wurden im Berichtszeitraum entscheidende zunächst theoretische Hürden genommen: mit den analytischen Methoden der Schwach-*Konvergenz konnten Korrekturpotentiale zu den physikalischen Potentialen hergeleitet werden; ähnliche Korrekturpotentiale ergeben sich auch aus statistischen Betrachtungen über Ensembles von Trajektorien oder unter Annahmen an das thermodynamische Gleichgewicht von schnellen Komponenten im dynamischen System. Alle konkurrierenden Zugänge werden derzeit im ZIB verfolgt, letzter Prüfstein ist schließlich die Praxis der Simulation an konkreten Molekülen. Mathematisch ähnliche analytische Techniken führten auch zu Fortschritten bei der Herleitung von quanten-klassischen Modellen, die für tatsächliche Berechnungen in der Chemie unverzichtbar sind. Für solche Systeme wurden spezielle symplektische Diskretisierungsmethoden vorgeschlagen (siehe oben unter “Numerik dynamischer Systeme”). Hier wie in anderen Bereichen der Simulation am Rande der aktuellen Berechenbarkeit ist eine enge Anknüpfung der Visualisierung unerlässlich.

Wissenschaftliche Software. Die Abteilungen Numerische Software-Entwicklung sowie die Abteilung Symbolik stellen Basis-Software der Numerik und der Computeralgebra (siehe dort) zur allgemeinen Verfügung. Darüber hinaus wird auch Anwendungssoftware entwickelt, die innerhalb von Kooperationen Verwendung findet. Die numerische Software steht im Zeichen von C++, Parallelisierung und graphischen Oberflächen; Drittmittelförderung gilt speziell der Harmonisierung von Parallelisierung und Adaptivität. Die Software im Bereich “Virtuelles Archiv” orientiert sich speziell an den Anforderungen von Museen, gefördert durch Drittmittel u.a. der Robert-Bosch-Stiftung.

Wissenschaftliche Visualisierung. In den letzten Jahren hat die Projektarbeit im Bereich der wissenschaftlichen Visualisierung zunehmend zu eigenen Entwicklungen von Visualisierungsalgorithmen als Basisalgorithmen geführt. Hierbei

haben sich enge Beziehungen zu numerischen Algorithmen ergeben, die ja innerhalb des ZIB einfach zu realisieren sind. Die Visualisierung von Vektorfeldern in 2D ist speziell für die Animation in Medizin und Chemie von Bedeutung (siehe auch erste Vorformen im ZIB-Video). Themen wie Volume Rendering und Isoflächendarstellung haben natürlich Querschnittscharakter, wie allgemein bei Themen der Mathematik oder Informatik. Erste Schritte in Richtung auf ein digitales Schnittstudio wurden unternommen und sind dokumentiert; Zielrichtung ist hier die interaktive Erzeugung von Videofilmen.

Medizinische Therapieplanung. Hauptthema in diesem Schwerpunkt ist die Kooperation innerhalb des Sonderforschungsbereiches “Hyperthermie: Methodik und Klinik”. Im Berichtszeitraum haben jedoch einzelne Projekte wie die Entwicklung des Hyperthermie-Planungssystems HYPERPLAN weit über den ursprünglichen Anwendungsrahmen hinaus Aufmerksamkeit erregt, so daß sich die Perspektive auf natürliche Weise erweitert hat. In HYPERPLAN sind derzeit die numerischen Simulationsmethoden (Segmentierung, Maxwell-Löser und Temperaturberechnung sowie -optimierung) und die medizinische Visualisierung informationstechnisch zusammengefaßt. Ziel ist, daß Mediziner damit umgehen können sollten (noch Zukunftsmusik!). Die Simulationsmethoden, obwohl noch nicht zur vollen Reife entwickelt, haben bereits zu Vorschlägen für eine Verbesserung des Antennenapplikators geführt, die speziell eine Vermeidung von sog. “hot spots” zum Ziel hat.

Computeralgebra. Wie oben erwähnt, wird in der Abteilung “Symbolik” public domain Software (evtl. über geringe Lizenzgebühren erhältlich) auf dem Gebiet der Computeralgebra entwickelt. Dabei sind auch eigene algorithmische Entwicklungen involviert. Der Beitrag des ZIB zur Weiterentwicklung von REDUCE als einer “kleinen, aber feinen” symbolischen Formelmanipulationssprache mit Zielproblemen am Rande des derzeit Rechenbaren wurde auch weiterhin, wie seit vielen Jahren, in enger Abstimmung mit A. Hearn von RAND geleistet. Auch andere Programmsysteme wie etwa MAPLE oder MATHEMATICA wurden bedient. Spezielle Beiträge im Berichtszeitraum betrafen Orthogonalpolynome sowie nichtlineare Gleichungssysteme mit mehr als einem Parameter oder mit möglicher “sparse” Monom-Zerlegung.

Der Bereich **Diskrete Methoden** besteht aus den Abteilungen *Kombinatorische Optimierung, Software-Information, Visualisierung und Paralleles Rechnen*. Da die Schwerpunkte der Abteilung *Visualisierung und Paralleles Rechnen* auf dem Gebiet der Visualisierung bei der Darstellung des Bereichs Numerisch-symbolische Methoden bereits berücksichtigt wurden, wird hier auf eine Darstellung dieser Anteile verzichtet. In Fortsetzung der Entwicklung der Vorjahre hat der Bereich Diskrete Methoden das Spektrum seiner Forschungsaktivitäten

auf neue Gebiete weiter ausgedehnt. Drittmittel des Senats von Berlin, des DAAD, der DFG, des BMBF sowie von industriellen Partnern förderten die Weiterführung beziehungsweise Neuaufnahme einer Vielzahl von Forschungsprojekten, die im folgenden zusammengefaßt werden sollen. Die inhaltlichen Schwerpunkte, die der Bereich Diskrete Methoden im Berichtszeitraum setzte, lassen sich in folgende Themenkreise untergliedern:

- Theorie der ganzzahligen Optimierung
- Lösung allgemein linearer und gemischt-ganzzahliger Optimierungsprobleme
- Nichtlineare Methoden in der ganzzahligen Optimierung
- Stochastische Optimierung
- On- und Offline Transportprobleme
- Optimierungsprobleme in der Telekommunikation
- Statistische Modellierung von Ursache-Wirkungsbeziehungen
- Elektronische Informations- und Kommunikationssysteme in der Mathematik

Diese Schwerpunkte werden im folgenden überblickartig dargestellt.

Theorie der ganzzahligen Optimierung. Dieser Themenkreis umfaßt die Grundlagenprojekte, die von den Mitarbeitern des Bereichs auf den Gebieten Diskrete Mathematik und Kombinatorische Optimierung vorangetrieben werden. Schwerpunktmäßig werden einerseits Methoden der Gitterreduktion und algorithmische Fragestellungen aus der Geometrie der Zahlen behandelt. Besonders vielversprechend erscheinen uns Untersuchungen von Testmengen ganzzahliger Programme, mit deren Hilfe exakte primale Optimierungsverfahren konzipiert werden können. Andererseits konzentrierten sich die Aktivitäten auf polyedrische Untersuchungen interessanter ganzzahliger Programme. Erwähnenswert sind an dieser Stelle vor allem Partitionsprobleme in Graphen, das Rucksackproblem und das stabile Mengenproblem in Graphen. Es ist zu erwarten, daß die Untersuchung dieser Themenkreise neue Impulse für die Lösung allgemein linearer und gemischt-ganzzahliger Optimierungsprobleme geben wird.

Lösung allgemein linearer und gemischt-ganzzahliger Optimierungsprobleme. Obwohl in den vergangenen Jahren große Fortschritte bei der Lösung linearer Programme gemacht wurden, sind heute zur Verfügung stehende Codes noch weit davon entfernt, große ganzzahlige Programme mit linearen Programmierungstechniken optimal zu lösen. Im Bereich der linearen Programmierung konzentrierten sich Mitarbeiter des Bereichs auf die Entwicklung eines

neuen LP-Codes, der auf massiv parallelen Rechnern zum Einsatz kommt. Dabei konnten Erfahrungen gewonnen werden, wie beispielsweise parallele Sparse-LU-Zerlegungen erfolgreich durchgeführt werden können, oder wie das Pricing beim dualen Simplex Algorithmus effektiv parallelisiert werden kann. In den Vorjahren wurden am ZIB viele Projekte durchgeführt, um spezielle ganzzahlige Programme mit linearen Programmierungstechniken zu lösen. Die in diesen Projekten gewonnenen Erfahrungen sollen genutzt und vereint werden, um gemischt ganzzahlige Programme, über die a-priori keine strukturellen Eigenschaften bekannt sind, mit polyedrischen Methoden angehen zu können. Eine erste wichtige Anwendung dieses Codes erfolgt bei der optimalen Blockauswahl in Kraftwerkssystemen (BMBF-Förderung). Wichtige Unterprojekte sind Dekompositionsmethoden für Matrizen und die Analyse von Rucksackpolyedern. Die erfolgreiche Durchführung dieser Projekte basiert auf neuen Erkenntnissen aus dem Themenkreis Theorie der ganzzahligen Optimierung.

Nichtlineare Methoden in der ganzzahligen Optimierung. In zunehmendem Maße gewinnen nichtlineare Ansätze in Theorie und Praxis der kombinatorischen Optimierung an Bedeutung. Den entscheidenden Anstoß dazu lieferte die Entwicklung der Inneren Punkte Methoden zu polynomialen Verfahren für lineare und, in Folge, semidefinite Programmierung. Dies ermöglichte einerseits die praktische Erprobung bisher rein theoretischer Modelle, andererseits führte die Beschäftigung mit primal-dualen Verfahren zu einem weit besseren Verständnis dieser Ansätze. Insbesondere im Bereich der semidefiniten Programmierung wurden, unter Mitwirkung des ZIB, signifikante Fortschritte bei der Approximation und Relaxation quadratischer 0-1 Probleme erzielt. Für praxisrelevante Größenordnungen sind diese Verfahren jedoch zu langsam. Ein Übergang zu allgemeineren nicht-glatten Optimierungsmethoden, wie sie zur Eigenwertoptimierung eingesetzt werden, erscheint uns unerlässlich. Wir haben im Berichtszeitraum erste vielversprechende Erfahrungen mit diesen Methoden gewinnen können.

Stochastische Optimierung. Die Arbeiten zur stochastischen Optimierung betreffen sowohl theoretische Grundlagen (Struktur- und Stabilitätsaussagen) als auch die Entwicklung von Lösungsverfahren und deren Anwendung vor allem bei der Optimierung in Kraftwerkssystemen. Für zweistufige stochastische Programme wurde ein neuartiges Lösungsverfahren auf der Grundlage nicht-parametrischer Schätzungen von Verteilungsfunktionen entwickelt, für ganzzahlige stochastische Programme eines unter Nutzung von Gröbner-Basis-Methoden, wie sie auch beim Studium von Testmengen für ganzzahlige lineare Programme zum Einsatz kommen (siehe Themenkreis Theorie der ganzzahligen Optimierung). Außerdem begannen die Arbeiten zum Thema "Optimale Lastverteilung mit unvollständiger Information unter Echtzeit-Bedingungen" (Förderung durch die DFG im Schwerpunkt "Echtzeit-Optimierung großer Systeme"). Modellie-

rung und Verfahrensentwicklung erfolgen hier in Kooperation mit dem Elektroenergieerzeuger VEAG. Insgesamt gibt es zur stochastischen Optimierung, zur Performance-Analyse in der Telekommunikation und der statistischen Modellierung eine enge Zusammenarbeit mit der HUB (Förderung einer gemeinsamen Projektgruppe "Stochastische Optimierung und Angewandte Wahrscheinlichkeitstheorie" durch die Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung).

On- und Offline Transportprobleme. Online Transportsysteme in der Praxis sind dadurch gekennzeichnet, daß eine Vorab-Optimierung des operativen Einsatzes in der Regel nicht möglich ist. Während des Systembetriebs entstehen unvorhersagbar neue Transportaufträge, oder alte werden storniert. Störungen und Staus erfordern eine Planung, in der unter Echtzeit-Bedingungen gute Entscheidungen zur Abarbeitung der Aufträge getroffen werden müssen. Die Ziele der Projekte dieses Themenkreises bestehen darin, praxistaugliche mathematische Modelle für Echtzeit-Aufgaben zu entwerfen, die Modelle mathematisch zu untersuchen und daraus algorithmische Strategien für einen kostengünstigen Transport abzuleiten.

Bei offline Transportsystemen sind hingegen alle Transportaufträge a-priori bekannt. Beispiele solcher Systeme, welche im Berichtszeitraum untersucht wurden, entstehen bei der Fahrzeugumlaufplanung im öffentlichen Personennahverkehr oder der Fahrzeugeinsatzplanung im Behindertentransport.

Die Projekte dieses Themenkreises werden gefördert von der DFG, dem BMBF und der Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung. Kooperationen bestehen mit den Firmen Herlitz AG (Berlin), Siemens Nixdorf (Augsburg), HanseCom GmbH (Hamburg) und Berliner Verkehrsbetriebe / IVU GmbH (Berlin).

Optimierungsprobleme in der Telekommunikation. Die Telekommunikation ist ein derzeit stark expandierendes Gebiet in Forschung und Technik. Im Zuge dieser Entwicklungen ergeben sich viele neue mathematische Fragestellungen und Optimierungsprobleme. In Zusammenarbeit mit der Firma E-Plus entwickeln wir ein möglichst kostengünstiges Mobilfunknetz unter Berücksichtigung von Ausfallsicherheiten, und behandeln in einem zweiten Projekt Fragen der Frequenzzuweisung. Interessante Probleme ergeben sich auch bei Breitband-Telekommunikationsnetzwerken: Hier untersuchen wir in Zusammenarbeit mit dem FTZ der Deutschen Telekom AG effektive Kontrollmethoden im Hinblick auf auftretende Verkehrsströme. Im Berichtszeitraum wurde ein Projekt mit der Norwegischen Telekom zum Thema "Routing- Verfahren in der ATM-Technologie" erfolgreich abgeschlossen, und ein weiteres Projekt mit der Firma Siemens AG München zur Optimierung von ACD-Systemen konnte eingeworben werden.

Statistische Modellierung von Ursache-Wirkungsbeziehungen. Ziel der Arbeiten ist die Entwicklung von Methoden und Programmen zur datenabhängigen

gen, kontextbezogenen Wahl nichtlinearer Regressionsmodelle. Der gewählte Zugang erlaubt eine effektive Berücksichtigung heteroskedastischer Fehler und den Verzicht auf einschränkende Verteilungsannahmen. Mit geeignet modifizierten Bootstrap-Methoden werden Konfidenz-, Vorhersage- und Kalibrationsintervalle konstruiert. Ergänzende Untersuchungen betreffen nicht- und semiparametrische Verfahren (Projection Pursuit) sowie Resamplingmethoden. Das Thema wird in enger Kooperation mit dem Teilprojekt B1 im Sonderforschungsbereich 373 “Quantifikation und Simulation Ökonomischer Prozesse” an der HUB bearbeitet.

Elektronische Informations- und Kommunikationssysteme in der Mathematik. Eine moderne Informations- und Kommunikations-Infrastruktur erhält in den Wissenschaften einen immer höheren Stellenwert. Das ZIB, insbesondere die Abteilung Software-Information, beteiligt sich hieran mit vielfältigen Initiativen, die die weitere Entwicklung der Kommunikation und Publikation in der Mathematik in Deutschland und auch international wesentlich mitbestimmen können. Im Mittelpunkt steht das vom ZIB entwickelte Konzept des verteilten Informationssystems für die Mathematik. Dieses nutzerorientierte Konzept eines elektronischen Informations- und Kommunikationssystems für die Mathematik wurde im Berichtszeitraum inhaltlich und technisch weiter verifiziert und vorangetrieben. Die Abteilung Software-Information baute ihr elektronisches Informationsangebot weiter aus (Installation und Aufbau des Servers der International Mathematical Union sowie eines Servers für den International Congress of Mathematicians 1998 als weltweite Einstiegspunkte für die Mathematik im WWW) und paßte bereits vorhandene Dienste, insbesondere die Softwarebibliothek elib sowie mathematische Kommunikationsforen, an die modernen Entwicklungen im Internet an. Das BMBF-Projekt “Fachinformation” wurde 1995 erfolgreich abgeschlossen (vergleiche auch die Beiträge im Kapitel “Wissenschaftliche Dienstleistungen”).

2.2 Projekte

2.2.1 Adaptive Multilevel–Methoden

Adaptive Multilevel–FEM für nichtlineare parabolische Systeme in 2D

Bearbeiter: J. Lang, R. Roitzsch, P. Deuffhard

Kooperation: G. Eigenberger, J. Frauhammer (Institut für Chemische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart), A. Schuppert (Höchst AG, Frankfurt/M.)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Dieses Projekt spiegelt die kontinuierliche Fortsetzung der wissenschaftlichen Grundlagenarbeit auf dem Gebiet der numerischen Lösung von nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen vom parabolischen Typ wider. Im vergangenen Berichtszeitraum wurde insbesondere an der Effizienzsteigerung des Programmpakets KARDOS für zweidimensionale Probleme gearbeitet. Den Ausgangspunkt dafür bildete der Algorithmus aus [1]. In zahlreichen praktischen Simulationsrechnungen hatte sich gezeigt, daß neben einer zuverlässigen Zeitschrittweitensteuerung vor allem eine über die Zeit gleichmäßig gute Schätzung des Ortsdiskretisierungsfehlers unabdingbar für einen Löser ist, der für eine größere Klasse von Problemen erfolgreich arbeiten soll. Umfangreiche theoretische Resultate auf dem Gebiet der asymptotisch exakten lokalen Ortsfehlerschätzer für parabolische Gleichungen erlaubten die unmittelbare Realisierung eines effizienten Algorithmus zur Gittersteuerung. Die bisherige volle Multilevel–Strategie (from coarse to fine) wurde durch eine adaptive Methode für die Wahl des neuen Startgitters ersetzt (*trimming–tree–strategy*). Damit gelingt eine stärkere Berücksichtigung von kritischen Moden für die Lösung am neuen Zeitpunkt. Bild 1 zeigt ein typisches Endgitter für die Berechnung einer gekrümmten Flamme. Das entsprechende Ausgangsgitter für den nächsten Zeitschritt zeigt Bild 2. Eine Dokumentation dieser neuen Ergebnisse ist in Vorbereitung.

Ein weiterer Schwerpunkt bestand in der verbesserten Approximation von nichtlinearen Randbedingungen, die in der Praxis bei der realistischen Modellierung von Randeffekten häufig auftreten. Die dabei gewonnenen Erfahrungen fanden auch im 1D Fall Anwendung. So ließ sich ein spezieller Membranreaktor in Kooperation mit BASF AG erfolgreich simulieren (siehe auch Projekt “Simulation eines Membranreaktors als Reaktions–Diffusions–System”).

Die aufgezeigten Verbesserungen innerhalb des Programmpaketes KARDOS führten zu einer drastischen Aufwandsreduzierung (Beschleunigungsfaktoren 10–100) bei der Berechnung von praktisch relevanten Problemen.

Literatur

1. J. Lang: *Two-dimensional fully adaptive solutions of reaction-diffusion equations*. Appl. Numer. Math. 18 (1995) 223–240
2. P. Deuffhard, J. Lang, U. Nowak: *Adaptive Algorithms in Dynamical Process Simulation*. In: Proceedings of the 8th ECMI Conference, Teubner

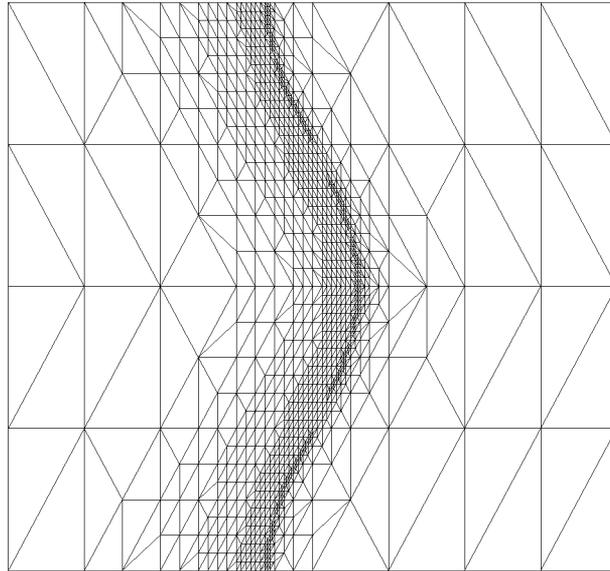


Bild 1: Berechnetes Gitter für eine Flammenfront

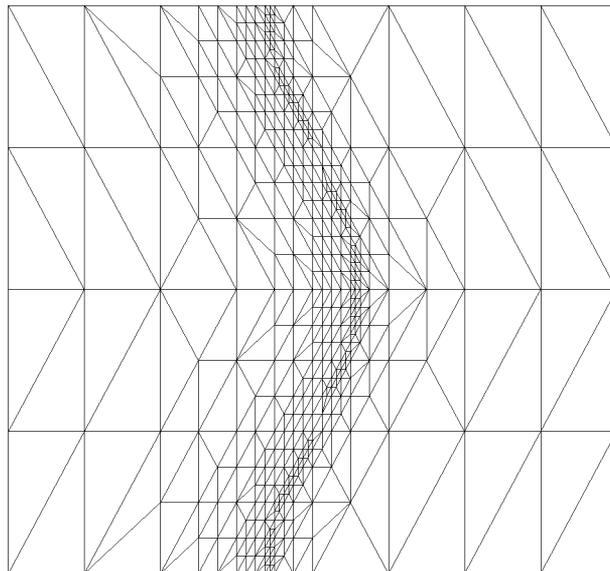


Bild 2: Neues, ausgedünntes Startgitter für den nächsten Zeitschritt

Adaptive h - p -Methoden

Bearbeiter: G.W. Zumbusch

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Projekt ist eine Fortsetzung des Vorjahresprojekts “Adaptive h - p -Methoden für elliptische Randwertprobleme”. Die Frage nach der optimalen Komplexität eines Finite-Elemente-Verfahrens führt zwangsläufig auf exponentiell konvergente adaptive h - p Methoden .

Die Komplexität eines Finite-Elemente-Verfahrens wird üblicherweise von der Komplexität des linearen Gleichungslösers dominiert. Nachdem es mit Multilevel-Verfahren möglich ist, diese auf das theoretische Optimum einer linearen Komplexität in Zahl der Unbekannten zu drücken, bleibt zur weiteren Beschleunigung nur die Reduktion der Zahl der Unbekannten. Hier sind adaptive Verfahren bei singulären Lösungsanteilen die Methode der Wahl. Aber selbst hier wird nur dieselbe Komplexität erreicht, die Finite-Elemente für einfache (nicht-singuläre) Testbeispiele auf uniformen Gitter erreichen.

Eine weitere Reduktion der Zahl der Unbekannten, daß heißt eine bessere Komplexität kann man aber mit der sukzessiven Erhöhung der Ansatzordnung erreichen (Pseudo-Spektralmethoden). Im allgemeinen Fall von Lösungen mit singulären Anteilen muß man allerdings eine gemischte Strategie, Gitteradaptivität und Erhöhung der Ansatzordnung, auch h - p -Methoden genannt, verwenden.

Im Berichtszeitraum konnten eine Reihe von Weiterentwicklungen und Tests des h - p adaptiven Finite-Elemente-Programms gemacht werden. Die Ideen konnten auch vom Fall elliptischer Randwertprobleme auf den Fall der numerischen Quadratur übertragen werden. Hier ist es sogar wesentlich einfacher, verschiedene adaptive Varianten zu studieren, weil sowohl die Komplexität des Programms, als auch die Komplexität des Problems geringer ist als bei Finite-Elemente-Methoden. Die Quadraturverfahren konnten erfolgreich in einer Anwendung aus der Laserphysik eingesetzt werden.

Literatur

1. G.W. Zumbusch: *Symmetric Hierarchical Polynomials and the Adaptive h - p -Version*. ZIB-Berlin, Preprint SC 95-18 (1995)
2. Ch. Schütte, M. Dinand, G.W. Zumbusch, R. Brinkmann: *Dynamics of Erbium-doped Waveguide Lasers: Modelling, Reliable Simulation, and Comparison with Experiments*. ZIB-Berlin, Preprint SC 95-19 (1995)
3. G.W. Zumbusch: *Adaptive h - p approximation procedures, graded meshes and anisotropic refinement for Numerical Quadrature*. ZIB-Berlin, Preprint SC 95-24 (1995)
4. G.W. Zumbusch: *Simultaneous h - p Adaption in Multilevel Finite Elements*. ZIB-Berlin, Technical Report TR 95-14 (1995)

Eine adaptive Rothe–Methode für die zweidimensionale Wellengleichung

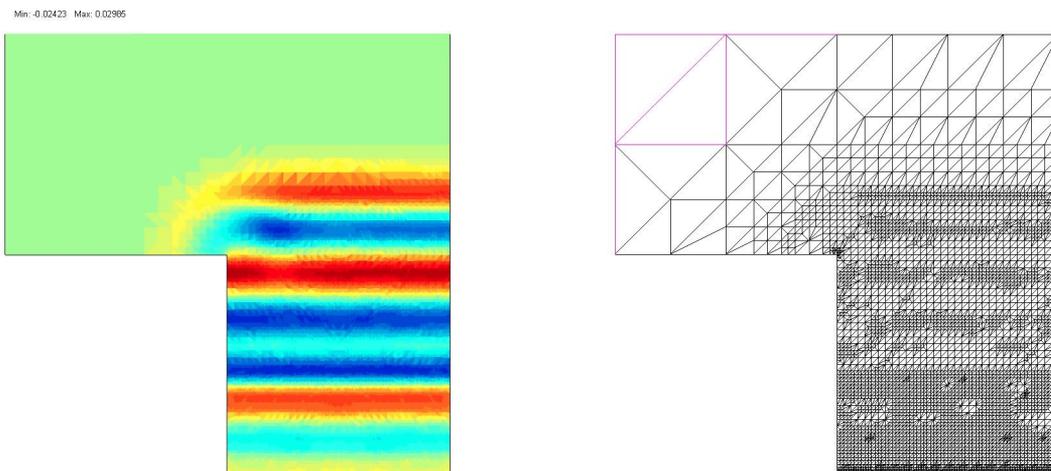
Bearbeiter: F. Bornemann, M. Schemann

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Grundprinzip bei den meisten numerischen Verfahren für zeitabhängige partielle Differentialgleichungen ist eine Trennung bei der Diskretisierung von Zeitvariable und Raumvariablen. Der Diskretisierungsprozeß zerfällt dadurch in eine *äußere* Diskretisierung, die auf ein *semi-diskretes* Problem führt, welches weiter durch eine *innere* Diskretisierung approximiert werden muß.

Im Hinblick auf Adaptivität bietet die Rothe–Methode mit der Diskretisierungsreihenfolge erst Zeit, dann Raum, eine natürliche Verbindung zwischen einem adaptiven Multilevel–Kontext als innerer Diskretisierung und einem adaptiven Verfahren in der Zeit. Bornemann [1] schlägt für den Diskretisierungsprozeß der Rothe–Methode vor, die zeitabhängige partielle Differentialgleichung als ein Anfangswertproblem in einem geeigneten Funktionenraum zu formulieren, um moderne Techniken der Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen anwenden zu können. Hierdurch lassen sich der Diskretisierungsprozeß in der Zeit und die Diskretisierung im Raum in eigenständige, transparente Approximationsbausteine fassen, die über eine „Genauigkeitsschnittstelle“ zusammengefügt werden.

Im Berichtszeitraum wurde der mathematische Rahmen für das entsprechende Verfahren ausgearbeitet sowie eine erste Implementierung der Rothe–Methode, eingebettet in den Finite–Elemente–Baukasten 3.0, vorgenommen. Die an typischen Wellenphänomenen durchgeführten Beispielrechnungen weisen große Schrittweitenvorschläge auf, verbunden mit einer in jedem Schritt optimalen Gitteranpassung im Raum. Dadurch ist der Gesamtaufwand in Zeit und Raum durch das in jedem Zeitschritt neu aufgebaute individuelle Gitter gerechtfertigt.

Bei einer Fortsetzung des Projekts ist eine Erweiterung auf mindestens *quadratische* Finite–Elemente vorzunehmen, so daß mit kleineren Toleranzen gerechnet werden kann. Ferner sollte auch über ein alternatives Abbruchkriterium für die Diskretisierung im Raum nachgedacht werden, welches die Komponentennormen der Energienorm des Hilbertraumproblems simultan als Kontrollgrößen berücksichtigt. Bei der Simulation von Wellenphänomen führen oft *inkonsistente* Randbedingungen zu „Verschmutzungen“ im Randbereich. Eine alternative Möglichkeit stellt die Vorgabe *transparenter* Randbedingungen dar, die die Ausbreitung einer Welle über ein begrenztes Simulationsgebiet zulassen.



Beugung von Wellen

Literatur

1. F. Bornemann: *An adaptive multilevel approach to parabolic equations. II. Variable-order time discretization based on a multiplicative error correction.*, IMPACT Comput. Sci. Engrg. 3, 93–122 (1991)
2. M. Schemann: *Eine adaptive Rothe-Methode für die zweidimensionale Wellengleichung.* Diplomarbeit, FU Berlin (1995)

Affin-konjugierte Newtonverfahren zur Minimierung strikt konvexer Funktionale

Bearbeiter: P. Deuffhard, M. Weiser

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Projekt ist thematisch eine Fortführung der von P. Deuffhard und A. Hohmann geleisteten Arbeiten zu affin co- und contravarianten Newtonverfahren. Läßt sich das Problem $F(x) = 0$ in beiden Varianten beschreiben, so ist die Minimierungsproblemen $f(x) = \min, F(x) = \nabla f(x) = 0$ inhärente Affin-Invarianz von anderer Struktur. Die Entwicklung der Theorie führte auf sogenannte affin-konjugierte Newtonverfahren, wobei die für affin-invariante Newtonverfahren typischen Lipschitzbedingungen hier nun in der Energienorm formuliert werden.

Die Wahl affin-konjugierter Verfahren führt auf eine Variante der Dämpfungsstrategie, die sich am zugrundeliegenden konvexen Funktional orientiert und dadurch größere Robustheit und Effizienz als die für co- und contravariante Verfahren entwickelten Methoden aufweist.

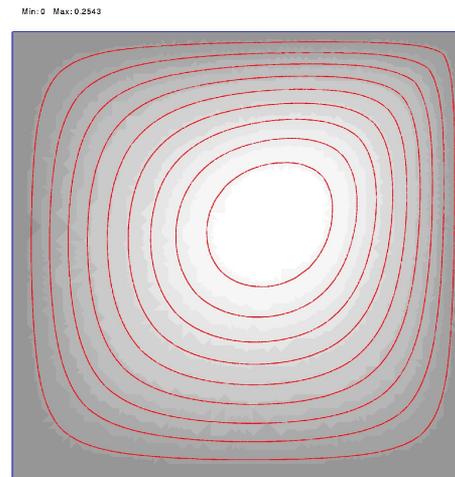
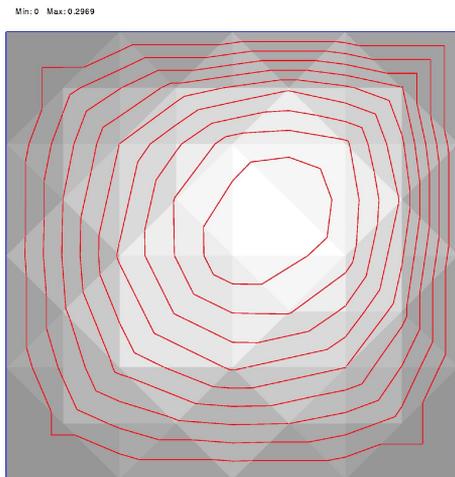
Die zur Lösung nichtlinearer elliptischer Randwertprobleme notwendige Übertragung der Theorie auf Multilevel-Newtonverfahren mit KASKADE als innerer Iteration ist kanonisch.

Als Beispiel dient das Funktional der vollständigen Potentialgleichung:

$$f(u) = \int_{\Omega} (1 + |\nabla u|^2)^{p/2}$$

Die Tabelle zeigt das exakte Newtonverfahren für eine feste Diskretisierung.

k	$\ F'(x_k)^{1/2} \Delta x_k\ $	$[h_k]$	$[\omega]_k$	$[h_k]$ (a posteriori)
1	$1.42e - 01$	$1.69e - 01$	1.19	$5.74e - 01$
2	$4.07e - 02$	$1.65e - 01$	4.04	$4.27e - 01$
3	$8.69e - 03$	$9.12e - 02$	10.49	$1.30e - 01$
4	$5.63e - 04$	$8.39e - 03$	14.90	$8.99e - 03$
5	$2.53e - 06$	$4.04e - 05$	15.97	$4.15e - 05$
6	$5.26e - 11$	$8.62e - 10$	16.40	



Erste und zweite Iterierte des Multilevel-Newtonverfahrens für die vollständige Potentialgleichung. (Grauwerte lokal konstant über der Triangulierung.)

Literatur

1. M. Weiser: *Newton-artige Iterationsverfahren zur Minimierung strikt konvexer Funktionale*. Diplomarbeit, Freie Universität Berlin (1995)

Adaptive Mehrgittermethoden zur Berechnung einzelner Eigenlösungen von Helmholtz–Problemen

Bearbeiter: P. Deuffhard, T. Friese, F. Schmidt

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

Förderung: Das Projekt wird durch das BMBF unter dem Titel “Anwendungsorientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik” gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die Simulation von Wellenleiterstrukturen in optischen Bauteilen führt im mathematischen Modell auf das Eigenwertproblem der skalaren Helmholtzgleichung

$$-\Delta u(x, y) - \epsilon_D(x, y) u(x, y) = \lambda u(x, y), \quad (x, y) \in \Omega,$$

wobei ϵ_D die reelle Dielektrizitätszahl ist. Im Kontext von Finite-Elemente-Approximationsmethoden wird dieses Problem mit zugehöriger Randbedingung in Variationsformulierung betrachtet: gesucht sind eine Funktion $u \in H \setminus \{0\}$ und eine Zahl λ , welche der Beziehung

$$a(u, v) = (\nabla u, \nabla v) - (\epsilon_D u, v) = \lambda (u, v), \quad \forall v \in H,$$

genügen, wobei H ein geeigneter Sobolevraum und (\cdot, \cdot) das L^2 -Skalarprodukt ist. Um den bei optischen Strukturen auftretenden komplexen Geometrien und dem Multiskalencharakter dieser Problemklasse gerecht zu werden, ist die Diskretisierung mit adaptiven Gittern durchzuführen. Es wurden zwei schon seit längerem bekannte Mehrgittermethoden auf ihre Robustheit im Zusammenhang mit adaptiven Strategien untersucht. Dem linearen Mehrgitterverfahren von HACKBUSCH liegt die direkte Diskretisierung aus der Variationsformulierung zugrunde. Die Rayleigh-Quotienten-Mehrgitter-Minimierung von MCCORMICK leitet sich aus dem Courantschen Minimumprinzip ab: die Eigenwerte λ_j und die korrespondierenden Eigenfunktionen u_j sind durch

$$\lambda_j = \min_{\substack{u \in H \setminus \{0\} \\ (u, u_k) = 0 \\ k=1, \dots, j-1}} R(u) = R(u_j), \quad j = 1, 2, \dots$$

mit dem Rayleigh-Quotienten $R(u) = a(u, u)/(u, u)$ charakterisiert.

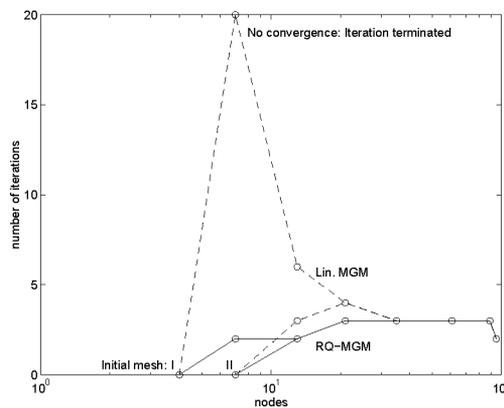
Schon an simplen 1D-Problemen zeigt sich die größere Robustheit der Rayleigh-Quotienten-Minimierung gegenüber dem linearen Verfahren: zu lösen sei die Eigenwertaufgabe

$$\begin{aligned} -u''(x) - \epsilon_D(x) u(x) &= \lambda u(x), & x \in (-3, 3) \\ u'(-3) = u'(3) &= 0, \end{aligned}$$

wobei

$$\epsilon_D(x) = \begin{cases} (3.2 k_0)^2 & , \quad x \in (-3, -1) \cup (1, 3) \\ (3.4 k_0)^2 & , \quad x \in (-1, 1) \end{cases}$$

mit der Wellenzahl $k_0 = 2\pi/1.55$ von Licht der Wellenlänge $1.55 \mu\text{m}$ im Vakuum. Bei zu grober Wahl des Startgitters stellt sich beim linearen Mehrgitterverfahren zunächst keine Konvergenz ein.



Anzahl der Iterationen der Rayleigh-Quotienten-Mehrgitter-Minimierung und des linearen Mehrgitterverfahrens über Anzahl der Knoten pro Level

Literatur

1. F. Schmidt: *Simultaneous Computation of the Lowest Eigenvalues and Eigenvectors of the Helmholtz Equation*. ZIB-Berlin, Technical Report TR 95-13 (1995)
2. P. Deuffhard, T. Friese, F. Schmidt, R. März, H.-P. Nolting: *Effiziente Eigenmodenberechnung für den Entwurf integriert-optischer Chips*. ZIB-Berlin, Preprint SC 96-2 (1996) und wird erscheinen im Tagungsband zum Statusseminar der anwendungsorientierten Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik des BMBF vom 25.-27.10.95, Springer-Verlag

Nichtkonforme Finite Element Multilevel Methoden für Probleme der Hydrodynamik

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

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Berichtszeitraum wurde mit der Entwicklung von adaptiven Finite Element Methoden für Probleme der Strömungsmechanik begonnen. Ziel ist die Implementierung eines robusten und effizienten 2D- und 3D-Verfahrens zur Lösung der inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen.

Zunächst wurden verschiedene Diskretisierungskonzepte für die stationären Stokes Gleichungen in einem adaptiven Multilevel-Kontext analysiert. Es wurde mit der Untersuchung und Implementierung sogenannter divergenzfreier Finite Elemente begonnen, wodurch sich das Sattelpunktproblem als ein rein elliptisches Randwertproblem formulieren läßt. Damit sind die diskretisierten Stokes-Gleichungen einer Untersuchung im CCG-Kontext zugänglich.

In Abweichung vom üblichen CCG-Verfahren sind für nichtkonforme Finite Elemente eine problemangepasste Wahl der Gittertransferoperationen zu berücksichtigen. Es wurden mehrere Konzepte verglichen, implementiert und auf ihre Verwendbarkeit in einem kaskadischen Mehrgitterverfahren getestet.

Wichtigstes Ergebnis dieser Untersuchungen war, daß der sogenannte Zweigittertest nur von der L_2 -Projektion der Näherungslösung des Grobgitters auf ein verfeinertes Gitter erfüllt wird. Die Entwicklung einer adaptiven Steuerung der Glättungsschritte pro Verfeinerungslevel sind Gegenstand weiterer Arbeit.

Literatur

1. F. Bornemann, P. Deuffhard: *Cascadic multigrid method for elliptic problems*, erscheint in Numer. Math.

Absorbierende Randbedingungen für die zweidimensionale Wellengleichung

Bearbeiter: J. Fröhlich

Kooperation: R. Renaut (Arizona State University, Tempe/USA)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Bei der Berechnung von Wellenausbreitungsphänomenen in der Praxis enthält das Rechengebiet die wesentliche Geometrie des Problems, ist aber aus Effizienzgründen meist kleiner als das physikalische Einflußgebiet. Ein zentrales Problem ist daher die geeignete Definition von Randbedingungen auf den so eingeführten künstlichen Rändern, damit herauslaufende Wellen dort nicht reflektiert werden und die Lösung im Rechengebiet verfälschen. In der Literatur existieren z.Zt. zwei prinzipiell verschiedene Ansätze:

- a) Einführung einer künstlichen Dämpfungsschicht,
- b) Definition “transparenter Randbedingungen”.

In [1] wurden Randbedingungen des zweiten Typs konstruiert und untersucht, die darauf basieren, daß auf dem Rand des Rechengebietes nicht mehr die ursprüngliche Wellengleichung gelöst wird, sondern eine Gleichung, die Wellenausbreitung nur in einer Richtung, nämlich aus dem Gebiet hinaus, beschreibt.

Die Diskretisierung basiert auf Finiten Differenzen in der Zeit und einer Spektralmethode im Ort. Letztere impliziert (bei glatten Koeffizienten) einen extrem kleinen Diskretisierungsfehler und erlaubt daher ein genaues Studium der Randbedingungen. Insbesondere wurden untersucht: die Zeitdiskretisierung der Randgleichungen, der Einfluß einer Koordinatentransformation bzgl. der Ortsdiskretisierung und die aus den Randbedingungen resultierenden Reflektionskoeffizienten. Schließlich wurden vergleichende Rechnungen mit einer Fouriermethode, einer Chebyshev–Diskretisierung und transformierten Chebyshevpolynomen durchgeführt.

Literatur

1. R. Renaut, J. Fröhlich: *A Pseudospectral Chebyshev Method for the 2D Wave Equation with Domain Stretching and Absorbing Boundary Conditions*. ZIB–Berlin, Preprint SC 95–27 (1995), erscheint in *J. Comp. Phys.*

Wavelettechniken zur Scattered-Data-Approximation und zur Lösung von partiellen Differentialgleichungen

Bearbeiter: J. Fröhlich

Kooperation: R. Brand (Lehrstuhl für Photogrammetrie und Remote Sensing, Universität München), W. Freeden (FB Mathematik, Arbeitsgruppe Geomathematik, Universität Kaiserslautern), K. Schneider (FB Chemie, Universität Kaiserslautern)

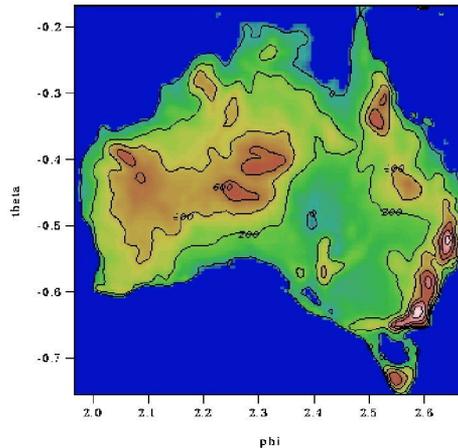
Beschreibung der Forschungsarbeit: Die Theorie der Wavelets hat seit einigen Jahren zu einem beträchtlichen Innovationsschub in vielen Bereichen geführt. Sie erlaubt die mathematisch fundierte Konstruktion von Basen und daraus resultierenden Algorithmen, die sich im wesentlichen durch die Begriffe *Skala*, *Shiftinvarianz* und (ggf. partielle) *Orthogonalität* charakterisieren lassen. Inzwischen gibt es als Erweiterung der klassischen orthonormalen Wavelets eine Vielzahl von unterschiedlichen Konstruktionen. Zwei Tendenzen sind dabei zu beobachten:

- a) die Basisfunktionen werden mit weniger speziellen Eigenschaften ausgestattet und sind dadurch flexibler,
- b) es werden zusätzliche Eigenschaften hinzugefügt, um die Basis an spezielle Gegebenheiten (wie etwa spezielle Operatoren) anzupassen.

Die beiden Teilprojekte sind Vertreter jeweils einer dieser Richtungen.

1. Teilprojekt: Adaptive Multilevelapproximation auf der Kugel.

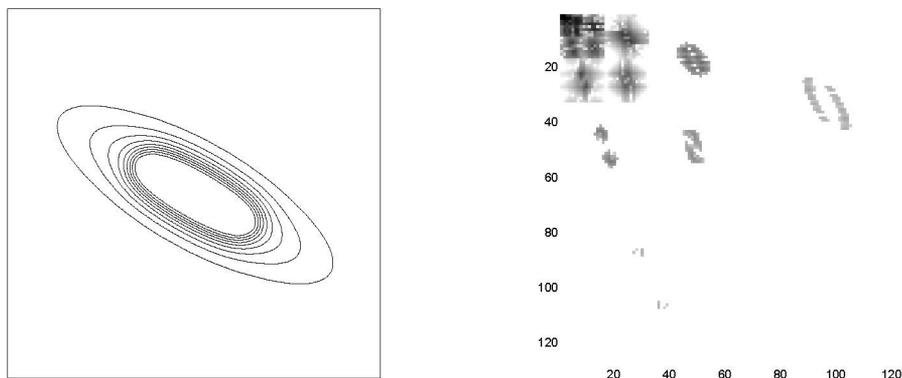
Eine zentrale Aufgabe der Geomathematik ist die Approximation großer Datenmengen, gegeben an ungleichmäßig verteilten Punkten auf einer Kugeloberfläche (scattered data). Aufgrund der fehlenden Lokalisierung im Ort ist die traditionelle Entwicklung in sphärische Harmonische hierfür unbefriedigend (Rechenzeit, Kondition, praktische Handhabbarkeit). Waveletähnliche Konstruktionen haben diese Nachteile nicht. Da in sphärischer Geometrie keine reguläre diskrete Translation möglich ist, wird ein einfaches Funktionensystem zur Darstellung der Approximation gewählt. Axialsymmetrische Polynome auf Kugelkappen bilden den Ausgangspunkt. In einem ersten Schritt werden diese auf einem quasi-regulären Gitter über die Kugel verteilt. Der Ansatzraum wird dann aus der Vereinigung verschiedener solcher Mengen mit schrittweise reduzierter Kappengröße (Skala) und Grundgitterschrittweite erstellt. Eine hierarchische Bottom-up-Strategie mit expliziter Berechnung und Kontrolle des Fehlers führt auf einen robusten, adaptiven Approximationsalgorithmus [1]. Verwendet man Grundgitter und Datenorganisation mit Baumstruktur, so läßt sich dieser sehr effizient implementieren.



Anwendungsbeispiel aus [1]: Digitales Terrainmodell von Australien

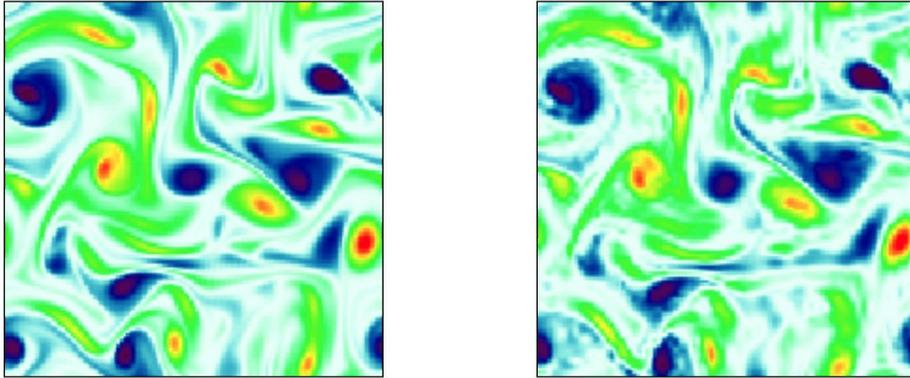
2. Teilprojekt: Adaptive Ortsdiskretisierung von PDEs durch Wavelets.

Aufbauend auf [2] wurden spezielle operatorangepaßte bi-orthogonale Multiresolutionen konstruiert, die einer punktwisen Auswertung der Nichtlinearität durch die Verwendung der Kardinalfunktion anstelle der Skalierungsfunktion Rechnung tragen [3]. Darüber hinaus erhält man einen einfachen hierarchischen Algorithmus zur Berechnung der benötigten Zerlegungen. Die Orthogonalität der zugrundeliegenden klassischen Wavelets wird zur Matrixdiagonalisierung benutzt, so daß die Lösung linearer Gleichungssysteme entfällt. Die verwendeten Funktionen haben zwar keinen kompakten Träger, klingen jedoch so schnell ab, daß für endliche Genauigkeit ein kompakter Träger verwendet werden kann. Damit hat der Algorithmus linearen Aufwand. Dieser Aspekt wurde in einem ersten Schritt theoretisch untersucht und durch Beispiele illustriert. Die Diskretisierung wurde sodann zur Lösung nichtlinearer parabolischer Differentialgleichungen vom Typ Reaktion-Diffusion eingesetzt. Insbesondere wurde auch die Erweiterung der zunächst eindimensionalen Konstruktion auf den zweidimensionalen Fall durchgeführt.



Berechnung einer zweidimensionalen Flamme aus [3], links: Isolinien der Temperatur, rechts: verwendete Koeffizienten.

Schließlich konnte der bestehende Algorithmus auf die zweidimensionalen Navier-Stokes Gleichungen übertragen werden. Erste Resultate zur Simulation homogener Turbulenz in einer adaptiven Waveletbasis liegen bereits vor.



Abklingende homogene Turbulenz, links: Fourierreihe (16384 Freiheitsgrade), rechts: adaptive Waveletdiskretisierung (2277 Freiheitsgrade)

Literatur

1. R. Brand, W. Freeden, J. Fröhlich: *An Adaptive Hierarchical Approximation Method on the Sphere Using Axisymmetric Locally Supported Basis Functions*. ZIB-Berlin, Preprint SC 95-2 (1995), erscheint in *Computing*
2. 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)
3. J. Fröhlich, K. Schneider: *An Adaptive Wavelet-Vaguelette Algorithm for the Solution of Nonlinear PDEs*. ZIB-Berlin, Preprint SC 95-28 (1995)

Komplexitätsuntersuchungen an Klimamodellen

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

Beschreibung der Forschungsarbeit: Ziel des Projektes war die Untersuchung der Anwendbarkeit moderner numerischer Konzepte (Adaptivität, Parallelisierung) auf die Klimamodellierung. Angesichts massiver Komplexitätsprobleme in diesem Bereich bestand die Frage, ob auf diesem Wege Strukturen des Modells in der algorithmischen Behandlung ausgenutzt, und so insbesondere das Problem der unterschiedlichen Skalen besser bewältigt werden könnte.

Zu diesem Zweck wurden typische Strukturen von Klimamodellen zusammengetragen und im Rahmen mathematischer Begrifflichkeiten beschrieben.

Es zeigte sich, daß direkte Ausnutzung numerischer Adaptivität für diesen Anwendungsbereich zumindest problematisch ist. Dies ist vor allem in der diskreten Form vieler Modelle begründet: Wegen der gitterbezogenen Formulierungen innerhalb von Klimamodellen macht eine Veränderung der Gitter – ob adaptiv oder nicht – Ummodellierung notwendig. Die Anpassung bestehender Modelle für neue numerische Konzepte ist unserer Ansicht nach keine rein mathematische Aufgabe.

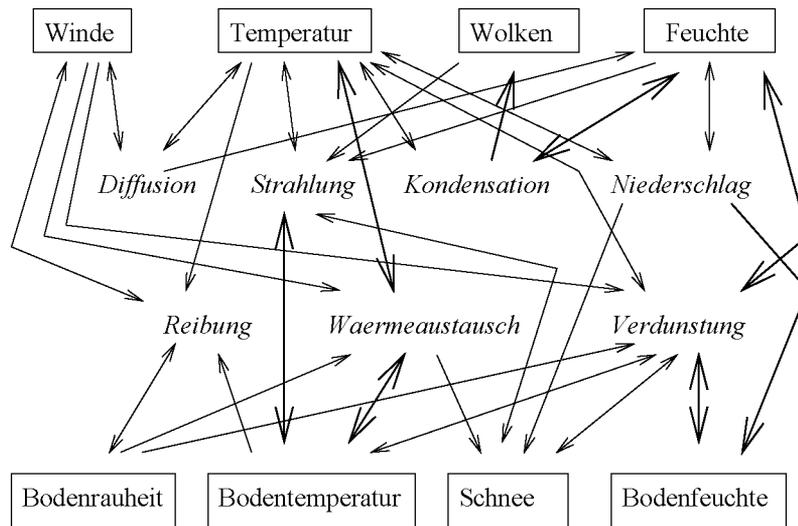
Darüber hinaus zeigt sich, daß es auch für Problemstellungen, in denen sich Modell und Diskretisierung klar trennen lassen, unter Umständen fraglich ist, ob durch Adaptivität tatsächlich eine Effektivitätssteigerung zu erwarten ist.

Ferner sind die mathematischen Gleichungen, auf denen Klimamodelle typischerweise aufbauen, derart, daß die Kondition der Probleme – und damit die Zeitspanne, für die allein aus numerischer Sicht überhaupt verlässliche Ergebnisse zu erwarten sind – häufig unklar ist.

Demgegenüber ergeben sich auf der Ebene komplexitätsreduzierter Modelle aber durchaus Möglichkeiten direkter Zusammenarbeit zwischen Klimatologie und Numerik. Für die Numerik bieten solche sogenannten “Spielmodelle” die Möglichkeit, adaptive Konzepte zu testen und weiterzuentwickeln. Da momentan im Zuge der Umstellung der Klimamodelle auf objektorientierte Programmierung Spielmodelle verstärkt von Interesse sind, liegt es nahe, adaptive Strukturen zuerst hier als Testfall mit zu berücksichtigen.

Die im Verlauf dieser Arbeit angetroffenen Verständigungsprobleme zwischen Mathematik und Anwendung haben, angesichts eines andererseits großen Diskussionsbedarfs, das Interesse verstärkt, das Zusammenwirken von Mathematik und naturwissenschaftlicher Modellierung von einem abstrakteren Standpunkt aus zu untersuchen. In der Klimamodellierung zeigt sich exemplarisch ein typischer Modellierungsprozeß, bei dem rein mathematische Umformulierungen, Ummodellierung durch Zusatzannahmen, sowie der Übergang von kontinuierlichen Gleichungen zu diskreten Vorstellungen miteinander kombiniert und vermischt werden.

Im Hinblick auf eine interdisziplinäre Diskussion der Modelle ist es aber unserer Ansicht nach unerlässlich, dieses Zusammenwirken transparent zu machen, um einzelne Modellierungsschritte diskutieren und leichter modifizieren, aber auch mögliche Fehlerquellen isolieren zu können.



Komplexität der Kopplung physikalischer Prozesse der Atmosphäre;
 nach: M.E. Schlesinger (Hrsg.), *Physically-Based Modelling and Simulation of Climate and Climatic Change*, Teil 1, NATO ASI Series C, Vol. 243, Kluwer Academic Publishers (1988)

Literatur

1. C. Deittert: *Klimamodellierung: Grundstrukturen und Techniken aus der Sicht der Mathematik*. Diplomarbeit, FU Berlin (1995)

2.2.2 Chemie- und Verfahrenstechnik

PDF-Simulation turbulenter Flammen

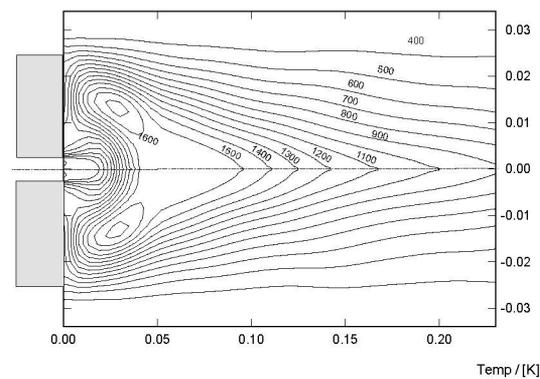
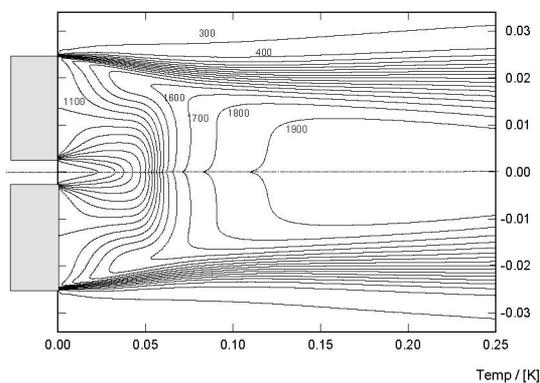
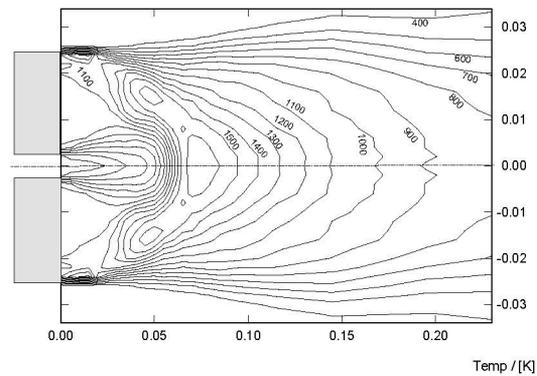
Bearbeiter: U. Maas

Kooperation: M. Nau, A. Wölfert (Institut für Technische Verbrennung, Universität Stuttgart), J. Warnatz (Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen, Universität Heidelberg)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die Bedeutung, die der Modellierung turbulenter Verbrennungsprozesse in der industriellen Anwendung zukommt, wird u.a. daran deutlich, daß zahlreiche namhafte Gasturbinenhersteller mittlerweile diese Technik einsetzen. Darüber hinaus kommen diese Methoden verstärkt in der Motorenentwicklung zum Einsatz. Heute in der Industrie häufig verwendete Ansätze, wie zum Beispiel das Eddy-Break-Up-Modell oder Eddy-Dissipation-Modelle sind jedoch nicht in der Lage, Auswirkungen endlich schneller chemischer Reaktionskinetik zu erfassen. Direkte Numerische Simulationen (DNS) hingegen, bei denen keinerlei Modellannahmen einfließen, sind selbst für inerte Strömungen auch mittelfristig nicht auf technisch relevante Probleme anwendbar. PDF-Modelle, bei denen eine Erhaltungsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (Probability Density Function-PDF) der chemischen Zusammensetzung und gegebenenfalls der Geschwindigkeit gelöst wird, stellen einen eleganten Weg dar, um die genannten Probleme zu umgehen, da sie in der Lage sind, sowohl die Auswirkungen der chemischen Reaktion exakt zu erfassen, als auch gleichzeitig die Simulation technisch relevanter Strömungen erlauben.

Zur Simulation turbulenter Flammen wurde ein hybrides Verfahren entwickelt, das aus drei Teilmodellen besteht: Das turbulente Strömungsfeld wird mittels eines Standard-Turbulenzmodells in Verbindung mit einem Finite Volumen-Verfahren simuliert. Die Kopplung der chemischen Reaktion mit der Turbulenz erfolgt durch Lösung der Transportgleichung für die PDF mittels eines Monte-Carlo-Verfahrens. Zur Beschreibung der chemischen Reaktion werden automatisch reduzierte Reaktionsmechanismen verwendet.

Das entwickelte Verfahren wurde durch Simulation verschiedener experimentell untersuchter Flammen verifiziert. Die Notwendigkeit, die Effekte endlich schneller Reaktionskinetik zu berücksichtigen, zeigt sich bei den Temperaturprofilen in einer stauscheibenstabilisierten Methan-Diffusionsflamme (siehe Abbildung), wo Vorhersagen, basierend auf der hier vorgestellten Methode und einem Standard-Eddy-Dissipation-Modell (EDM), den experimentellen Daten gegenübergestellt werden [1]. Das EDM-Modell ist offensichtlich nicht in der Lage, den Temperaturabfall in Hauptströmungsrichtung zu beschreiben. Der PDF-Ansatz kann diesen Trend erfassen, und bei einer weiteren Verbesserung der verwendeten Teilmodelle ist zu erwarten, daß eine quantitative Modellierung der komplexen Prozesse bei der turbulenten Verbrennung möglich sein wird.



Mittlere Temperaturen in einer Methan-Luft-Flamme; Experiment, Eddy-Dissipation-Modell und PDF-Ansatz (von oben nach unten)

Literatur

1. M. Nau, A. Wölfert, U. Maas, J. Warnatz: *PDF-Simulation turbulenter Flammen unter Verwendung automatisch reduzierter Reaktionsmechanismen*. VDI Berichte Nr. 1193, S. 203-210 (1995)

Dimensionsreduktion bei der Simulation reaktiver Strömungen

Bearbeiter: P. Deuffhard, J. Heroth, U. Maas

Kooperation: H. Niemann, D. Schmidt (Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen, Universität Heidelberg)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die mathematische Modellierung reaktiver Strömungen führt auf sehr große steife partielle Differentialgleichungssysteme, da neben den Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie zusätzlich Erhaltungsgleichungen für alle an der chemischen Reaktion beteiligten Spezies gelöst werden müssen. In praktisch relevanten Systemen, wie zum Beispiel bei der Verbrennung in Kraftfahrzeugmotoren oder in Gasturbinen sind dies mehrere hundert bis über tausend verschiedene chemische Spezies. Eine mathematische Modellierung solcher reaktiver Strömungen ist deshalb nur möglich, wenn eine Dimensionsreduktion der zugrundeliegenden Gleichungen vorgenommen wird. Basierend auf der Beobachtung, daß die Zeitskalen der chemischen Reaktion einen Bereich von mehreren Größenordnungen überdecken (typischerweise 10^{-10} bis 1 s, die physikalischen Prozesse (Diffusion, Turbulenz) jedoch nur einen weitaus kleineren Bereich, läßt sich eine Entkoppelung der schnellsten chemischen Zeitskalen vornehmen. Lokale Eigenwertanalysen der der chemischen Kinetik zugrundeliegenden Gleichungssysteme liefern Informationen über die zu entkoppelnden Zeitskalen und erlauben die numerische Berechnung intrinsischer niedrigdimensionaler Mannigfaltigkeiten im Zustandsraum der chemischen Reaktion. Diese Mannigfaltigkeiten haben die Eigenschaft, daß auf ihnen die langsamen chemischen Prozesse stattfinden, während die schnellen Prozesse stets auf die Mannigfaltigkeit hin relaxieren. Durch Projektion der Spezieserhaltungsgleichungen auf diese niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeiten, erhält man dann eine erhebliche Dimensionsreduktion. Das Verfahren wurde zunächst anhand einiger praktischer Beispiele mit konstanter Dimension des reduzierten Systems erprobt. Die zukünftigen Arbeiten werden dazu dienen, eine adaptive Dimensionswahl in Verbindung mit einer Fehlerkontrolle zu integrieren.

Literatur

1. U. Maas: *Coupling of chemical reaction with flow and molecular transport*. Appl. Math. 40, No.3, 249–266 (1995)
2. P. Deuffhard, J. Heroth: *Dynamic Dimension Reduction in ODE Models*. ZIB–Berlin, Preprint SC 95–29 (1995)

Weiterentwicklung von FD-basierten Linienmethoden

Bearbeiter: U. Nowak, L. Oeverdieck, P. Deuffhard

Kooperation: K. Schaber, J. Körber (Inst. für Technische Thermodynamik, Universität Karlsruhe), G. Eigenberger, J. Frauhammer (Inst. für Chemische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart), K. Ehrhardt (Inst. für Angewandte Chemie Berlin-Adlershof e.V.), P. Capek (Inst. of Chemical Process Fundamentals, Prag, CZ)

Förderung: Das Projekt wird von der Volkswagen-Stiftung unter dem Titel "Modellierung verfahrenstechnischer Prozesse mit Aerosolbildung durch spontane Phasenübergänge" gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die Arbeiten an dem Programmpaket PDEX1M wurden kontinuierlich weitergeführt. Hierbei standen zunächst die allgemeine Pflege und softwaretechnische Verbesserungen im Vordergrund der Arbeit. In Zusammenarbeit mit den Kooperationspartnern aus Stuttgart und Berlin wurde eine verallgemeinerte Benutzerschnittstelle realisiert, die spezielle Modellierungen der diffusiven Vorgänge erlaubt (z.B. dusty gas model). Um für allgemeine Rand- und innere Punktbedingungen einen quadratischen Konsistenzfehler der Diskretisierung zu gewährleisten, werden einseitigen Differenzenapproximationen über mindestens 3 Knoten benötigt. Dies führt zu einer lokalen Vergrößerung der Bandbreite der Jacobi-Matrix des Systems. Um den dadurch entstehenden Lösungsmehraufwand so gering wie möglich zu halten, wurde in einem ersten Schritt das Lineare Algebra Modul des Paketes um einen speziellen Löser für Block-Tridiagonal-Matrizen mit beliebig plazierten Extrablöcken erweitert. In einem nächsten Schritt soll die Erzeugung der Jacobi-Matrix optimiert werden. Erste Schritte in Richtung Parameteridentifikation in parabolischen 1D-Problemen wurden eingeleitet. Das Verfahren PDEX1M wurde um einen speziellen Integrationsmodus (slave mode) erweitert, der eine robuste und effiziente Kopplung mit dem nichtlinearen Ausgleichslöser NLSCON gewährleistet. Bei der angelaufenen Kooperation mit der Universität Karlsruhe, die durch die Volkswagenstiftung gefördert wird, ist eine besondere Schwierigkeit die große Systemdimension. Es treten, abhängig von der speziellen Modellierung und Diskretisierung der örtlichen Transportvorgänge, Block-Band-Matrizen mit unterschiedlichen Bandbreiten auf. Die Blöcke selbst sind groß und dünn besetzt. Erste Untersuchungen zeigen, daß allgemeine Sparse Matrix Techniken nicht effizient genug arbeiten, da die spezielle Blockstruktur nicht ausgenutzt wird.

Literatur

1. U. Nowak: *A Fully Adaptive MOL-Treatment of Parabolic 1D Problems with Extrapolation Techniques*. ZIB-Berlin, Preprint SC 95-25 (1995)

Simulation eines Membranreaktors als Reaktions-Diffusions-System

Bearbeiter: J. Lang

Kooperation: R. Schuch, S. Bitterlich (BASF AG Ludwigshafen)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Ein in der chemischen Industrie häufig eingesetzter Reaktortyp ist der Rohrbündel-Festbettreaktor, bei dem das meist gasförmige Reaktionsgemisch durch mit Katalysatorkörnern gefüllte Rohre geführt wird. Diese Rohre werden von einem Wärmeträgermedium umspült, das je nach Wärmetönung der Reaktion die entstehende Wärme abführt oder die benötigte Wärme nachliefert. Bei Gleichgewichtsreaktionen ist der Reaktionsumsatz thermodynamisch limitiert, so daß mit zunehmendem Umsatz die Reaktion langsamer wird und schließlich zum Erliegen kommt. Weiterhin können als Koppelprodukte gebildete Stoffe unerwünschte Nebenreaktionen initiieren.

Durch Einsatz einer semipermeablen Membran, die selektiv für ein im vorliegenden Fall unerwünschtes Koppelprodukt durchlässig ist, soll der Umsatz erhöht und gleichzeitig eine durch dieses Koppelprodukt begünstigte Nebenreaktion verringert werden. Wegen der starken Temperaturabhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeiten und der starken Wärmetönung der Hauptreaktion müssen Wärmeleitung und Wärmetransport im Gas berücksichtigt werden. Quer zur Strömungsrichtung findet wegen des Abzugs einer Komponente neben der Durchmischung durch Dispersion auch ein Stofftransport durch Konvektion statt. Die Vorgänge in axialer Richtung können, da vorerst nur der stationäre Zustand des Reaktors von Interesse ist, mit Hilfe einer Beobachtungsgeschwindigkeit in ein zeitliches Geschehen umgerechnet werden. Da außerdem Rotationssymmetrie angenommen werden kann, erhält man ein räumlich eindimensionales, partielles Differentialgleichungssystem vom parabolischen Typ. Dieses Problem wurde mit dem in den letzten Jahren entwickelten Programmpaket KARDOS gelöst, wobei nichtlineare Randbedingungen in die bestehende Programmstruktur eingebaut werden mußten.

Wegen der hohen Betriebstemperaturen, die für die vorliegende Reaktion gebraucht werden, sind noch einige technische Probleme zu lösen, bis das Reaktorkonzept verwirklicht werden kann. Wie bereits einige wenige Parameterstudien zeigen, können mit Hilfe des bestehenden Modells sehr schnell optimale Parameterwerte ermittelt werden.

Im Vorfeld des Baus eines Versuchsreaktors kann nun bei zu erwartenden neu auftauchenden Schwierigkeiten bei der technischen Realisierung des Reaktorkonzepts der Einfluß von dann notwendigen Änderungen auf Umsatz und Ausbeute vorausberechnet werden. Umgekehrt kann man mit dem Modell bei entsprechender Überarbeitung herausfinden, wie sich solche Schwierigkeiten umgehen lassen.

2.2.3 Hochfrequente Elektrotechnik

Anwendung von adaptiven Mehrgitter-Methoden zur Berechnung von Eigenlösungen in der integrierten Optik

Bearbeiter: F. Schmidt, P. Deuffhard, T. Friese

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

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

Beschreibung der Forschungsarbeit: Dieses Projekt ist eine Fortsetzung der im Vorjahr zu diesem Thema durchgeführten Arbeiten. Die im Ergebnis der prinzipiellen Studien entwickelte simultane Rayleigh-Quotienten-Mehrgitter-Minimierung erwies sich bei vergleichenden Rechnungen als das für die praktischen Simulationsaufgaben am meisten geeignete Werkzeug (siehe Grundlagenprojekt *Adaptive Mehrgittermethoden zur Berechnung von Eigenlösungen*). Deshalb wurde der Algorithmus in die KASKADE-Umgebung des ZIB (2D-Version) implementiert. Als Beispiel für eine häufige Anwendung in der integrierten Optik sei die Bestimmung der niedrigsten Moden eines Kopplers angegeben. Abb. 1 zeigt das Schema des Überlagerungsempfängers des HHI, der Pfeil markiert den oberen der beiden im Chip verwendeten Koppler. Die untersuchte Kopplerstruktur basiert auf einem III-V-Mischhalbleitersystem. Das Substrat der Brechzahl 3.17 besteht aus InP, der Streifenwellenleiter mit der Brechzahl 3.38 aus GaInAsP. Wie die Symmetrie der Struktur erwarten läßt, sind die beiden niedrigsten Eigenwerte dicht benachbart (gerade und ungerade Eigenfunktion). Daher wurde eine simultane Unterraum-Iteration mit einem Unterraum der Dimension 2 und einem nichtlinearen cg als Glätter durchgeführt. Als Fehlerindikator wurde die relative Änderung des Rayleigh-Quotienten durch eine kantenorientierte hierarchische Baiserweiterung benutzt. Ausgehend von einem Startgitter mit 60 Knoten erfolgte eine adaptive Verfeinerung über insgesamt 11 Level, um die geforderte Endgenauigkeit von 10^{-7} zu erreichen. Das in Abb. 2 zusammen mit der Lösung dargestellte Endgitter enthält 4450 Knoten (bei uniformer Verfeinerung hätte man ca. $4^{11} \cdot 60 \approx 2 \cdot 10^8$ Knoten zu erwarten). Pro Level und Eigenvektor waren asymptotisch 5-8 Iterationen durchzuführen. Die CPU-Zeit für die gesamte Simulation betrug 8 Minuten auf einer Workstation SUN SPARC 20.

Literatur

1. F. Schmidt: *Simultaneous Computation of the Lowest Eigenvalues and Eigenvectors of the Helmholtz Equation*. ZIB-Berlin, TR 95-13 (1995)

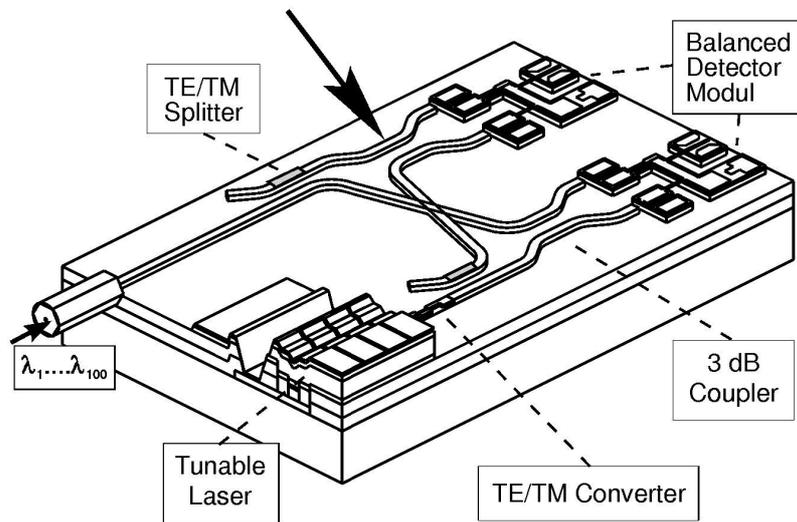


Abb. 1 Schema eines integriert-optischen Überlagerungsempfängers des HHI

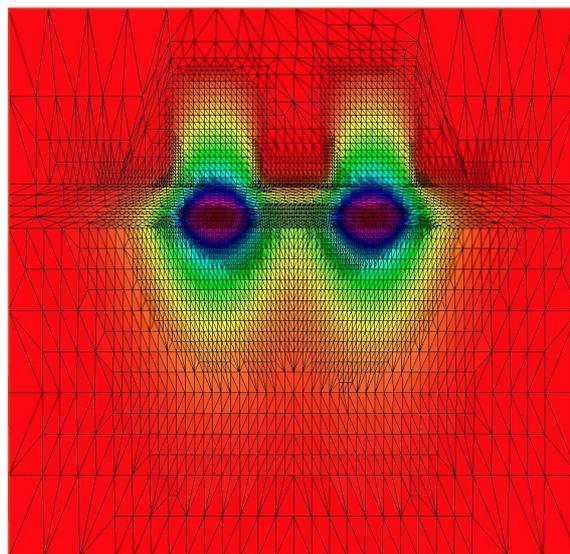


Abb. 2 Intensitätsverteilung der Grundmode und adaptives Gitter

Adaptive Finite-Elemente-Verfahren zur Berechnung hochfrequenter elektromagnetischer Felder

Bearbeiter: R. Beck, A. Walsleben, P. Deuffhard

Kooperation: A. Maurer, P. Turban (Siemens AG, Zentralabteilung Forschung und Entwicklung, Erlangen)

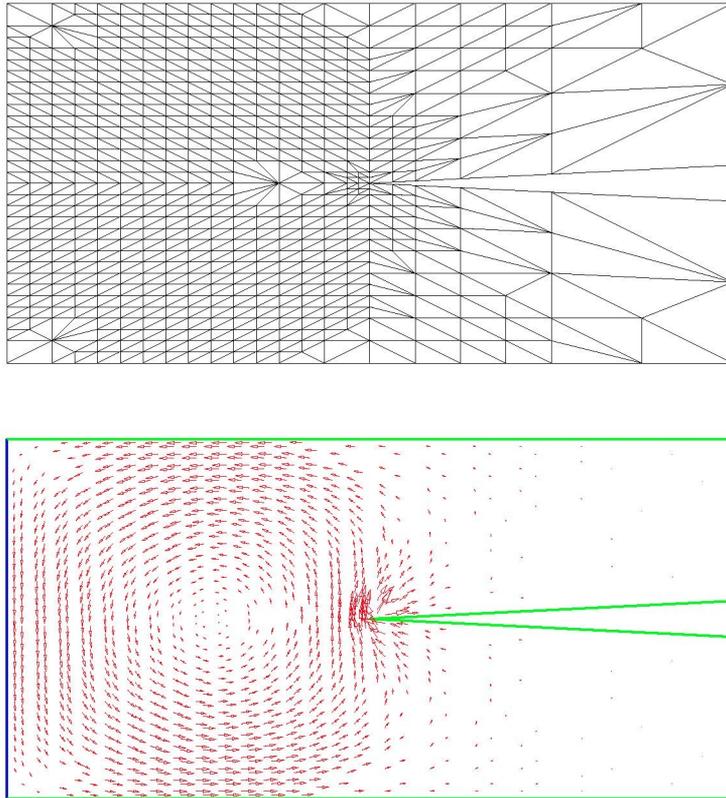
Förderung: Das Projekt wird durch den Sonderforschungsbereich 273 der DFG gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Ziel des Vorhabens ist die Lösung der Maxwell'schen Gleichungen im Frequenzbereich in stark inhomogenen Medien. Schwierig ist hier die Erzeugung eines problemangepaßten Finite-Elemente-Netzes, das insbesondere Sprüngen in Materialgrößen und den daraus resultierenden Unstetigkeiten der Felder Rechnung tragen muß. Um komplizierte geometrische Konfigurationen nachbilden zu können, wird der Raum mit Dreiecken oder Tetraedern diskretisiert.

Zur physikalisch korrekten Modellierung der Felder finden sogenannte Whitney-Basen Verwendung, die zusammen mit einem entsprechenden Variationsansatz Rand- und Übergangsbedingungen per definitionem erfüllt [2]. Im Rahmen einer Diplomarbeit wird das Konvergenzverhalten solcher Diskretisierungen analysiert. Grundlage der Programmentwicklung war der objektorientierte Finite-Elemente-Code KASKADE 3.0 des Konrad-Zuse-Zentrums [1]. Neben der genannten Whitney-Basis wurde ein Fehlerschätzer implementiert, der die lokale Verfeinerung des Tetraeder-Gitters ermöglicht. Er basiert auf einem Verfahren, bei dem das zum berechneten duale Feld in eine Basis höherer Ordnung projiziert wird. Das duale Feld erhält man mittels einfacher Differentiation; dabei kommt die Superkonvergenz-Eigenschaft für Ableitungen in ausgewählten Punkten zum Tragen. Eine L_2 -Projektion liefert die Vergleichswerte für den lokalen Fehlerschätzer. Eine weitere Schwierigkeit besteht in der Lösung der entstehenden hochdimensionalen linearen Gleichungssysteme. Da deren Matrizen indefinit und im allgemeinen schlecht konditioniert sind, ist die Konstruktion eines schnellen Lösungsverfahrens besonders wichtig. Dazu werden Verfahren untersucht, die auf der beim Verfeinerungsprozeß erzeugten Gitterhierarchie basieren. Da die Finite-Elemente-Basen der verschiedenen Hierarchien nicht geschachtelt sind, mußte hierzu eine spezielle Methode für den Gittertransfer entwickelt werden.

Die untere Abbildung zeigt das Magnetfeld der niedrigsten TM-Mode in einem Wellenleiter mit Schlitz; das Finite-Elemente-Gitter ist hier insbesondere an der Metallkante verfeinert.

Ein wesentlicher Anwendungsbereich des Programms wird die Feldberechnung im Projekt Hyperthermie des Sonderforschungsbereichs 273 der DFG sein.



Niedrigste TM-Mode in einem Wellenleiter mit Schlitz: adaptiv verfeinertes Finite-Elemente-Gitter (oben) und Magnetfeld (unten)

Literatur

1. R. Beck, B. Erdmann, R. Roitzsch: *KASKADE 3.0: An Object-Oriented Adaptive Finite Element Code*. Technical Report TR 95-4, Konrad-Zuse-Zentrum (1995)
2. H. Whitney: *Geometric Integration Theory*. Princeton University Press, Princeton (1957)

Simulation der Steuerung von Relaxationsoszillationen in Lasern

Bearbeiter: Ch. Schütte, G. Zumbusch

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

Beschreibung der Forschungsarbeit: Dieses Projekt ist eine Fortsetzung des gleichnamigen Projektes aus den Berichtsjahren 1992–94.

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 vergangenen Jahren war durch Entwicklung und Implementierung eines Glättungsalgorithmus die Möglichkeit zu Langzeitsimulationen der Relaxationsdynamik geschaffen worden.

Im Berichtsjahr wurde das daraus entstandene Programmpaket nochmals optimiert; nun wird neben der Zeit- auch die Ortsdiskretisierung adaptiv gesteuert. Die daraus resultierende Reduktion der Anzahl der Freiheitsgrade bewirkt eine nochmalige Verkürzung typischer Rechenzeiten um etwa einen Faktor 10. Durch diese Effektivitätssteigerung wurde die Simulation der *Regelung der Relaxationsoszillationen* durch inverse Rückkopplung des Ausgangssignals auf die Eingangspumpleistung möglich. Simulationen und Experimente zeigen in guter Übereinstimmung, daß diese Regelung die Relaxationsoszillationen stabilisieren und somit die Auswirkung von stochastischen Störungen dämpfen kann.

Das Programmpaket wird nunmehr bei der Planung und Analyse von Experimenten an Wellenleiter-Lasern eingesetzt, womit das Projekt als vorläufig abgeschlossen gelten kann. Der aktuelle Stand von Modell, Algorithmus und Anwendung ist in [1] zusammengefaßt.

Literatur

1. Ch. Schütte, M. Dinand, G. Zumbusch, R. Brinkmann: *Dynamics of Er-doped Waveguide-Lasers: Modelling, Reliable Simulation, and Comparison with Experiments*. Preprint SC 95–19, ZIB–Berlin (1995)

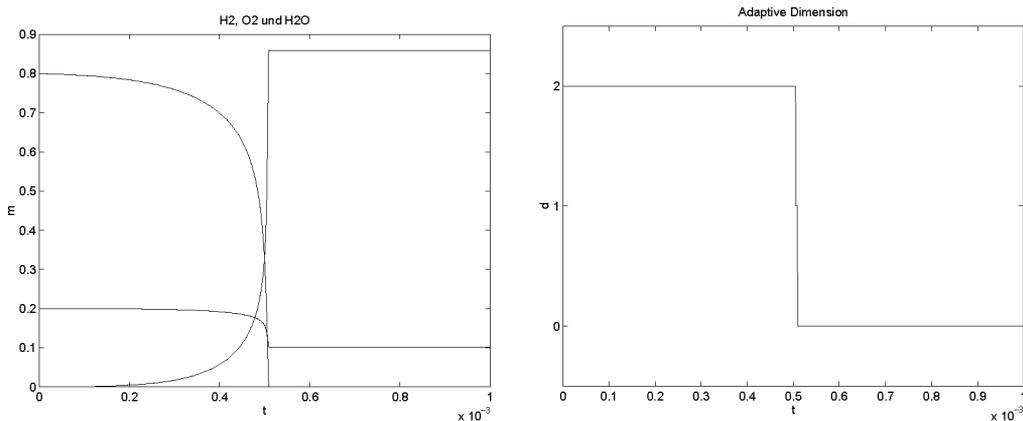
2.2.4 Numerik dynamischer Systeme

Dynamische Dimensionsreduktion für ODE-Modelle

Bearbeiter: P. Deuffhard, J. Heroth, U. Maas

Förderung: Das Projekt wurde im Schwerpunktprogramm “Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme” der DFG gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Eine wichtige Aufgabe bei der Simulation reaktiver Strömungen ist die Approximation detaillierter chemischer Reaktionsmechanismen durch niedrigdimensionale Systeme. Von U. Maas wurde hierzu das Konzept der intrinsic low dimensional manifold (ILDM) [1] entwickelt. Hierbei wird das detaillierte chemische System durch ein differentiell algebraisches System auf einer Mannigfaltigkeit niedriger Dimension ersetzt. Die Analyse dieser Quasi-Steady-State Approximation mit Hilfe der singulären Störungstheorie ergab ein komponentenweises Fehlerkriterium zur Abschätzung des Approximationsfehlers, das algorithmisch einfach zu prüfen ist [2]. Anhand dieses Fehlerkriteriums wird die Dimension des vereinfachten Modells lokal adaptiv gewählt. Die neue Steuerung erlaubt im Gegensatz zur bisher erarbeiteten eine starke Reduktion, die keine nachteiligen Auswirkungen auf die Schrittweitensteuerung des Integrators hat. Beispielrechnungen (Abb.: Knallgasreaktion) belegen, daß das Verfahren sehr robust ist. Die nächsten Schritte werden darauf gerichtet sein, die adaptive Dimensionswahl in den Kontext partieller Differentialgleichungen zu übertragen.



Literatur

1. P. Deuffhard, J. Heroth: *Dynamic Dimension Reduction in ODE Models*. ZIB-Berlin, Preprint SC 95-29 (1995), erscheint in: Proc. Workshop “Scientific Computing in der Chemischen Verfahrenstechnik”, Springer (1996)

Unterteilungsalgorithmen zur Approximation globaler Attraktoren und invarianter Maße

Bearbeiter: A. Hohmann (bis 1.10.95 University of Houston)

Kooperation: M. Dellnitz (ab 1.10.95 Universität Bayreuth), M. Rumpf (Universität Freiburg)

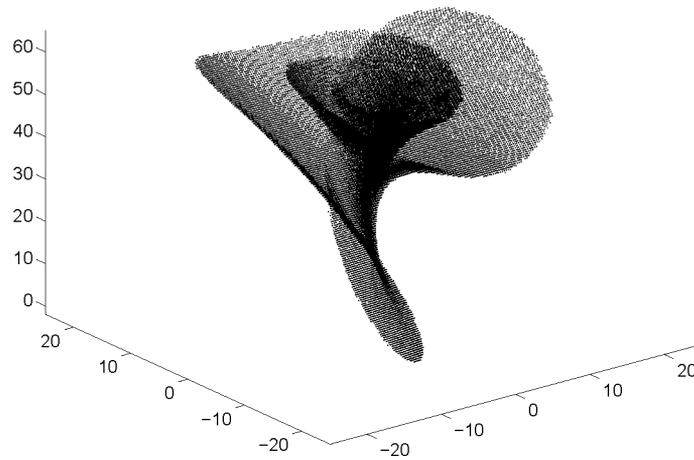
Förderung: Das Projekt wurde innerhalb des DFG–Schwerpunktes “Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme” gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Eine übliche Vorgehensweise zur Analyse des Langzeitverhaltens eines dynamischen Systems mit komplexer (chaotischer) Dynamik besteht darin, das vorliegende System (z.B., gegeben in Form einer gewöhnlichen Differentialgleichung) für zufällig gewählte Anfangswerte zu integrieren und aus den berechneten Trajektorien Schlüsse auf das Gesamtsystem zu ziehen. Es ist klar, daß dieser Ansatz keineswegs eine korrekte Antwort geben muß. Auf der anderen Seite wird das Langzeitverhalten eines dynamischen Systems vollständig durch zwei mathematische Objekte beschrieben: eine *invariante Menge* und ein darauf definiertes (natürliches) *invariantes Maß*.

Mit dem im letzten Jahr vorgestellten Unterteilungsalgorithmus ist es möglich, diese invarianten Mengen effizient zu approximieren, ohne einzelne Trajektorien zu berechnen [1]. Dabei wird eine Folge von Überdeckungen konstruiert, welche gegen die invariante Menge konvergiert. Im Berichtszeitraum wurde dieser Ansatz in zwei Richtungen erweitert. Zum einen wurde eine *lokalisierte* Variante des Algorithmus auf der Basis einer Fortsetzungsmethode entwickelt, die insbesondere die Approximation invarianter Mannigfaltigkeiten erheblich beschleunigt [2].

Zum anderen wurde die Approximation der invarianten Menge nun auch genutzt, um das darauf lebende *invariante Maß* mit Hilfe des zugehörigen Frobenius-Perron-Operators zu visualisieren. Damit ist es zum ersten Mal möglich, invariante Maße auf mehrdimensionalen Attraktoren in vertretbarer Zeit sichtbar zu machen. Dieses Teilprojekt wurde in Zusammenarbeit mit der Visualisierungsgruppe (GRAPE) an der Universität Freiburg durchgeführt.

Das Bild zeigt den Abschluß der zweidimensionalen instabilen Mannigfaltigkeit eines Fixpunktes im Lorenz-System. Eine Serie von Farbbildern mit den zugehörigen invarianten Maßen ist über das WWW zugänglich (URL <http://www.zib-berlin.de/~bzfhohma/dynamics.html/>).



Instabile Mannigfaltigkeit im Lorenz-System

Literatur

1. M. Dellnitz, A. Hohmann: *A Subdivision Algorithm for the Computation of Unstable Manifolds and Global Attractors*. Numerische Mathematik, to appear (1996)
2. M. Dellnitz, A. Hohmann: *The Computation of Unstable Manifolds Using Subdivision and Continuation*. Progress in Nonlinear Differential Equations and Their Applications, Vol. 19, Birkhäuser Verlag Basel (1996)

Numerik symmetrischer dynamischer Systeme

Bearbeiter: K. Gatermann

Kooperation: M. Dellnitz (Institut für Angewandte Mathematik der Universität Hamburg, z.Z. Universität Bayreuth), Y. Kuznetsov (CWI Amsterdam, Niederlande), J. Sanders (Vrije Universiteit Amsterdam, Niederlande)

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 Kooperation mit einer Forschungsgruppe in Amsterdam soll hierzu Software entstehen, die auf deren Paket zur Numerik dynamischer Systeme aufbaut. Ziel ist es, die bekannten Algorithmen zur Symmetrienausnutzung zu implementieren und Anwendungen wie die Pony's-in-a-merry-go-around in den Josephson Junctions zu rechnen. Vorbereitend wurde bereits die objektorientierte Datenstruktur und Einbindung in den vorhandenen Code diskutiert.

In den letzten Jahren wurden jedoch auch für kompliziertere Grenzzustände — etwa für chaotische Attraktoren — zahlreiche Untersuchungen zu deren Symmetrietyp durchgeführt. Ein Charakteristikum ist hierbei, daß sich die Symmetrie lediglich im zeitlichen Mittel manifestiert.

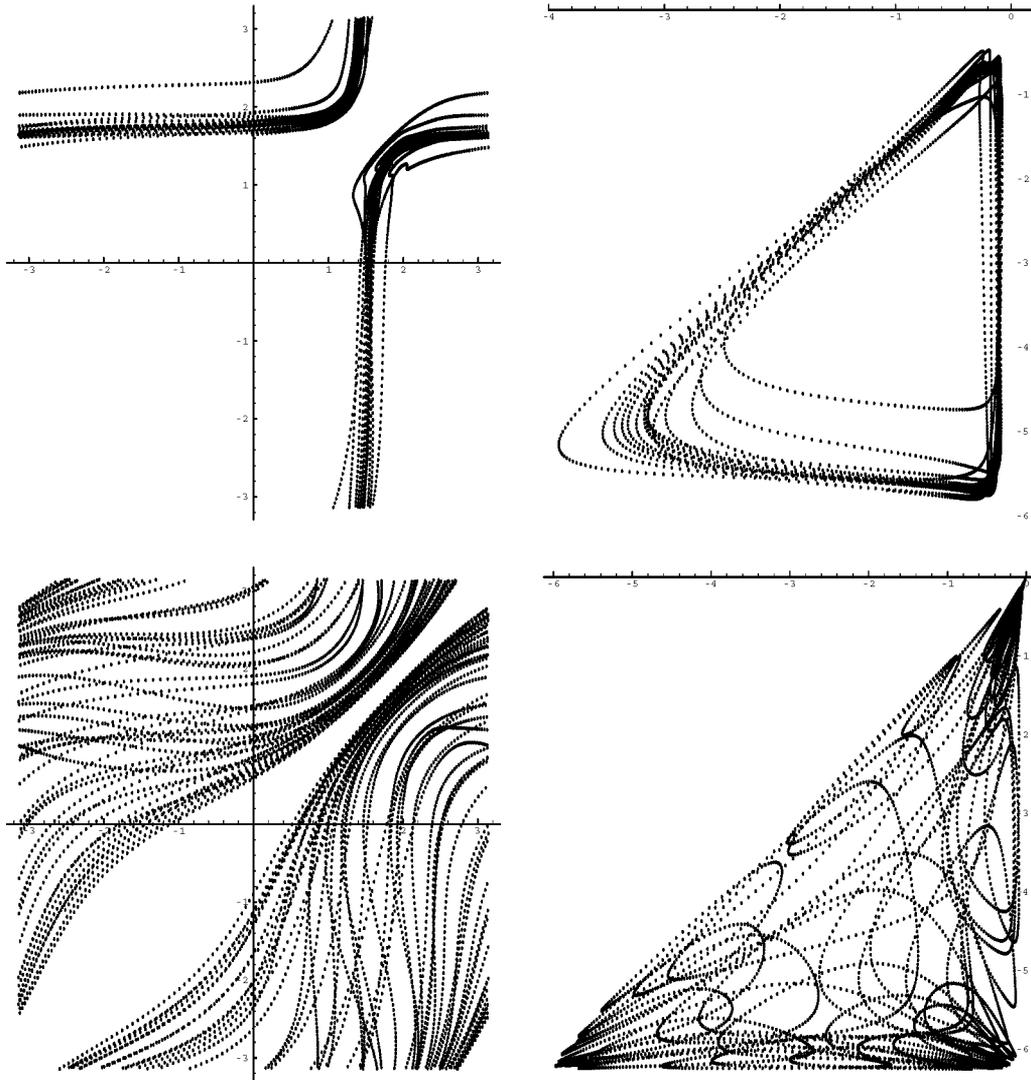
Nachdem das prinzipielle Vorgehen mittels Detektoren allgemein bekannt ist, wurde in diesem Projekt die Wahl eines effizienten Detektors untersucht, bzw. ein rekursiver Algorithmus zu seiner Auswertung konstruiert. Da diese Funktion 100.000 mal oder öfter ausgewertet wird, ist eine sorgfältige Wahl für die Gesamteffizienz sehr bedeutend. Vergleiche mit bekannten Detektoren haben sowohl geringere Rechenzeit als auch deutlich geringeren Speicherplatzbedarf ergeben. Rechnungen für Josephson Junctions (elektrisches Netzwerk) haben die Überlegenheit des neuen algorithmischen Vorgehens unter Beweis gestellt.

Die Bilder zeigen Attraktoren in Josephson Junctions in denen 10 Junctions gleichberechtigt miteinander gekoppelt sind, so daß die zugrundeliegende Symmetrie durch die symmetrische Gruppe S_{10} beschrieben wird. Die numerische Simulation wurde mit Code++ von Andreas Hohmann durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Untersuchung sind in [2] erschienen.

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. K. Gatermann: *Testing for S_n -Symmetry with a Recursive Detective*. ZIB-Berlin, Preprint SC 95-12 (1995)



Symmetrische Attraktoren in einem elektrischen Netzwerk (Josephson junctions).
Es sind jeweils zwei Komponenten gegeneinander geplottet modulo 2π .

Adaptive Integratoren für Hamiltonsche Systeme

Bearbeiter: P. Deuffhard, V. Prole, Ch. Schütte, A. Hohmann

Beschreibung der Forschungsarbeit: Bei der numerischen Integration Hamiltonscher Systeme ist die Vererbung ihrer Erhaltungseigenschaften (z.B. symplektische Struktur, Reversibilität und Energieerhaltung) auf die diskrete Lösung nicht nur wünschenswert, sondern für die Stabilität der Lösung wesentlich. In diesem Zusammenhang sind vor allem die beiden Klassen der symplektischen und der reversiblen Diskretisierungen interessant. Darauf beruhende Integratoren haben (näherungsweise) die gewünschte Vererbungseigenschaft, solange feste und ausreichend kleine Schrittweiten verwendet werden. In vielen Situationen, wie z.B. bei der Simulation der Bewegung auf extremen Kepler-Bahnen oder von Stößen zwischen Molekülen, ist eine Fehlersteuerung der Schrittweite allerdings aus Effizienz- und Verlässlichkeitsgründen notwendig. Bis vor kurzem war kein theoretisch abgesicherter Ansatz zu einer solchen Steuerung bekannt; in [1] wurde nun eine erste Möglichkeit zu *reversibler* Schrittweitensteuerung vorgestellt.

Die von [1] ausgehende Konstruktion eines effizienten, fehlerkontrollierten Algorithmus für große Probleme der Moleküldynamik (MD) ist das Ziel dieses Projektes. Dabei ergeben sich zwangsläufig nichtlineare Gleichungen zur Bestimmung der Schrittweite, welche die Diskretisierung teilweise implizit machen und deren effiziente numerische Lösung Bedingung für ein konkurrenzfähiges Verfahren ist. Im Gegensatz zu den in [1] vorgestellten, voll-impliziten Verfahren bemühen wir uns um die Reduktion des impliziten Charakters. Außerdem werden zur iterativen Lösung der nichtlinearen Gleichungen spezielle, adaptiv gesteuerte Newton-Verfahren konstruiert. Zum Berichtszeitpunkt liegt ein vielversprechender Grundalgorithmus vor, der noch optimiert und mit den üblichen MD-Algorithmen und adaptiven, nicht-reversiblen Verfahren anhand realistischer Probleme verglichen werden muß.

Literatur

1. Hairer, E.; Stoffer, D.: *Reversible Long-Term Integration with Variable Step Sizes*. Preprint, Fachbereich Mathematik, Universität Genf (1995)
2. Prole, V.: *Vorarbeiten für eine Diplomarbeit* (1995)

2.2.5 Molekülphysik

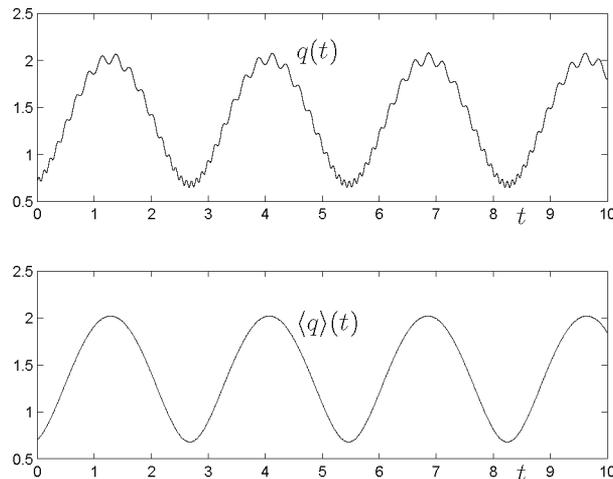
Nichtlineare Glättung von hochoszillatorischen Hamiltonischen Systemen in der Moleküldynamik

Bearbeiter: F. Bornemann, S. Reich, Ch. Schütte, P. Deuffhard

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-mechanischen Hamiltonischen Bewegungsgleichungen. Eine wesentliche Eigenschaft der Lösungen dieser Grundgleichungen ist ihr hochoszillatorischer Charakter. Die schnellen Oszillationen beschränken zum einen die Zeitschrittweiten in der numerischen Integration der Bewegungsgleichungen und verursachen daher extremen Berechnungsaufwand. Zum anderen sind sie verantwortlich für die hohe Fehlerverstärkung in diesen Simulationen, die die Zeitskala für verlässliche Ergebnisse auf den Piko-/Nanosekundenbereich einschränken. Da dieses Problem aus einer Eigenschaft der analytischen Bewegungsgleichungen resultiert, betrifft es alle derzeit in der klassischen Moleküldynamik gebräuchlichen Algorithmen. Die Situation soll durch Mittelung, d.h. *nichtlineare Glättung* bzgl. der Zeit verbessert werden. Die direkte Berechnung einer geglätteten Lösung würde größere Zeitschritte in der numerischen Simulation gestatten. Die Fehlerverstärkung würde sich bei direkter Glättung der schnellsten Oszillationen reduzieren, womit sich interpretierbare Resultate über längere Zeiträume berechnen lassen sollten. Das Projekt "Glättung in der Moleküldynamik" ist einer der Schwerpunkte der Abteilung Numerik. 1995 wurden erste vielversprechende Vorarbeiten am ZIB fertiggestellt, die sowohl analytische [1,2] als auch statistische Glättungsansätze [3,4,5] enthalten und sich in drei Teilprojekte aufgliedern lassen:

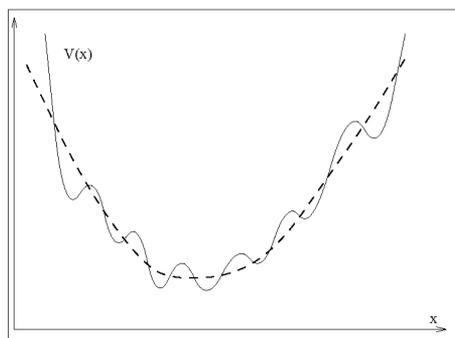
1. *Glättung von Einzeltrajektorien:* Die am schnellsten oszillierenden Freiheitsgrade sind die Bindungswinkel und -längen. Die dafür verantwortlichen Potentialkräfte sind zwei Größenordnungen stärker als die aus anderen Wechselwirkungen resultierenden Kräfte. Man käme zu einer Glättung der Trajektorien, wenn man diese schnellen Freiheitsgrade einfach einfrieren könnte, d.h. wenn die entsprechenden Kräfte praktisch unendlich groß gesetzt und daher durch holonome Zwangsbedingungen ersetzt werden könnten. Eine naive Umsetzung dieser Idee scheitert, da die in den schnellen Oszillationen enthaltene Energie natürlich auch in die langsamen Freiheitsgrade fließen kann. Eine mathematische Untersuchung der Situation zeigt, daß das Einfrieren der schnellen Freiheitsgrade korrigiert werden muß mittels einer Änderung der restlichen schwachen Potentialkräfte, wobei sich das Korrekturpotential gerade aus der Energie der schnellen Oszillationen berechnet. Eine mathematisch exakte Herleitung der Korrekturpotentiale findet sich in [1]; sie bedient sich moderner Werkzeuge der Analysis, wie z.B. verschiede-

ner schwacher Grenzwertbegriffe. Es zeigt sich, daß die aufgeworfenen Probleme auch in anderen Gebieten der mathematischen Physik auftreten und die dort versammelten Ergebnisse mit diesem Zugang übersichtlich zusammengefaßt werden können. Der Bezug dieser allgemeinen Untersuchung zu den Problemen der Moleküldynamik wird in [2] durch Interpretation der Ergebnisse und explizite Berechnung der Korrekturpotentiale für die Bindungswinkel hergestellt.



Oszillatorische Lösung $q(t)$ eines einfachen Bindungswinkelmodells (oben) und geglättete Lösung $\langle q \rangle(t)$ berechnet über Einfrieren des Bindungswinkels mit Korrekturpotential. Vergleiche [2].

2. *Statistische Glättung durch Potentialmittelung:* Während im Teilprojekt 1 die zeitliche Glättung einzelner Trajektorien der entsprechenden Hamiltonschen Systeme und damit einzelne molekulare Systeme untersucht werden, werden hier statistische Ensemble solcher Systeme betrachtet. Es wurde ein dynamisches Modell für Gesamtheiten mit nichtstationärer thermischer Einbettung konstruiert [3]. Hier zeigt sich, daß die Ortserwartungswerte wieder Lösungen eines Hamiltonschen Anfangswertproblems sind, in dem die Kräfte aus der räumliche Mittelung der Molekülpotentiale berechnet werden müssen. Die gemittelten Potentiale enthalten weniger lokale Minima und führen dadurch wieder auf zeitlich glattere Lösungskurven. Die Erwartungswerte der statistischen Gesamtheit sind daher effizienter berechenbar als die Trajektorien der Einzelsysteme.



Typisches Multiminima-Potential und seine räumliche Glättung

3. *Glättung unter Annahme des thermodynamischen Gleichgewichts in den schnellen Freiheitsgraden:* Häufig zerfällt die potentielle Energie in steife, konvexe Beiträge (z.B. Bindungsstreckungen und Bindungswinkelbeugungen) und Anteile mit vielen lokalen Minima (Torsionswinkel). Beide Anteile führen auf schnelle Bewegungen mit kleiner räumlicher Ausdehnung. Durch die Annahme des thermodynamischen Gleichgewichts dieser schnellen Bewegungen bezüglich der langsamen Zeitskalen wird versucht, über die kleinen Ortsskalen zu mitteln und damit das effektive Langzeitverhalten durch geglättete Potentialfunktionen simulieren zu können. Für den Fall der konvexen Anteile führt dieser Zugang auf die Berechnung der freien Energie in den langsamen Freiheitsgraden [4]. Dabei erhält man Zwangsbedingungen und Korrekturterme in der reduzierten potentiellen Energie. Wichtig ist, daß die Zwangsbedingungen in geeigneter Weise definiert werden. Häufig geschieht dies einfach dadurch, daß, z.B. die Bindungswinkel auf ihren Gleichgewichtswert festgelegt werden. Eine bessere Approximation ergibt sich, wenn die Zwangsbedingungen so gewählt werden, daß die Energie entlang des entsprechenden Freiheitsgrades minimiert wird [4]. Das Korrekturpotential ist durch das Fixman-Potential gegeben. Schwieriger ist die Mittelung über Energielandschaften mit vielen lokalen Minima, da in diesem Fall die schnellen und langsamen Freiheitsgrade nicht durch eine Koordinatentransformation separiert werden können. Trotzdem ist es möglich, vermittels geeigneter Transformationen zwischen steifen und weichen Potentialanteilen zu unterscheiden. Unter Annahme der zeitlichen Separation der zugehörigen schnellen bzw. langsamen Bewegungen wird dann die Bewegung entsprechend der steifen Potentialanteile durch ein vereinfachtes thermodynamisches Modellsystem ersetzt. Dies führt schließlich auf eine geglättete Langevin-Dynamik gekoppelt mit einer Zeittransformation, die sich aus den thermodynamischen Eigenschaften der schnellen Bewegung ergeben. In gewisser Weise läßt sich diese Zeittransformation als eine adaptive Schrittweitensteuerung verstehen, die sich nicht am lokalen Fehler, sondern an der Thermodynamik der schnellen Lösungsanteile orientiert [5].

Literatur

1. F. Bornemann, Ch. Schütte: *Homogenization of Highly Oscillatory Hamiltonian Systems*. ZIB–Berlin, Preprint SC 95–39 (1995)
2. F. Bornemann, Ch. Schütte: *A Mathematical Approach to Smoothed Molecular Dynamics: Correcting Potentials for Freezing Bond Angles*. ZIB–Berlin, Preprint SC 95–30 (1995)
3. Ch. Schütte: *Smoothed Molecular Dynamics for Thermally Embedded Systems*. ZIB–Berlin, Preprint SC 95–14 (1995)
4. S. Reich: *Enhancing long-term simulations of Hamiltonian systems containing a strong non-convex potential*. ZIB–Berlin, Preprint SC 95–32 (1995)
5. S. Reich: *Torsion dynamics of molecular systems..* Phys. Rev. E. in press.

Quanten–Klassische Modelle für die Moleküldynamik

Bearbeiter: F. Bornemann, P. Nettessheim, Ch. Schütte, P. Deuffhard

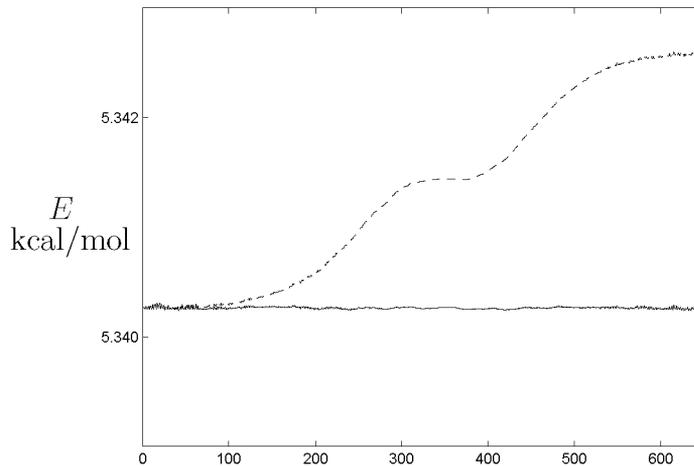
Kooperation: J. Manz, B. Schmidt (FU Berlin, Institut für physikalische und theoretische Chemie), B. Lesyng, P. Bala (ICM, Universität Warschau, Polen)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Realistische (bio)molekulare Systeme sind gekennzeichnet durch eine sehr große Anzahl von Freiheitsgraden. Es ist zwar allgemein akzeptiert, daß die Beschreibung molekularer Prozesse auf der Grundlage der Quantenmechanik erfolgen sollte; vollständig quantendynamische Beschreibungen sind aber nur für Systeme mit sehr wenigen Freiheitsgraden möglich. Daher erfolgt die Simulation der Dynamik großer molekularer Systeme typischerweise auf der Grundlage rein klassischer Hamiltonscher Bewegungsgleichungen, und die Quantentheorie geht nur in die Konstruktion der dabei verwendeten Wechselwirkungspotentiale ein. Diese *klassische* Moleküldynamik liefert für viele Situationen gute Ergebnisse, muß aber versagen, wenn originär quantenmechanische Prozesse, wie optisch induzierte Konfigurationsänderungen, die Dynamik von Bindungsprozessen oder Protonentransferreaktionen an sogenannten “aktiven Zentren” von Proteinen, eine wesentliche Rolle spielen. Zur Beschreibung solcher Szenarien ist man daher an Modellen interessiert, die einen wesentlichen, aber kleinen Teil des molekularen Systems quantendynamisch beschreiben, während der große “Rest” weiterhin klassisch modelliert wird.

Verschiedene Klassen solcher gemischt quanten–klassischer Modelle werden in der Literatur diskutiert. In den meisten Fällen liegen allerdings keine Resultate darüber vor, inwiefern diese Modelle als Approximationen der vollständig quantendynamischen Beschreibung dienen können. In dieser Situation vereint das Projekt zwei wesentliche Fragestellungen:

1. *Herleitung quanten–klassischer Modelle:* Die Beurteilung der Verlässlichkeit quanten–klassischer Modelle soll ermöglicht werden — und zwar durch die mathematische Charakterisierung der Voraussetzungen unter denen ein Modell aus der vollständig quantendynamischen Beschreibung abgeleitet werden kann. Eine solche Klassifikation erlaubt dann die Auswahl des “richtigen” Modells und liefert gleichzeitig Erkenntnisse über die Grenzen seiner Anwendbarkeit. Da die algorithmische Realisierung der verschiedenen Modelle zu teilweise sehr großen Unterschieden im Rechenaufwand führt, ist das Problem der Auswahl gleichzeitig eine Effizienzfrage. In [1] werden erste Ergebnisse für Modelle zur Simulation von Protonentransferreaktionen präsentiert. Es wird gezeigt, daß unter gewissen Bedingungen die Separation der Wellenfunktion in den klassisch und den quantenmechanisch zu beschreibenden Teil zusammen mit dem Grenzübergang der WKB–Theorie für den klassischen Teil gerechtfertigt werden kann. Außerdem ergibt sich, daß das abgeleitete Modell eine kanonische Hamiltonsche Struktur hat, also Erhaltung einer Energie und einer symplektischen Struktur zeigt.

2. *Diskretisierung quanten-klassischer Modelle:* An die Beobachtung einer kanonischen Hamiltonschen Struktur schließt sich die Frage nach der geeigneten Diskretisierung solcher Modelle an, d.h. die Frage nach der Vererbung der Erhaltungseigenschaften des Modells auf die durch numerische Integration gewonnene Lösung. Für das in [1] abgeleitete Modell konnte eine explizite, symplektische Diskretisierung konstruiert werden [2], die die stabile Integration der Modellgleichungen erlaubt. Diese Diskretisierung und die Voraussagen für die Verlässlichkeit des Modells wurden anhand aktuell diskutierter Beispiele erfolgreich getestet.



Typischer Verlauf der Gesamtenergien E bei der numerischen Integration quanten-klassischer Bewegungsgleichungen. Während der in [2] konstruierte symplektische Integrator die Energie nahezu erhält (durchgezogene Linie), führt die bisher übliche Verwendung nichtsymplektischer Verfahren bei gleichem Aufwand zu zunehmenden Energieabweichungen (gestrichelte Linie) und damit zu stark anwachsendem Fehler. Vergleiche [2].

Literatur

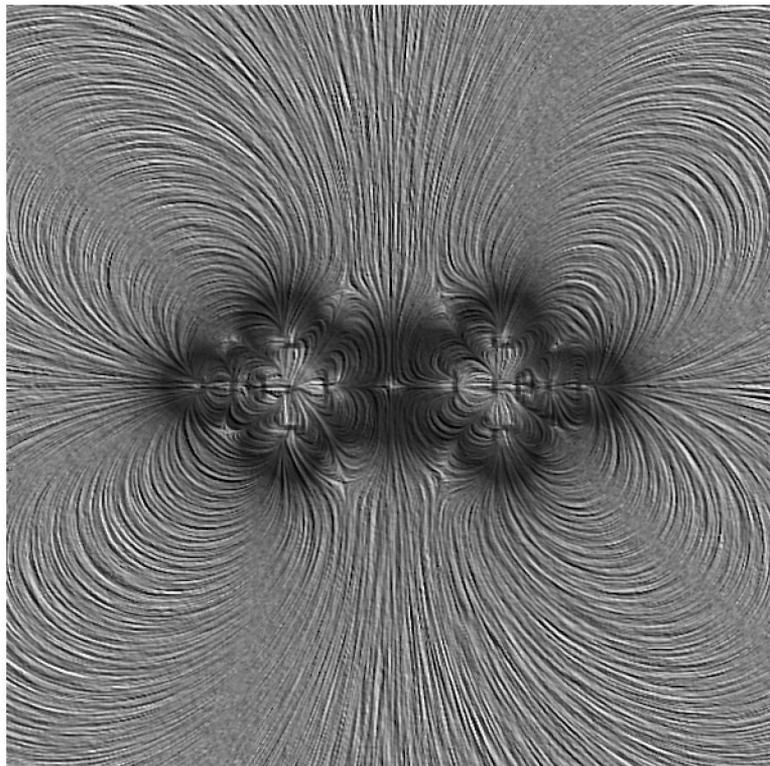
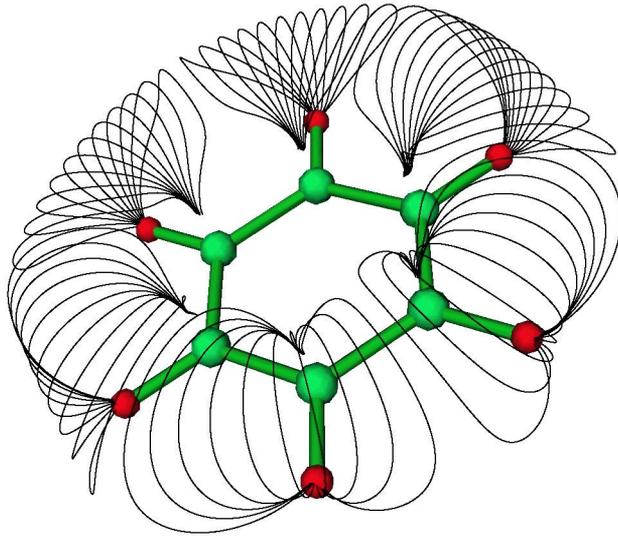
1. F. Bornemann, P. Nettesheim, Ch. Schütte: *Quantum-Classical Molecular Dynamics as an Approximation to Full Quantum Dynamics*. ZIB-Berlin, Preprint SC 95-26 (1995)
2. P. Nettesheim: *An explicit symplectic integrator for quantum-classical molecular dynamics*. ZIB-Berlin, Preprint SC 95-40 (1995)

Visualisierung in der Quantenchemie

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

Beschreibung der Forschungsarbeit: In der Computational Chemistry spielt die Visualisierung von molekularen Daten eine entscheidende Rolle. Nur durch die bildhafte, räumliche Darstellung lassen sich die bei der Simulation von molekularen Prozessen typischerweise entstehenden Datenmengen in eine für den Anwender erfassbare Form bringen. Neben der Molekülgeometrie gibt es eine Reihe weiterer Moleküleigenschaften, deren Darstellung beim *molecular modeling* von Interesse ist. Dazu gehören z.B. molekulares elektrostatisches Potential und Feld, Elektronendichteverteilungen oder Schwingungsmoden. Von besonderem Forschungsinteresse ist das Einbeziehen des elektrostatischen Feldes, da es wesentlich zum Verständnis von quantitativen Struktur-Wirkungsbeziehungen beiträgt. Entsprechende Visualisierungsmöglichkeiten sind in kommerziellen Programmen bisher allenfalls in rudimentärer Form vorhanden.

Mittels moderner Verfahren zur Isoflächengenerierung (mit integrierter Polygonreduktion) wurde u.a. das elektrostatische Potential von interessanten organischen Molekülen visualisiert. Verschiedene Verfahren zur Darstellung von Vektorfeldern wurden auf das Anwendungsgebiet zugeschnitten und an Daten aus quantenchemischen Simulationen erprobt. Mittels neuer textur-basierter Verfahren zur Darstellung von Vektorfeldern, in Ebenen und auf gekrümmten Flächen, konnten erstmals hochaufgelöste Bilder von molekularen elektrostatischen Feldern gewonnen werden. Durch die Kombination der verschiedenen Verfahren in einer interaktiven 3D-Graphik-Umgebung (IRIS Explorer) konnte ein leistungsfähiges Werkzeug für die Analyse quantenchemischer Simulationen bereitgestellt werden.



Feinstruktur des elektrostatischen Feldes in einem Benzol-Molekül

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: Zur Beschreibung des Einflusses von Umgebungseffekten (Lösungsmittel, *back bone* von Makromolekülen) auf die molekulare Elektronenstruktur können Kontinuumsmodelle herangezogen werden. Häufig werden nur die energetisch wesentlichsten Beiträge (Coulomb- und Polarisations-Wechselwirkung) in den molekularen Hamilton-Operator eingeschlossen. Untersuchungen zeigten jedoch, daß die Berücksichtigung der Dispersionswechselwirkung 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. Es wurde ein Mehrzentrenansatz auf der Basis von NAOs für die Berechnung von atomaren Polarisierbarkeiten implementiert. Erste Testuntersuchungen an unsymmetrischen Molekülen zeigen ein verbessertes Konvergenzverhalten. Für den Einsatz in Routineuntersuchungen sind Verbesserungen der Implementierung des Modells in Arbeit.

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** pp. 9174 (1993)
2. M.A. Aguilar, F. Olivares del Valle: *A Computation Procedure for the Dispersion Component of the Interaction Energy in Continuum Solute-Solvent Models*. J. Chem. Phys. **138** pp. 327 (1989)
3. G. Rauhut, T. Clark, *Fast Calculation of Electrostatic Potentials: The NAO/PC Model*. J. Computat. Chem. **14** pp. 503 (1993)

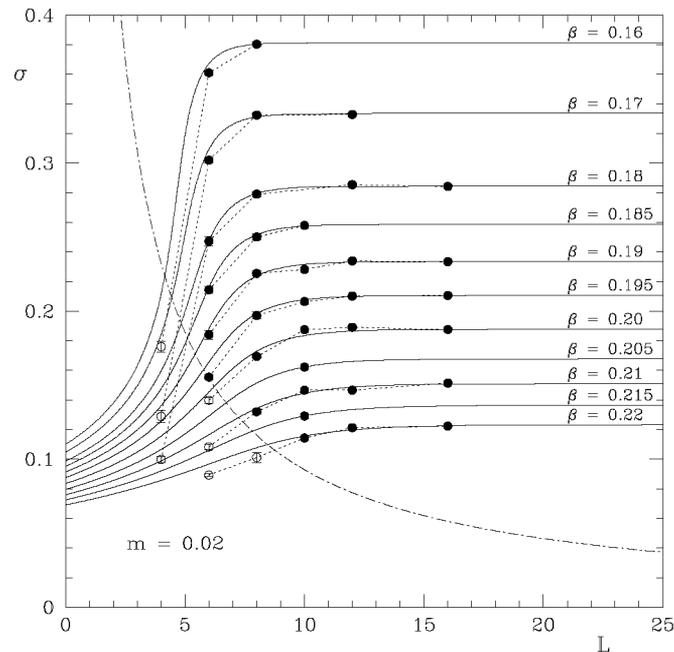
Der Kontinuumslimites der nicht-kompakten Gitter-QED

Bearbeiter: H. Stüben

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

Beschreibung der Forschungsarbeit: Zum Studium des Kontinuumslimites einer Gitterfeldtheorie mit dynamischen Fermionen müssen Extrapolationen auf unendlich großes Gitter gemacht werden. Zur Durchführung der Extrapolationen benötigt man einen Ansatz für das *finite-size-scaling*.

Es ist uns gelungen, das finite-size-scaling des chiralen Kondensats σ mit wenigen Parametern (die über den gesamten von uns untersuchten Bereich der physikalischen Parameter m und β konstant sind) phänomenologisch zu beschreiben. Unser Ansatz beschreibt Daten aus Monte-Carlo-Rechnungen gut bis hinunter zu einem Wert von 1,5 für das Verhältnis von linearer Gitterausdehnung L zu Korrelationslänge ξ .



Literatur

1. M. Göckeler, R. Horsley, V. Linke, P. Rakow, G. Schierholz, H. Stüben: *Probing the Continuum Limit in Non-Compact QED: New Results on Large Lattices*. Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **42**, 660–662 (1995)

2.2.6 Wissenschaftliche Software

Weiterentwicklung von KASKADE (adaptive Multilevel–FE–Methoden)

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

Kooperation: R. Kornhuber, H. Langmach, J. Fuhrmann (WIAS Berlin)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Berichtszeitraum wurden die Arbeiten an dem in C++ programmierten KASKADE–Baukasten fortgesetzt. Schwerpunkte der Arbeit waren

- Erweiterung der Problemklassen,
- neue Funktionen der Gitterverwaltung und
- Erstellung einer graphischen Benutzeroberfläche.

Pflege und Vertrieb: Die neueste Version KASKADE 3.0 ist über die elektronische Bibliothek des ZIB (<ftp://elib.zib-berlin.de/pub/kaskade>) und weitere ftp–Server (etwa MGNED) weltweit verfügbar. 1995 wurden im ZIB etwa 50 Zugriffe/Monat gezählt. Ein Leitfaden über die Struktur des Programms [1] und das neue Benutzer–Handbuch [2] mit vielen Beispielen wird dort ebenfalls vertrieben.

Kontinuierlich wurden Fehler behoben, die entweder bei der direkten Zusammenarbeit im Hause auftraten oder von auswärtigen Benutzern gemeldet wurden. Die Kaskade–Mailingliste (kaskade-1@zib-berlin.de), die jetzt am ZIB gepflegt wird, dient etwa 100 Teilnehmern als Forum für Mitteilungen über neue Versionen und Erfahrungen von allgemeinem Interesse. Subskribiert wird die Liste bei Majordomo@ZIB-Berlin.DE mit `subscribe kaskade-1` im Textteil der Mail.

Im Rahmen von Beratungsschwerpunkten wurden neue Problemklassen mit dem KASKADE–Baukasten erschlossen.

Literatur

1. F. Beck, B. Erdmann, R. Roitzsch: *KASKADE 3.0 – An Object–Oriented Adaptive Finite Element Code*. ZIB–Berlin, TR 95–4 (1995)
2. F. Beck, B. Erdmann, R. Roitzsch: *KASKADE Version 3.x User’s Guide*. ZIB–Berlin, TR 95–11 (1995)

Parallele adaptive Multilevel-Methoden

Bearbeiter: P. Deuffhard, K.-D. Oertel, U. Nowak, G.W. Zumbusch

Förderung: Das Projekt wird von der Firma Cray Research Inc., Eagan/USA unter dem Titel "Parallel Adaptive Multilevel Methods" gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Ziel des im Berichtsjahr begonnenen Projektes ist die Parallelisierung einiger Varianten des adaptiven Multilevel-Programmbaukastens KASKADE auf dem massiv parallelen Rechner Cray T3D. Die Aktivitäten im Berichtszeitraum waren durch vorbereitende Arbeiten geprägt. Als Grundlage des Projektes wurde die objekt-orientierte C++ Version 3.0 von KASKADE ausgewählt. Der Programmbaukasten wurde auf dem Cray T3D Rechner als Einprozessorversion ('single node program') installiert. Hierauf basierend wurde eine Rechenzeitanalyse der einzelnen Programmteile durchgeführt ("Profiling").

Basis jeder Parallelisierung sollte ein bezüglich der Rechenzeit optimiertes sequentielles Programm sein. Unter diesem Aspekt wurden verschiedene Teile von KASKADE analysiert und gegebenenfalls optimiert, der Löser des linearen Gleichungssystems insbesondere unter dem Gesichtspunkt der Verwendung von BLAS-Routinen. Es zeigte sich, daß die Beachtung des Cache-Verhaltens der RISC-Prozessoren der Cray T3D bei der Programmierung eine wesentliche Rolle spielt.

Ein Ergebnis der Zeitmessungen für typische stationäre Beispielprobleme ist, daß die Assemblierung der Matrizen des linearen Gleichungssystems und der verwendeten Fehlerschätzer die meiste Rechenzeit benötigt, deutlich mehr als die eigentliche Lösung des linearen Gleichungssystems auf jedem Gitter der betrachteten Multilevel-Methoden. Unter dem Aspekt der Parallelisierung ist dies positiv zu sehen, da die Assemblierung bei geeigneter Gebietsverteilung mit wenig Kommunikation zwischen den Prozessoren realisierbar ist und daher in diesen Programmteilen eine hohe parallele Effizienz erwartet werden kann.

Die sequentielle KASKADE steht als Public Domain Software allen interessierten Anwendern zur Verfügung. Um dies auch für die parallele Version zu gewährleisten, wird aus Gründen der Portabilität zunächst eine prinzipiell auf dem Message Passing Standard MPI basierende Fassung erzeugt, aus der jedoch zu einem späteren Zeitpunkt eine hochoptimierte spezielle Cray T3D Version abgeleitet werden kann. Wegen der angestrebten Portabilität werden auch keine der Vorschläge zur Erweiterung der Sprache C++ um parallele Konzepte verwendet, da diese noch nicht standardisiert sind.

Objektorientierte Werkzeuge zur adaptiven Lösung von Differentialgleichungen

Bearbeiter: A. Hohmann, Ch. Schütte

Kooperation: M. Wulkow (CiT, Rastede), O. Junge (Universität Bayreuth)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Mittelpunkt der Weiterentwicklung der C++ Klassenbibliothek standen 1995 im wesentlichen drei Bereiche:

- Vorbereitung der numerischen Löser auf PDE-Anwendungen mit wechselnden Diskretisierungen
- Einbau von Methoden zur Ableitung von diskretisierten Flüssen (interne numerische Differentiation)
- Softwaretechnische Verbesserungen

Das Problem, numerische Algorithmen effizient für beliebige Vektorräume zu implementieren, wurde durch die Einführung sogenannter “Vektorfabriken” gelöst. Dabei handelt es sich im wesentlichen um die Kombination einer BLAS-ähnlichen Schnittstelle mit Funktionen zur Speicherorganisation.

Zu den softwaretechnischen Verbesserungen gehört z.B. die durchgehende Verwendung von “Beobachtern”, mit denen das Verhalten von numerischen Algorithmen nahezu beliebig protokolliert werden kann. Des weiteren wurde die Dokumentation mit Hilfe des Doc++ Tools verbessert, und durch eine eindeutige Namensgebung die Kombination mit anderen Bibliotheken erleichtert.

Da die volle Kompatibilität zur code++ Bibliothek nicht erhalten werden konnte und die Funktionalität zunehmend über gewöhnliche Differentialgleichungen hinausgehen wird, läuft die Ende 1995 entwickelte neue Version unter dem Name TIDE (Tools for the Integration of Differential Equations).

Dieses Werkzeug wird bereits in den Projekten “Unterteilungsalgorithmen zur Approximation globaler Attraktoren und invarianter Maße” sowie “Adaptive Integratoren für Hamiltonsche Systeme” eingesetzt.

Aktuelle Informationen (Klassenhierarchien, Installationsanleitungen) finden sich unter <http://www.zib-berlin.de/~bzfhohma/oon.html/>.

Parallele linear-implizite Extrapolationsverfahren

Bearbeiter: R. Ehrig, U. Nowak, P. Deuffhard

Förderung: Das Projekt wird von der Firma Cray Research, Inc., Eagan/USA unter dem Titel "Parallel Linearly-Implicit Extrapolation Methods" gefördert.

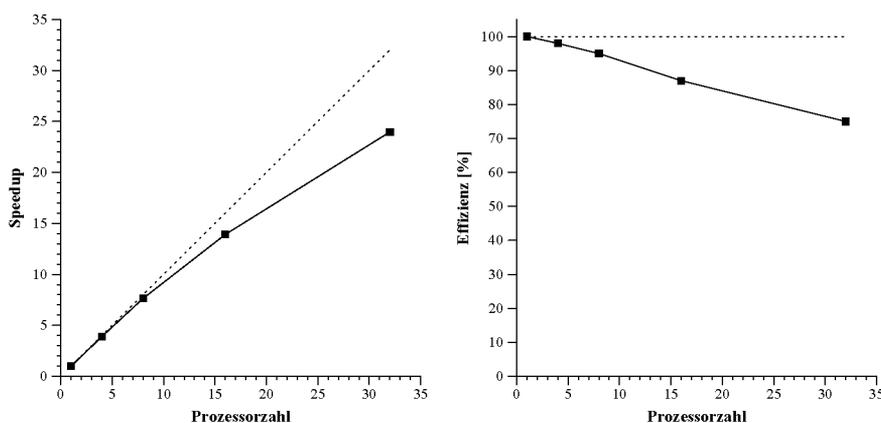
Beschreibung der Forschungsarbeit: Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung von effektiven und auch für große Prozessorzahlen skalierbaren parallelen Implementierungen der verschiedenen linear-impliziten Methoden zur Lösung gewöhnlicher und partieller Differentialgleichungen sowie differentiell-algebraischer Systeme. Die am ZIB entstandenen Programmpakete EULSIM, LIMEX und PDEX1M, die auf diesen Verfahren basieren, eignen sich besonders für reale Probleme aus der Verfahrenstechnik, etwa der Simulation von Verbrennungsvorgängen oder katalytischen Prozessen. Anhand des Programms EULSIM wurden im Berichtszeitraum die wesentlichen Techniken zur Parallelisierung der genannten Programme entwickelt. Für große Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen mit dicht-besetzter Jacobi-Matrix wurde eine parallele LU-Zerlegung mit zyklischer oder block-zyklischer Verteilung der Spalten der Jacobi-Matrix auf die Prozessoren implementiert. Diese Methode ist außerordentlich gut skalierbar und belegt die hohe Kommunikationsleistung des Rechners Cray T3D. Die Diskretisierung partieller Differentialgleichungen durch die Linienmethode führt dagegen auf große Bandmatrizen. Allgemeine effektive direkte Verfahren zur parallelen Faktorisierung von Bandmatrizen sind nicht bekannt, daher mußten in diesem Fall auch iterative Lösungsverfahren untersucht werden. Als geeignete Verteilung der Matrix bietet sich in diesem Fall eine Zerlegung in horizontale Streifen an. Diese Partitionierung entspricht einer eindimensionalen Gebietszerlegung und ermöglicht die natürliche Konstruktion von präkonditionierten Verfahren. Als zuverlässigste und schnellste iterative Methoden erwiesen sich parallele Versionen von GMRES und BiCGSTAB. Da innerhalb des Extrapolationsschemas und somit auch bei der näherungsweise Lösung der Gleichungssysteme stets der Fehler, nicht aber das Residuum, die entscheidende Größe ist, wurden insbesondere auch fehlerminimierende iterative Verfahren intensiv studiert. Weiterhin wurden Möglichkeiten zur Wiederverwendung der Krylovräume innerhalb des Extrapolationsschemas und die Benutzung eines zeitschrittunabhängigen, also für verschiedene Schrittweiten gemeinsam benutzbaren Präkonditionierers theoretisch und praktisch untersucht. Die bisher entwickelten parallelen direkten Verfahren basieren auf der BLACS-Kommunikationsbibliothek von Cray. Um die Kommunikationsleistung so weit wie möglich auszuschöpfen wurden die iterativen Verfahren dagegen mit Hilfe der sogenannten shared-memory-Routinen realisiert. Hierzu wurde ein Satz von optimierten Unterprogrammen formuliert, der sichere Kommunikation allein auf der Basis der schnellsten Routine `shmem_put` ermöglicht.

Parallelisierung der Gradientenberechnung in einem semi-empirischen Programm

Bearbeiter: T. Steinke

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

Beschreibung der Forschungsarbeit: Ein Weg zur quantenchemischen Berechnung sehr großer Moleküle besteht in der Nutzung von parallelen Hardwarearchitekturen. Aufgrund des limitierten Hauptspeicherangebots pro Knoten beschränken *replicated data* Implementierungen die Anwendbarkeit auf große molekulare Systeme. Die Aufteilung der größten Datenstrukturen auf alle Knoten ist unumgänglich. Neben der inherent parallelen Abarbeitung von Energieberechnungen bei unabhängigen Kernkonfigurationen (für Reaktionswegrechnungen *IRC* oder Potentialflächenscans) ist eine feinkörnigere Parallelität bei normalen Geometrieoptimierungen wünschenswert. Diese Strukturoptimierungen setzen eine schnelle Berechnung des Gradienten der Gesamtenergie bezüglich der Kernkoordinaten voraus. In Kooperation mit dem *CCC* wird das semi-empirische Programm VAMP in Teilen auf den Cray T3D portiert.



Skalierung der Berechnung des Gradienten für das Hexamer des Thiophens (44 Atome) auf Cray T3D

Literatur

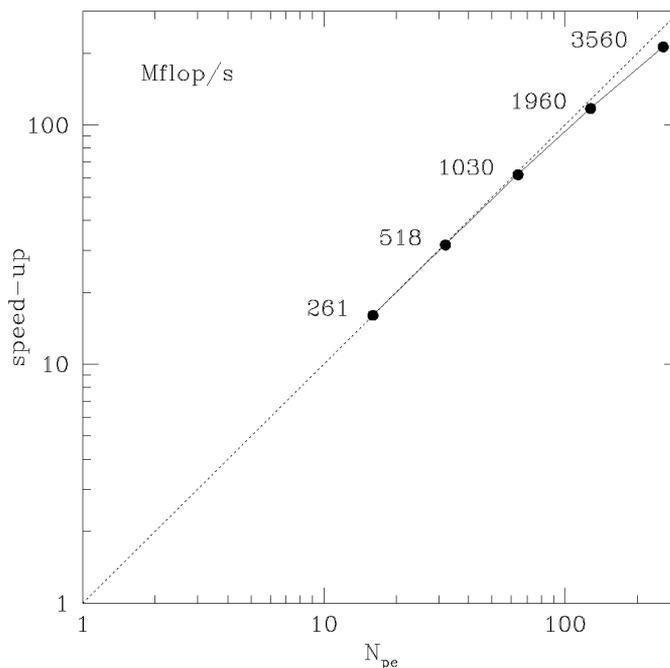
1. G. Rauhut, A. Alex, J. Chandrasekhar, T. Steinke, T. Clark: VAMP *Version 5.5*, Computer-Chemie-Centrum, Universität Erlangen-Nürnberg (1995)

Die kompakte Gitter-QED mit Wilson-Fermionen

Bearbeiter: H. Stüben

Kooperation: A. Hoferichter, M. Müller-Preußker (Institut für Physik, HU Berlin)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Am ZIB wurde das Hybrid-Monte-Carlo-Programm des Projektes auf den Parallelrechner Cray T3D portiert. Zur Parallelisierung wurden *shared-memory* Routinen und CRAFT eingesetzt. Die schnellen *shared-memory* Routinen wurden im rechenintensiven Kern des Programms verwendet. Da die Parallelisierung des restlichen Programms aufwendiger ist und das Programm außerhalb des Kerns wenig Rechenzeit aufnimmt, wurde der Großteil des Programms in CRAFT parallelisiert. Besonderes Augenmerk galt der Steigerung der Rechenleistung auf einem einzelnen Prozessor. Im Kern des Programms wurden 21 Mflop/s erzielt. Bei realistischen Prozessorzahlen liegt der Verlust durch Kommunikationszeiten zwischen 20 und 40%. Die Abbildung zeigt Skalierung und Nettorechenleistung der Kerns.



Literatur

1. A. Hoferichter, V.K. Mitrjushkin, M. Müller-Preußker, T. Neuhaus, H. Stüben: *Compact lattice QED with Wilson fermions*. Nucl. Phys. **B434**, 358–380 (1995)

Graphische Benutzeroberflächen für CodeLib-Software

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

Kooperation: B.E. Sucrow (Fachbereich Mathematik und Informatik, Spezifikation von Softwaresystemen, Universität – Gesamthochschule Essen)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die graphischen Benutzeroberflächen (Graphical User Interfaces, GUIs) für CodeLib-Software unterstützen die Erstellung von Steuerdateien für die numerischen Anwendungen, die kontrollierte Ausführung dieser Programme und die Nachbearbeitung der Resultate. Die Anforderungen an die numerischen Anwendungsprogramme beschränken sich auf die Verwendung von Parameterdateien, die einer einfachen Syntax genügen und der Verwendung der (Unix-) Standard-Ein/Ausgabe.

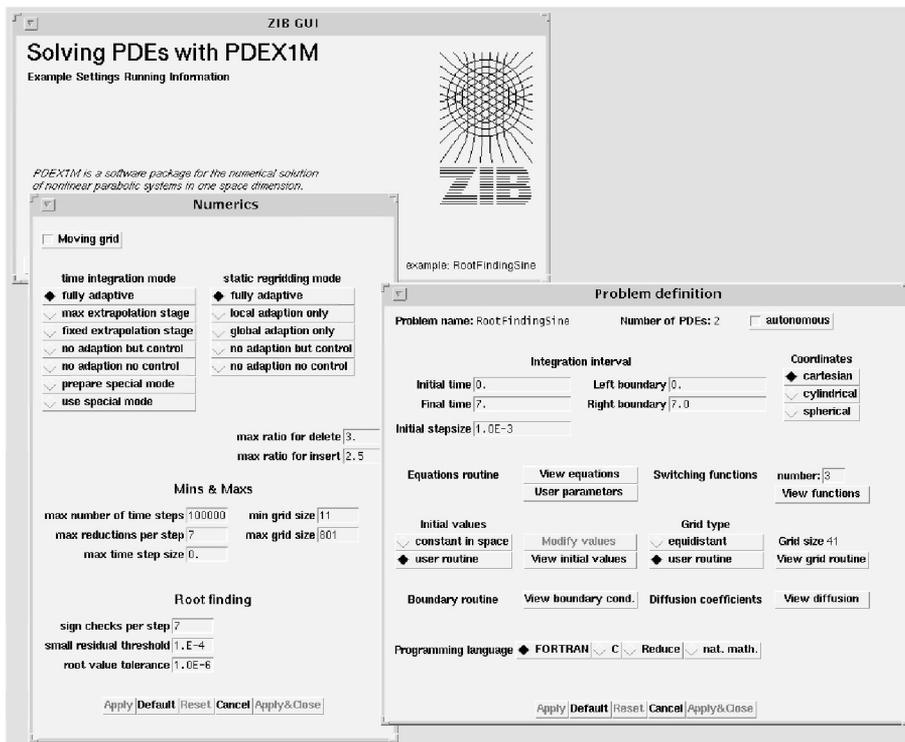
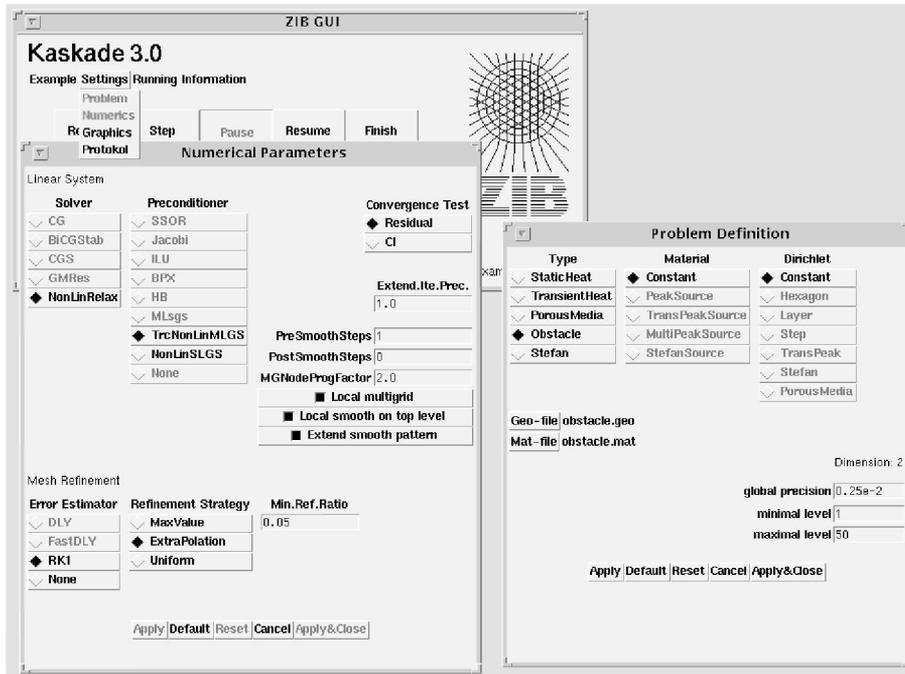
Weiterhin wird der Benutzer bei der Lösung eigener Probleme unterstützt, indem ihm entsprechende Programmsegmente zum Editieren angeboten werden. Die entsprechende Einbindung in eine Anwendung wird dann automatisch geleistet.

Für die folgenden CodeLib Produkte wurden Oberflächen entwickelt und auf der CeBit in Hannover in einer β -Version vorgestellt: KASKADE 3.0, NLEQ1, EULSIM, PDEX1M 1.0 und MEXX.

Beim Design der Oberfläche wurde auf eine einheitliche Darstellung inhaltlich ähnlicher Funktionen Wert gelegt. Ziel der Entwicklung ist es, komplexe numerische Algorithmen leicht kennenzulernen und bedienbar zu machen, eine allgemeine Problemlösungsumgebung sollte nicht geschaffen werden.

Implementierung. Eine Bibliothek von Tcl/Tk-Prozeduren stellt die Elemente unseres GUI-Baukastens zur Verfügung. Der Ersteller einer graphischen Benutzeroberfläche initialisiert die Elemente, die dann ein einheitliches Erscheinungsbild (“look and feel”) realisieren. Bei der Implementierung dieser Bibliothek wurde besonderer Wert auf das konsistente Zusammenspiel der Bedienelemente gelegt.

Den Anwenderprogrammen steht ein Satz Unterprogramme (C, Fortran, Tcl) zur Verfügung, mit denen auf einen Parametersatz zugegriffen werden kann. Ein entsprechendes API (application programming interface) für die Kommunikation zwischen GUI und Anwendung ist in der Entwicklung. Dazu gehört auf der GUI-Seite das automatische Aufsammeln von Resultaten der Anwendung und deren graphische Aufbereitung.



Setzen von Optionen für KASKADE bzw. PDEXIM

Entwicklung informationstechnischer Werkzeuge für die Museumsdokumentation

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

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

Förderung: Das Projekt wird von der Robert-Bosch-Stiftung gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Zwischen dem ZIB und dem Institut für Museumskunde der Staatlichen Museen zu Berlin – Stiftung Preußischer Kulturbesitz (kurz: IfM) besteht bereits seit 1981 ein mehrfach verlängerter Kooperationsvertrag, welcher in der augenblicklichen Fassung bis Ende 1997 läuft. Während dieser langfristigen Zusammenarbeit wurden verschiedene Projekte zum Einsatz der EDV im Museumsbereich (besonders in den Bereichen der Inventarisierung und der Dokumentation) durchgeführt. Dank einer Ende 1994 bewilligten Förderung durch die Robert-Bosch-Stiftung konnte eine weitere Personalstelle für das Projekt bis Anfang 1997 verlängert werden. Als Basissoftware wird für sämtliche Projekte das in der ursprünglichen Version von der britischen Museum Documentation Association (MDA) entwickelte Programmsystem GOS benutzt. Das Datenbanksystem GOS wurde von der MDA speziell zur Unterstützung der Inventarisierung und Dokumentation in Museen entwickelt. Es bietet Datenstrukturen und Verarbeitungsmoduln an, die den komplexen Informationsstrukturen in diesem Bereich besonders angepaßt sind. Außerdem ist GOS sehr modular aufgebaut und dadurch leicht erweiterbar. Seit 1981 wird GOS vom ZIB kontinuierlich weiterentwickelt, wobei ein identischer Leistungsumfang und eine weitgehend einheitliche Bedieneroberfläche auf den verschiedenen Hardware-Plattformen und unterschiedlichen Betriebssystemen (MS-DOS, OS/2, verschiedene UNIX-Systeme) besonders wichtig ist. 1995 lag das Hauptgewicht bei der Weiterentwicklung von GOS in verbesserten Zugangsmöglichkeiten zu vorhandenen Daten. Durch einfach zu bedienende Menüs können auch komplexe Retrievalanfragen formuliert werden und die selektierten Daten nach verschiedensten Kriterien sortiert und ausgegeben werden. Ebenfalls 1995 wurden einfache Möglichkeiten zur Wiedergabe von Bildinformationen in eine Inventardatenbank in das Programmsystem integriert. Diese erlauben die Darstellung von digitalisierten Bildern sowohl am Bildschirm als auch bei verschiedenen Ausgabeprodukten (insbesondere Karteikarten). Weiterhin wurde 1995 ein „Internet-Anschluß“ für GOS-Datenbanken programmiert. Dadurch können Benutzer mit einem normalen WWW-Browser ohne genaue Vorkenntnisse der internen Datenbankstruktur über das Internet Anfragen an eine dafür vorgesehene Datenbank stellen. Die von GOS generierten Antwortseiten enthalten neben den Textinformationen aus der Datenbank auch entsprechend vorbereitete Bilder. Eine Testversion dieser Anwendung ist am Deutschen Historischen Museum in Betrieb.

2.2.7 Wissenschaftliche Visualisierung

Visualisierung von Vektorfeldern

Bearbeiter: D. Stalling, H. Battke, H.C. Hege

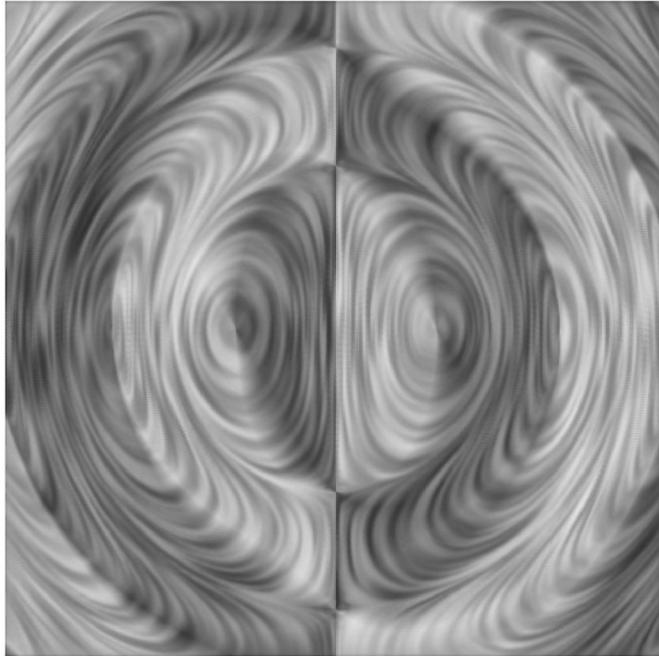
Beschreibung der Forschungsarbeit: Herkömmliche Verfahren zur Visualisierung von Vektorfeldern, beispielsweise symbolische Darstellungen mit Vektorpfeilen oder Partikelanimationen, vermitteln oft nur einen ungenügenden Eindruck von der Struktur eines Vektorfeldes. So können topologische Aspekte, Singularitäten oder Unstetigkeiten leicht übersehen werden, wenn Vektorpfeile oder Startpunkte der Partikel nicht richtig positioniert sind. Stark veränderliche oder turbulente Felder sind in symbolischen Darstellungen meist gänzlich unverständlich. *Volume-Rendering*-basierte Verfahren zur Darstellung dreidimensionaler Felder vermitteln zwar eine gute globale Übersicht, lassen aber Details im Volumeninneren kaum erkennen.

In jüngerer Zeit beginnen sich textur-basierte Verfahren als Alternative zu etablieren. Sie gestatten die Darstellung des Feldes in sehr feiner räumlicher Auflösung, waren bisher jedoch auf zweidimensionale Felder bzw. zweidimensional parametrisierbare Flächen in 3D beschränkt. Ein weiterer Nachteil für die sogenannte Linienintegralfaltungsmethode bestand in dem hohen rechnerischen Aufwand. Speziell für diese Verfahren wurden die Arbeiten aus dem Vorjahr fortgesetzt und eine Reihe weiterer algorithmischer und numerischer Verbesserungen entwickelt. Diese Forschungsarbeiten wurden auf der Siggraph-Konferenz für Computergrafik 1995 vorgestellt. Die Software wurde mittlerweile an mehrere akademische und einen kommerziellen Interessenten weitergegeben.

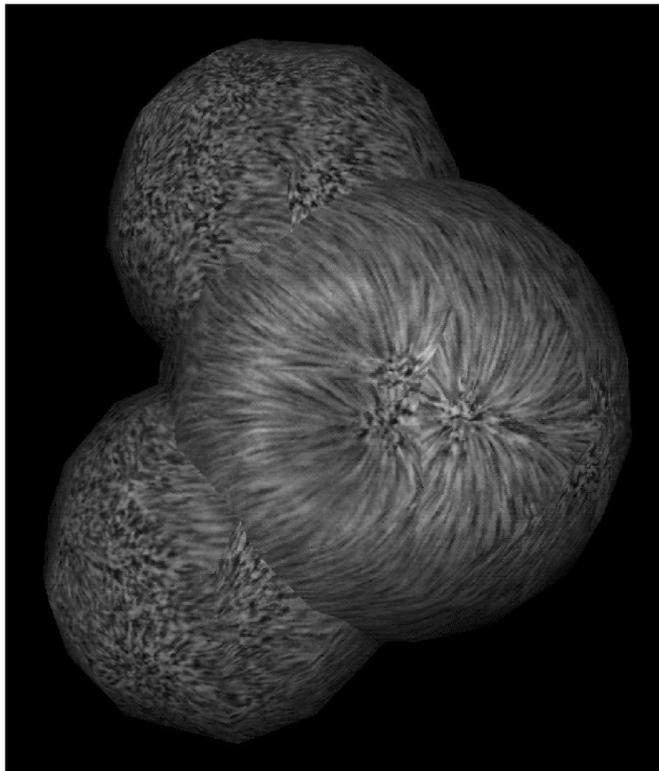
Im Rahmen einer Diplomarbeit wurden Erweiterungen der Linienintegralfaltung untersucht. Insbesondere wurde ein Verfahren implementiert, mit dem Vektorfelder auf beliebigen Flächen und Projektionen 3-dimensionaler Felder auf Flächen verzerrungsfrei dargestellt werden können. Zusammen mit verschiedenen Möglichkeiten der Flächen- bzw. Texturanimation eröffnet dies eine Fülle weiterer Anwendungsgebiete. Als Alternative zur Linienintegralfaltung wird gegenwärtig ein weiteres Verfahren, die sogenannte iterative Faltung untersucht. Die nachfolgenden Abbildungen zeigen Anwendungen der genannten Methoden.

Literatur

1. D. Stalling, H.C. Hege, *Fast and Resolution Independent Line Integral Convolution*. Proceedings of SIGGRAPH '95, (Los Angeles, CA, Aug., 1995), in *Computer Graphics Annual Conference Series*, ACM SIGGRAPH, 249-256 (1995)



Strahlungsfeld eines Hertzschen Dipols (in der Nahfeldnäherung).



Elektrostatistisches Feld auf der Oberfläche eines Wassermoleküls.

Volume Rendering

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

Kooperation: K.D. Tönnies (TU Berlin), C. Polze (HU Berlin)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Rahmen von Diplomarbeiten entstanden wesentliche Komponenten eines parallelen Volume Renderers sowie ein Programmpaket, das verschiedene Methoden zum Volume Rendering auf hierarchisch strukturierten, irregulären Tetraedergittern anbietet.

Beim Volume-Rendern werden 3D-Skalarfelder durch semitransparente, farbige Wolkengebilde dargestellt. Eine Vielzahl von Visualisierungsparametern muß geeignet gewählt werden, um aussagekräftige Darstellungen zu erhalten und den Datensatz visuell erfassbar zu machen. Daher wurde schwerpunktmäßig nach Möglichkeiten zur Vereinfachung der Parametrisierung gesucht sowie verschiedene Bildsyntheverfahren auf ihren numerischen und visuellen Fehler hin analysiert. Im Rahmen einer Diplomarbeit wurde das Programmsystem *VoRANG*¹ als Testbed für die flexible Evaluierung verschiedener Berechnungsmethoden entwickelt. Es bietet einfach erweiterbare, objekt-orientierte Programmierschnittstellen für (a) Datendefinition und -rekonstruktion, (b) Abbildung der Daten auf Farb- und Dichtewerte und (c) Approximationsmethoden für die Integration der Lichtbeiträge.

Zur schnellen Bildberechnung wurde im Rahmen der zweiten Diplomarbeit ein Parallelisierungskonzept entwickelt, das durch gezielte Ausnutzung der Hardwareeigenschaften des Parallelrechners Cray T3D die Grundlage für einen leistungsfähigen parallelen Volume Renderer bilden soll. Das Konzept basiert auf einem Projektionsverfahren, bei dem die Arbeit nicht, wie bei diesen Ansätzen üblich, über dem Objekt-, sondern über dem Bildraum aufgeteilt wird. Damit läßt sich ein synchronisiertes Zusammenfügen von Teilergebnissen vermeiden. Der im Vergleich zu einer Objektraumaufteilung entstehende Kommunikationsaufwand soll durch effiziente Ausnutzung Cray-T3D-spezifischer Hardware aufgefangen werden. Die Datenstrukturen und Algorithmen für die Parallelisierung wurden unter Ausnutzung des CRAFT-Programmiersmodells implementiert. Für einen vorgegebenen Datensatz und eine gewünschte Bildgröße werden die benötigten verteilten Datenstrukturen dynamisch erzeugt. Das zugrundeliegende Verteilungsschema sorgt dabei mit minimalem Synchronisationsaufwand für eine dynamisches *load balancing*. Die parallelen Komponenten zur eigentlichen Bildberechnung wurden objekt-orientiert gestaltet und in C++ implementiert.

¹ *Volume Rendering Auf Nichtregulären Gittern*

Isoflächengenerierung aus Volumendaten

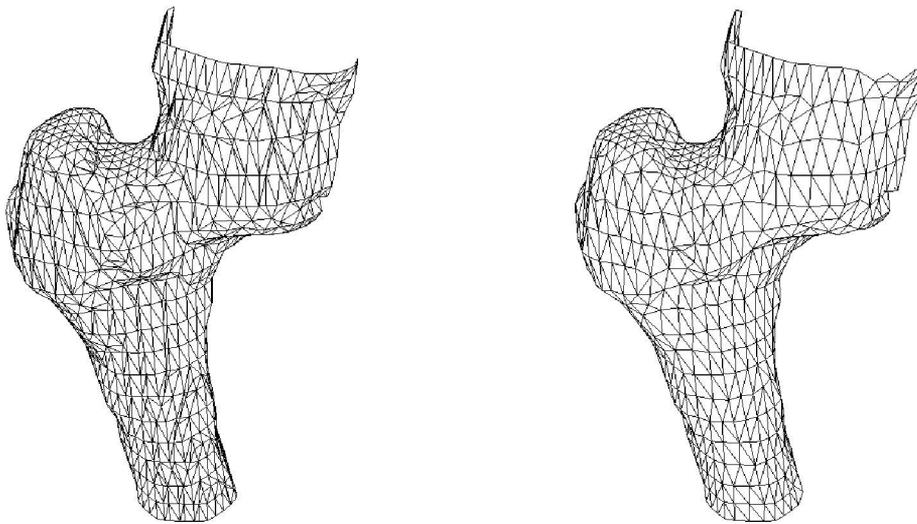
Bearbeiter: T. Anders, D. Stalling

Beschreibung der Forschungsarbeit: Eine der populärsten Methoden zur Visualisierung von 3D-Skalarfeldern ist die grafische Darstellung von Isoflächen. Zur schnellen Darstellung unter Nutzung moderner Grafikhardware ist es günstig, die Isoflächen polygonal zu approximieren. Die Standardmethode zur Berechnung derartiger Isoflächen ist der *Marching Cubes*-Algorithmus (Lorensen und Cline, 1987). Für große Datensätze erzeugt dieses Verfahren jedoch eine so hohe Anzahl von Dreiecken, daß die Isoflächen auch auf leistungsfähigen Grafikworkstations interaktiv kaum noch bewegt werden können. Darüberhinaus produziert der Algorithmus u. U. topologische Fehler (Löcher in Isoflächen, auch wenn das zugrundeliegende Skalarfeld stetig ist), was ihn für topologisch sensible Anwendungen, etwa die medizinische Diagnostik, unbrauchbar macht. Heute werden meist verbesserte Varianten dieses Algorithmus eingesetzt, die topologische Fehler vermeiden.

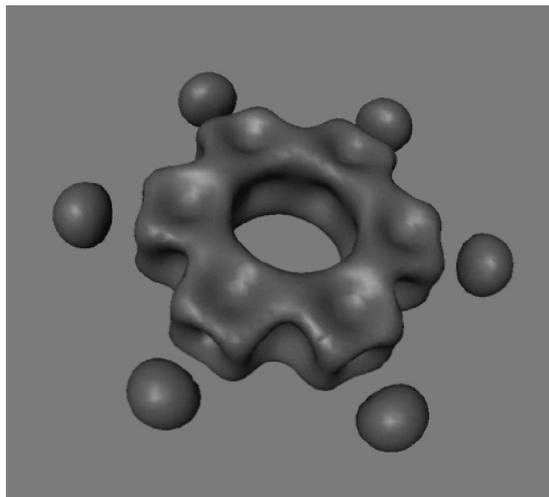
Klassische Verfahren zur Polygonreduzierung, angewendet auf die Ergebnisse herkömmlicher Isoflächenalgorithmen, haben den Nachteil, daß keine direkten Informationen über das zugrundeliegende Skalarfeld mehr einfließen und die Approximation der kontinuierlichen Isoflächen sich dadurch deutlich verschlechtern kann. Informationen für die Polygonreduzierung sollten daher gleich bei der Berechnung der Fläche gewonnen werden. Dies leistet der *Compact Cubes*-Algorithmus (Moore und Warren, 1990/91), der die Gesamtanzahl um der Dreiecke um ca. 40–60% reduziert und darüberhinaus degenerierte Dreiecke vermeidet.

Der Laufzeitzuwachs von nur ca. 10% wird allein durch die deutlich verminderte Zeit zum Rendern der Isofläche aufgewogen. Der Algorithmus ist insbesondere für medizinische Voxeldaten geeignet und wurde deshalb in das Planungssystem *HyperPlan* integriert.

Eine Real-Time-Darstellung fein aufgelöster, zeitlich veränderlicher Skalarfelder, etwa um in eine laufende Simulation interaktiv eingreifen zu können, ist mit den beschriebenen Verfahren auf Workstations nicht zu bewältigen. Es wurde deshalb ein paralleler Isoflächengenerator für den Parallelrechner CRAY T3D entworfen, der die Volumendaten zerlegt, auf die einzelnen Prozessoren verteilt und für den jeweiligen Ausschnitt des Skalarfeldes unter Berücksichtigung der Randbedingungen den entsprechenden Teil der Isofläche berechnet. Zur grafischen Darstellung sind dann nur die Isoflächendaten, ein Bruchteil der umfangreichen Originaldaten, zur Grafikworkstation zu übertragen und dort zu rendern.



Vergleich von Resultaten des *Marching-Cubes*- (links) und *Compact-Cubes*-Algorithmus (rechts) am Beispiel medizinischer CT-Daten.



Isofläche des elektrostatischen Potentials in einem Benzol-Molekül.

Echtzeit Temperaturüberwachung im Brandingenieurwesen mit Scattered Data Interpolation

Bearbeiter: G.W. Zumbusch, O. Paetsch

Kooperation: M. Korzeń, R. Schriever, K.-U. Ziener (Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Lab. VII.23, Berlin)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Projekt ist eine Fortsetzung der Arbeiten aus dem Vorjahr zum Thema Thermo-elastische Bauteilsimulation im Brandingenieurwesen.

Im Rahmen der Kooperation mit der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) werden Methoden zur Untersuchungen für das Tragverhalten brandbeanspruchter Stahlstrukturen entwickelt. Entsprechende Experimente werden im Laboratorium *Brandingenieurwesen* der BAM durchgeführt.

Ein Teilaspekt bei den Untersuchungen ist die Darstellung der Meßwerte während und nach einem Experiment. In einem Versuch werden Temperaturen an verschiedenen Meßpunkten am Bauteil und im Brandraum sowie Kräfte und Verschiebungen aufgezeichnet. Wir betrachten im weiteren nur die Temperaturdaten auf dem Bauteil. Die Werte werden mit einer Frequenz von 0.1 Hz aufgezeichnet, häufig über eine Versuchsdauer von 30 bis 90 Minuten. Die Daten müssen während des Versuchs überwacht werden, um den Prozeß zu steuern. Anschliessend werden sie zur Versuchsauswertung verwendet. In beiden Fällen ist es nötig, aus großen Datenmengen schnell die entscheidenden Information zu filtern.

Die Temperaturmessung auf dem Bauteil wird mit Thermoelementen realisiert, die sehr unterschiedlich verteilt angebracht sein können. Um eine kontinuierliche Temperaturverteilung zu generieren, verwenden wir Methoden der scattered data interpolation. Das kontinuierliche Feld wird dann mit Standard-Grafikpaketen, hier: *Explorer*, dargestellt. Wir verwenden radiale Basisfunktionen zur Interpolation. Mit jedem Meßpunkt auf dem Bauteil wird eine solche rotationssymmetrische, positive und schnell abklingende Basisfunktion verknüpft. Die Summe dieser Funktionen ergibt dann das Temperaturfeld. Wir verwenden eine rationale einparametrische Familie von radialen Basisfunktionen mit globalem Träger. Mit dem Parameter, der als Länge interpretiert werden kann, kann die Glattheit der Interpolation beeinflusst werden.

Digitales Schnittstudio

Bearbeiter: J.C. Bachmann, M. Zöckler

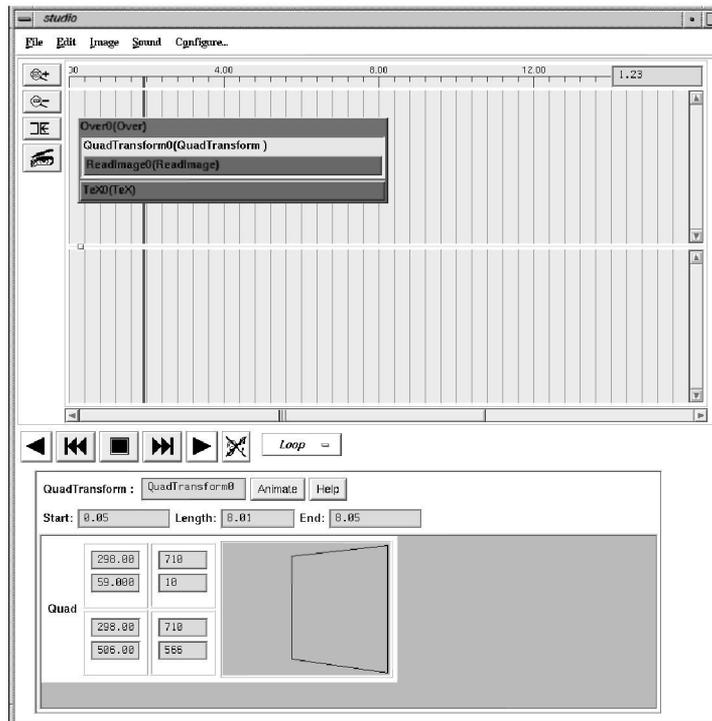
Förderung: Das Projekt wurde durch das BMBF und den DFN-Verein gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das digitale Schnittstudio ist ein erweiterbares System zur interaktiven Bearbeitung und Erzeugung von Videofilmen aus digitalem Bild- und Tonmaterial. Es besteht im wesentlichen aus den folgenden Komponenten:

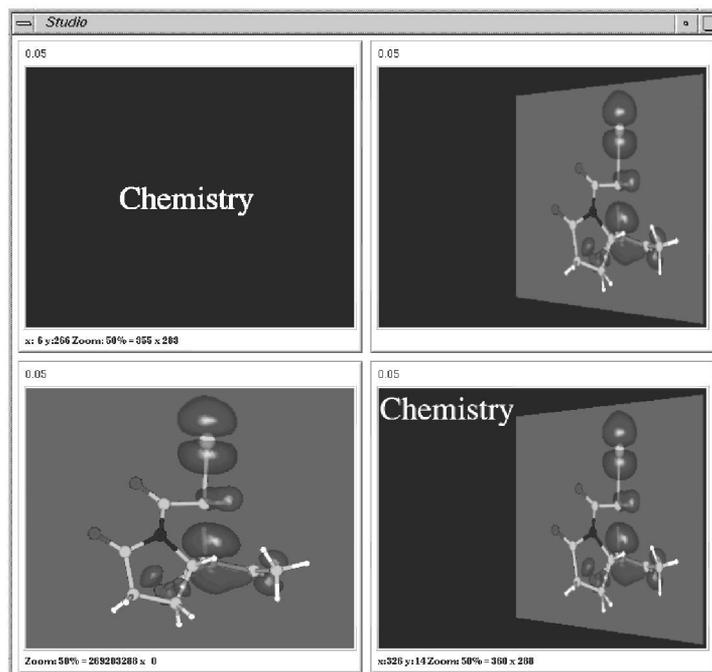
- **Editor:** Der Filmeditor erlaubt nicht-lineares Schneiden einzelner Bildsequenzen sowie die Verfremdung des Bild- und Tonmaterials durch die Anwendung von Effekten auf Filmsequenzen. Mit Hilfe des Editors wird die Struktur des Films festgelegt. Diese Struktur ist ein Baum, dessen Wurzel in den endgültigen Film mündet. Jeder Knoten des Baums repräsentiert eine Filmsequenz bestehend aus einer beliebigen Anzahl von eingehenden Filmsequenzen und einem Effekt, der die Filmsequenzen manipuliert. Die Anzahl der Ebenen des Baums ist unbeschränkt. Zur Unterstützung von bildgenauem Schnitt der Sequenzen existiert eine *timeline*, die einen absoluten Zeitrahmen für den Film darstellt.
- **Viewer:** Zur Betrachtung der mit Hilfe des Editors erzeugten Filme, Einzelbilder und Audioströme existieren entsprechende Viewer, die einen Eindruck des erzeugten Films geben. In der Regel wird die Auflösung der interaktiv erzeugten Filme aus Gründen der Effizienz geringer sein als die endgültige evtl. im Batchbetrieb erzeugte Version.
- **Effekte:** Das Schnittstudio erhält seine Funktionalität durch die Anwendung von Effekten auf Bildsequenzen und ist so konzipiert, daß jederzeit durch Benutzer neue Effekte hinzugefügt werden können. Jeder Effekt kann Parameter enthalten, die durch den Benutzer variiert werden können. Die Parameter können zeitabhängig sein und sind mit Hilfe eines Editors linear, durch Splines, oder durch eine fast beliebige, als Formel angebbare Funktion, animierbar.

Das System unterstützt die gängigen Bild- und Audioformate als Input und Output. Es ist, sofern mehrere Arbeitsplatzrechner in einem Rechnerverbund vorhanden sind, als parallele verteilte Anwendung konfigurierbar.

Die folgenden Bilder zeigen eine typische Anwendungssituation.



Benutzeroberfläche des Schnittstudios



Viewer; rechts unten das Resultat nach der Anwendung von Effekten.

2.2.8 Medizinische Therapieplanung

Generierung von Tetraedergittern für die Hyperthermie-Planung

Bearbeiter: M. Seebass, D. Stalling, H.-C. Hege, P. Deuffhard

Kooperation: J. Nadobny, P. Wust, R. Felix (Virchow-Klinikum, HU Berlin)

Förderung: Das Projekt wurde durch die DFG (Sfb 273) gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Es wurde ein *3D-Advancing Front*-Verfahren für die Generierung von Tetraedergittern entwickelt. Voraussetzung für die Anwendung dieses Verfahrens ist, daß die Oberfläche des Gebietes, das in Tetraeder zerlegt werden soll, in triangulierter Form vorliegt. Zu Beginn ist die Advancing Front identisch mit dieser Oberfläche. Im folgenden wird jeweils ein Dreieck der Advancing Front ausgewählt und zu diesem ein vierter Punkt gesucht, der ein Tetraeder ergibt, das einem gleichseitigen Tetraeder möglichst nahekommt.

Unser Ansatz folgt im wesentlichen [1]; es wird aber eine andere Strategie zur Auswahl des vierten Punkts verfolgt, bei der deutlich weniger mögliche Tetraeder getestet werden müssen. Beim Advancing Front-Verfahren kann es vorkommen, daß am Ende kleine Teilvolumina übrigbleiben, die nicht mehr mit Tetraedern gefüllt werden können (andernfalls würden sehr verzerrte Tetraeder entstehen). Zum Füllen dieser Teilgebiete wird eine zweite Strategie angewendet: Das Gebiet wird so lange vergrößert (d.h. es werden Tetraeder wieder entfernt), bis es sternförmig ist, und dann mit Tetraedern ausgefüllt.

Die Rechenzeit für das Advancing Front-Verfahren wächst mit der Tetraederzahl wie $N \log N$; für Tetraederzahlen, wie sie in den Hyperthermie-Patientenmodellen vorkommen, werden auf einer Workstation (SUN Sparc20) ca. 100 Tetraeder pro Sekunde erzeugt. Das 3D-Advancing-Front-Verfahren bietet gegenüber dem bisher verwendeten Verfahren zur Tetraedergenerierung folgende Vorteile:

- Es können für beliebige dreidimensionale Strukturen Gitter erzeugt werden, z.B. auch für die Umgebung von Patient und Hyperthermie-Applikator (siehe Abbildung). Dies ist eine Vorbedingung dafür, die Antennenfelder mit der Finite Elemente-Methode zu berechnen.
- Die Gittergenerierung wird erheblich beschleunigt (siehe Tabelle). Bisher mußte die Tetraedergenerierung durch häufige interaktive Eingaben gesteuert werden und war der zeitaufwendigste Teil der Erzeugung eines Patientenmodells.

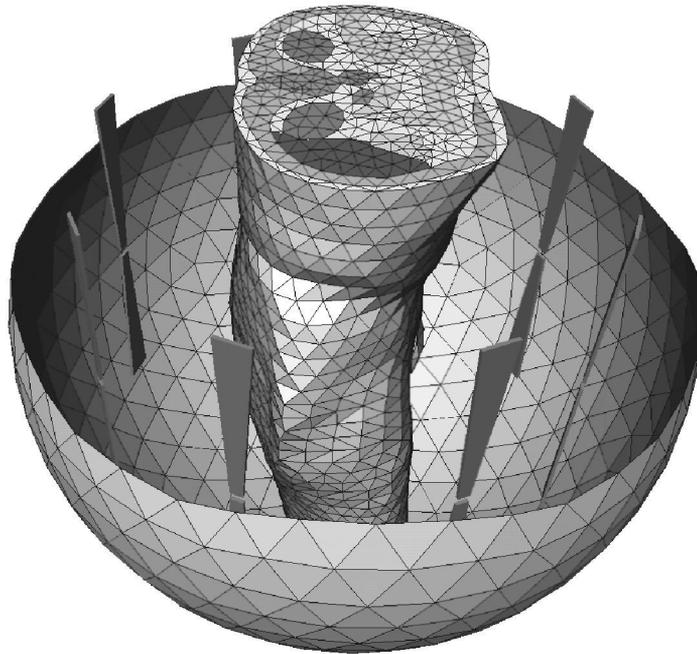


Abbildung: Beispiel für ein Objekt, zu dem ein Tetraedergitter generiert wurde. Umgebung eines Patientenmodells, begrenzt durch eine Kugel. Die 8 Antennen des Hyperthermie-Applikators sind in das Gitter integriert. Auf der oberen Grenzfläche des Patientenmodells sind verschiedene Gewebe-Kompartimente zu erkennen (Nieren, Leber, Knochen-, Fett- und Muskelgewebe).

	bisheriges Verfahren	neues Verfahren
Generierung von 2D-Gittern für CT-Schichten	automatisch 1 Minute	entfällt
Triangulierung der Oberflächen der Gewebekompartimente	interaktiv gesteuert 1 – 2 Stunden	interaktiv gesteuert 1 – 2 Stunden
Tetraedergenerierung	interaktiv gesteuert 1 – 2 Tage	automatisch 5 Minuten

Tabelle: Zeitaufwand für die Generierung eines Patientenmodells (30 000–40 000 Tetraeder) auf der Grundlage von segmentierten CT-Schnittbildern. Für die automatisch ablaufenden Programme sind CPU-Zeiten auf SUN Sparc20 angegeben.

Literatur

1. H. Jin, R. Tanner: *Generation of Unstructured Tetrahedral Meshes by Advancing Front Technique*. Int. J. Numer. Meth. Eng. **36** 1805–1823 (1993)

Feldberechnung und Applikatormodellierung mit der VSIE- und der FDTD-Methode für die Hyperthermie

Bearbeiter: J. Nadobny, M. Seebaß, P. Deuffhard

Kooperation: P. Wust, R. Felix (Virchow-Klinikum, HU Berlin), G. Mönich (Institut für Hochfrequenztechnik, TU Berlin), D. Sullivan (University of Idaho, USA)

Förderung: Das Projekt wurde durch die DFG (Sfb 273) gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Berichtszeitraum wurden die VSIE- (Volume Surface Integral Equation) und die FDTD- (Finite Difference Time Domain) Methode weiterentwickelt im Hinblick auf ihren Einsatz bei Feldberechnungen in realistischen Patientenmodellen und bei der Applikatormodellierung. Ein besonderes Augenmerk galt der Ermöglichung direkter Ergebnisvergleiche zwischen den beiden Verfahren. Hierzu gab es zwei Forschungsschwerpunkte:

1. Weiterentwicklung der VSIE Methode — Fußpunktmodellierung der Antennen
2. Weiterentwicklung der FDTD Methode — Behandlung der Grenzflächen

Bisher wurde bei der VSIE-Methode eine eingeprägte Stromverteilung entlang der Antennen vorgegeben. Ein besseres Antennenmodell wurde über die Vorgabe einer Generatorspannung am Fußpunkt der Antenne realisiert. Dabei muß die Stromverteilung auf den Antennen als Teil der Gesamtlösung mitbestimmt werden. Diese Fußpunktmodellierung ermöglicht erst die Bestimmung von Parametern, wie z.B. die Antennenimpedanz, die für den Vergleich der Methoden untereinander und mit der Meßtechnik unabdingbar sind.

Das FDTD Verfahren benutzt reguläre kubische Gitter. Die VSIE-Methode ist auf der Basis der Tetraederelemente implementiert. Um einen Vergleich der beiden Verfahren zu ermöglichen, wurde ein durch ein Tetraedergitter definiertes Patientenmodell zugrundegelegt. Dabei wurde die FDTD-Formulierung so umgewandelt, daß nicht E- und H-Felder, sondern elektrische und magnetische Flüsse berechnet wurden. Dadurch konnten auch Grenzflächen berücksichtigt werden, die nicht mit der Geometrie der Kuben übereinstimmten. Anschließend wurden aus den Flußwerten die E- und H-Feldwerte durch eine Interpolation unter Erfüllung der Grenzflächenbedingungen gewonnen. Die Vergleiche VSIE/FDTD auf Tetraedergittern zeigten eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse (sowohl für Patienten-Gitter – vorgestellt von J. Nadobny auf dem Kongreß PIERS '95 (Progress in Electromagnetics Research Symposium, 24–28 July, 1995 Seattle, USA) als auch für Vergleiche im Rahmen eines EU-Projektes COST244 (European Cooperation in the field of Science and Technical Research, Project 244: Biomedical Effects of Electromagnetic Fields), an dem sich unsere Arbeitsgruppe mit dem VSIE- und mit dem FDTD-Code beteiligte.

Temperaturberechnung und Optimierung für die Hyperthermie

Bearbeiter: M. Seebass, R. Beck, B. Erdmann, P. Deuffhard

Kooperation: J. Nadobny, P. Wust, R. Felix (Virchow-Klinikum, HU Berlin), T. Köhler, P. Maaß (Fachbereich Mathematik, Universität Potsdam)

Förderung: Das Projekt wurde gefördert durch die DFG (Sfb 273).

Beschreibung der Forschungsarbeit: Die Hyperthermie-Behandlung in der Krebstherapie erfordert eine sorgfältig angepasste Temperaturverteilung im Körper eines Patienten. Hierbei soll im Idealfall nur das Tumorgewebe auf eine Temperatur zwischen 42 und 43°C erwärmt werden. Als Wärmequelle dienen Radiowellen eines Antennensystems, des sogenannten Hyperthermie-Applikators. Die entwickelten Verfahren sollen es ermöglichen, eine optimale Ansteuerung der Antennen nach Amplituden und Phasen zu finden.

Die Temperaturberechnung erfolgt mittels adaptiver Finite-Elemente-Methoden auf unstrukturierten Tetraedergittern. Dies ermöglicht es dem Benutzer, die numerischen Simulationen mit einer vorgegeben maximalen Fehlerschranke für die Temperatur durchzuführen. Es kommen zwei Anwendungen in Betracht:

- (a) eine transiente Rechnung zur Simulation des zeitlichen Temperaturverlaufs, insbesondere in der Erwärmungsphase
- (b) stationäre Rechnungen für die möglichen Kombinationen der Felder aller Antennen, woraus sich mittels einer numerischen Optimierung (s.u.) die zweckmäßigste Einstellung von Amplituden und Phasen ergeben.

Im Fall (a) wird die am Konrad-Zuse-Zentrum entwickelte adaptive Rothe-Methode verwendet [1]. Hier wird neben der Raum- auch die Zeit-Diskretisierung lokal adaptiert.

Im Fall (b) ergeben sich für n Antennen n^2 mögliche unabhängige Feldkombinationen. Die numerisch effiziente Behandlung dieser Probleme ist daher von entscheidender Bedeutung. Hier ist geplant, die Temperaturberechnung auf den verschiedenen Verfeinerungsstufen mit dem Optimierungsverfahren für die Antennenphasen und -amplituden zu koppeln.

Das Optimierungsverfahren selbst beruht auf einem in [2] beschriebenen Ansatz und wurde im Berichtszeitraum weiterentwickelt.

Die Zielfunktion der Optimierung ergibt sich aus den Anforderungen, daß die Temperatur im Tumor bei ca. 42 - 43°C liegen soll und keine größeren Bereiche des gesunden Gewebes auf mehr als 42°C erwärmt werden sollen. Zusätzlich wird für das gesunde Gewebe eine Maximaltemperatur definiert, die nicht überschritten werden darf. Dies bedeutet eine zusätzliche Nebenbedingung für das Optimierungs-Problem. Sie wird durch einen Penalty-Term berücksichtigt.

Die Weiterentwicklungen gegenüber [2] bestehen in folgenden Punkten:
 Das gesunde Gewebe trägt außer dem Penalty-Term noch einen weiteren Term zur Zielfunktion bei. Dadurch wird das gesunde Gewebe wesentlich besser geschont. In [2] beruht die Optimierung auf zweidimensionalen Feld- und Temperaturberechnungen. Die Zielfunktion wird nur an wenigen Punkten ausgewertet. In unserem Fall gehen in die Zielfunktion die Temperaturen an sämtlichen Knoten des 3D-Gitters ein. Es zeigt sich jedoch, daß nur in 5 - 10% der Knoten des gesunden Gewebes 42°C überschritten werden, so daß nur sie einen Beitrag zur Zielfunktion liefern. Diese Tatsache wird ausgenutzt, um die Rechenzeit zu reduzieren.

Die Rechenzeit für die Optimierung beträgt beim Applikator Sigma60 (4 Amplituden und 4 Phasen) 11 bzw. 40 Sekunden (SUN Sparc20), wenn eine Temperaturberechnung auf dem Grobgitter (8 400 Knoten) oder einem verfeinerten Gitter (32 100 Knoten) zugrunde gelegt wird.

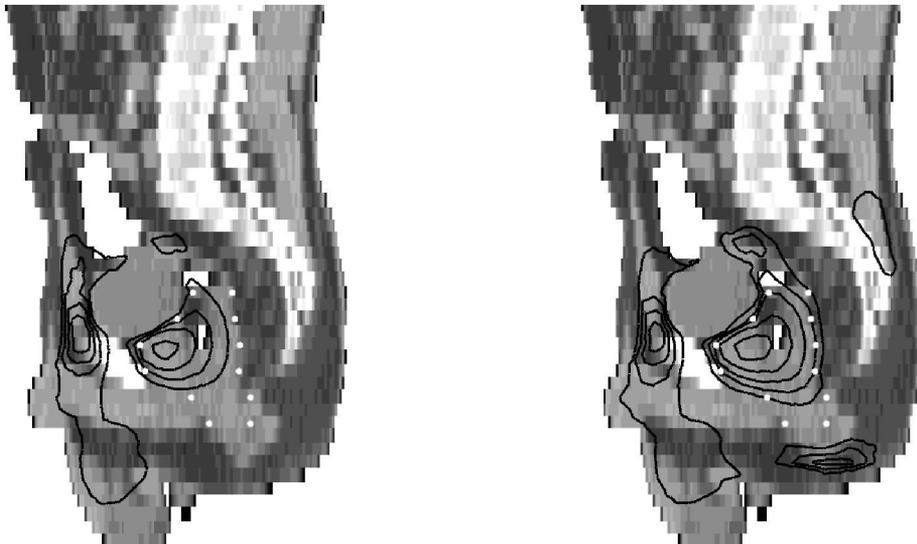


Abbildung: Temperaturverteilungen auf lokal verfeinertem Gitter im Längsschnitt eines Patienten (dargestellt durch Isothermen mit 1°C Abstand) bei synchroner (links) und optimierter (rechts) Ansteuerung der Antennen. Die Lage des Tumors ist durch weiße Punkte markiert. Die Temperatur, auf die 50% des Tumorumfanges erwärmt werden, erhöht sich von 40.5 auf 42.2°C .

Literatur

1. F. Bornemann: *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations III*. Impact of Comput. Sci. Engrg., vol. 4, 1992
2. K.S. Nikita, N.G. Maratos, N.K. Uzunoglu: *Optimal Steady-State Temperature Distribution for a Phased Array Hyperthermia System*. IEEE Biomedical Engineering, 1993, 1299-1306.

Medizinische Visualisierung

Bearbeiter: D. Stalling, O. Paetsch, H.C. Hege, P. Deuffhard

Kooperation: S. Wegner, H. Oswald (Deutsches Herzzentrum Berlin),
J. Gustedt, R. Möhring (Fachbereich Mathematik, TU Berlin)

Förderung: Der Sfb 273 “Hyperthermie: Methodik und Klinik” wurde durch die DFG gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Rahmen des Sonderforschungsbereichs “Hyperthermie: Methodik und Klinik” wurde die Entwicklung des Therapie-Planungssystems *HyperPlan* fortgeführt. Dieses Softwarepaket soll alle Arbeitsschritte die bei der Simulation von regionalen Radiofrequenz-Hyperthermiebehandlungen anfallen, durch moderne Methoden der Computergrafik, Bildverarbeitung und Numerik unterstützen. Zu den 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.

Die bereits implementierten Methoden zur Visualisierung der bei der Hyperthermie-Planung relevanten Daten (angefangen von tomografischen Schnittbildern bis hin zu berechneten Temperaturverteilungen) wurden um eine Reihe neuer Darstellungsverfahren ergänzt. Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeiten war die Integration der algorithmischen und numerischen Methoden zur Therapieplanung. Maxwell-Solver und Temperaturberechnung können nun aus *HyperPlan* heraus aufgerufen werden und mit Eingabedaten versorgt werden. Ferner wurde ein interaktiver Kontureditor entwickelt, in dem moderne Segmentierungstechniken realisiert sind. Dazu gehört beispielweise ein semi-automatisches Verfahren, das das Finden von Kanten mit Hilfe einer kürzesten Wege-Suche unterstützt. In Rahmen von Kooperationen wurden auch von anderen Gruppen entwickelte Segmentierungsverfahren getestet und implementiert.

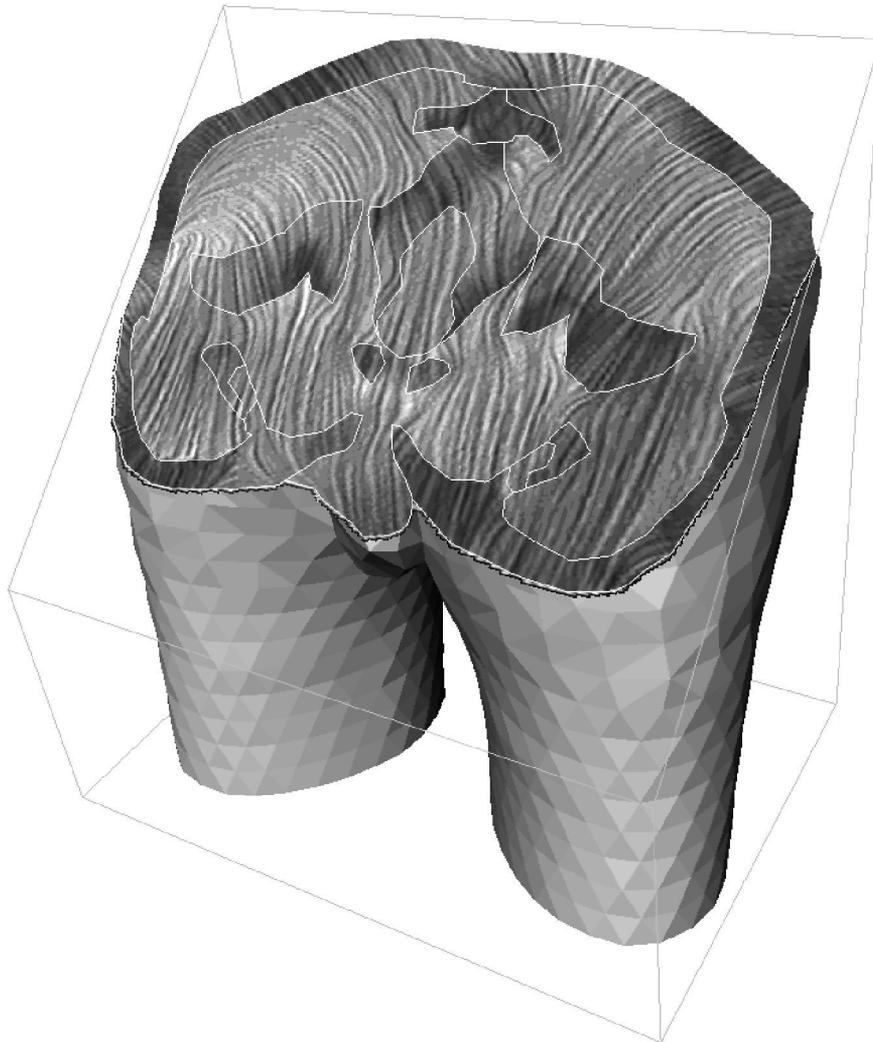
Einen wesentlichen Schritt stellte die Installation der Software in der Klinik dar. Die leistungsfähigen Grafik- und Interaktionsmöglichkeiten von *HyperPlan* haben bei den Medizinern ein positives Echo gefunden, was auch durch den aktiven Gebrauch des Programms belegt wird. Darüber hinaus wurde *HyperPlan* in Zusammenarbeit mit Medizininformatikern des Virchow-Klinikums für den Einsatz in der Strahlentherapie erweitert.

Literatur

1. D. Stalling, H.C. Hege, T. Höllerer: *Visualization and 3D-Interaction for*

Hyperthermia Treatment Planning, Proc. CAR '95 Computer Assisted Radiology, 9th International Symposium and Exhibition, Berlin, June 21–24, 1216–1222 (1995)

2. D. Stalling, H.C. Hege: *Design and Implementation of a Hyperthermia Planning System*, in: B. Arnolds, H. Müller, T. Tolxdorff, D. Saupe (eds), Proceedings zum Workshop “Digitale Bildverarbeitung in der Medizin”, März 1995, Freiburg/Breisgau, 11 p. (1995)



Schnitt durch ein Patientenmodell mit eingeblendeter Darstellung eines berechneten E-Feldes.

2.2.9 Computeralgebra

Weiterentwicklung von REDUCE

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

Kooperation: A.C. Hearn (Leitung des Projekts, RAND, Santa Monica, Californien, USA), S.L. Kameny † (RAND), 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 Präsentation des Systems im World Wide Web ist an vielen Serversystemen zugänglich. Die Information wird im wesentlichen an der Universität zu Köln, am ZIB und bei RAND Corp. gepflegt. An der Umstellung der gesamten Information auf HTML wird gearbeitet.

Der Schwerpunkt der Arbeit am System REDUCE war die Fertigstellung und Freigabe der Version 3.6 zum 15. Juli 1995. Die Vorgängerversion 3.5 datierte vom Oktober 1993.

Diese Version beinhaltet sehr viele neue Pakete zur Lösung komplexer Probleme mit Mitteln der Computer Algebra, die in den letzten Jahren (1993–1995) vor allem auch in der Gruppe Symbolik des ZIB fertiggestellt wurden und in den Einzelberichten der Wissenschaftler und der Produktliste dargestellt werden bzw. wurden.

Bedingt durch den Unfall des Leiters der Gruppe Symbolik hat sich die Auslieferung der Versionen für die verschiedenen Plattformen verzögert, sie konnte jedoch noch in 1995 im wesentlichen abgeschlossen werden.

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.

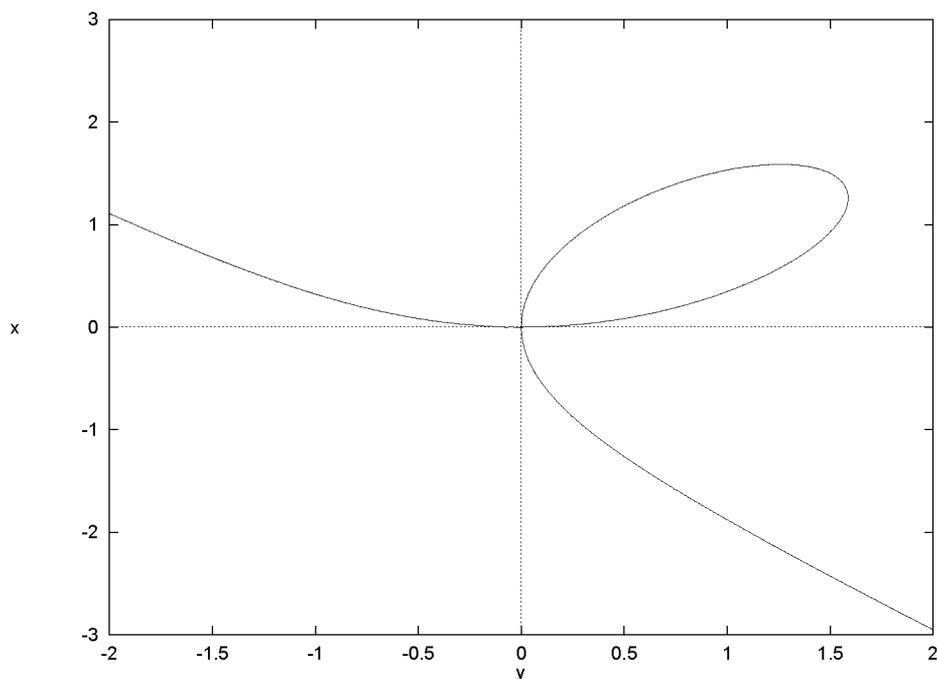
Im Jahre 1995 wurden auch weitere Versionen von REDUCE für massiv parallele

Rechner fast aller Hersteller fertiggestellt und vorgestellt, z.B. bei IMACS ACA in Albuquerque oder in Krakau bei Cyfronet. Mehrere Projekte zur Erforschung paralleler Algorithmen aus dem Bereich der Computer Algebra wurden begonnen. Im Rahmen des von der Europäischen Union geförderten Projekts "OpenMath" wurde an der Integration von REDUCE in dieses system- und plattformübergreifende Softwaremodell gearbeitet.

Aus der Weitergabe von REDUCE wurden im Berichtsjahr Umsätze von 91.700,- DM erzielt, davon allein im letzten Quartal mehr als 60.000,- DM. Einen nicht unerheblichen Anteil daran hat neben den Upgrades für die neue Version die auf Betreiben des ZIB eingerichtete Einstiegsversion, die bei einem Preis von 99 \$ (bzw. 79 \$ für Upgrades) auch Privatpersonen und Interessenten aus devisenschwachen Ländern einen Zugang ermöglicht.

Literatur

1. A.C. Hearn: REDUCE User's Manual, Version 3.6, July 1995, RAND Publication CP78 (Rev. 7/95), authorized reprint by ZIB Berlin



Algorithmische Methoden für spezielle Funktionen und orthogonale Polynome

Bearbeiter: W. Koepf, P. Deuffhard

Kooperation: D. Gruntz (ETH Zürich, Schweiz), 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.

In [2] wurde die algorithmische Bestimmung von Differentialgleichungen untersucht, die auch eine Grundlage zur Berechnung orthogonaler Polynome darstellen kann. Eine Maple-Implementierung wurde in [1] vorgestellt. Inwiefern sich Differentialgleichungen und Rekursionsgleichungen zur Darstellung transzendenter Funktionen eignen, wurde in [3] betrachtet. Dies wurde in [5] auf eine funktionentheoretische Fragestellung angewandt.

Verschiedene Algorithmen zur symbolischen wie auch numerischen Berechnung orthogonaler Polynome wurden in [4] auf ihre Effizienz hin untersucht, und es wurde ein besonders effizienter Zugang zur Berechnung von Chebyshev-Polynomen vorgestellt.

Diese Verfahren werden weiterentwickelt und in Computeralgebrasysteme integriert.

Literatur

1. D. Gruntz, W. Koepf: *Maple package on formal power series*. Maple Technical Newsletter 2 (2), 22–28 (1995)
2. W. Koepf: *Algorithmische Bestimmung von Differentialgleichungen*. ZAMM Sonderband zur GAMM-Jahrestagung 1994 in Braunschweig, ZAMM 75 S II, S533–S534 (1995)
3. W. Koepf: *Algebraische Darstellung transzendenter Funktionen*. Themen und Anwendungen der Computeralgebra, Computeralgebra-Rundbrief 16, Fachgruppe Computeralgebra der GI-DMV-GAMM, 12–18 (1995)
4. W. Koepf: *Efficient computation of orthogonal polynomials in computer algebra*. ZIB–Berlin, Preprint SC 95–42 (1995)
5. W. Koepf, D. Schmersau: *On the de Branges Theorem*. ZIB–Berlin, Preprint SC 95–10 (1995)

Algorithmische Summation unendlicher Reihen

Bearbeiter: W. Koepf, H. Böing, G. Stöling

Beschreibung der Forschungsarbeit: In den letzten Jahren wurde durch die Entwicklung algorithmischer Verfahren ein Durchbruch bei der Verifikation hypergeometrischer und insbesondere kombinatorischer Identitäten erzielt [1]. Wir haben Implementierungen der Algorithmen von Gosper (unbestimmte Summation), von Zeilberger (bestimmte Summation) sowie von Petkovšek (Lösung holonomer Rekursionsgleichungen durch hypergeometrische Terme) in Maple/REDUCE vorgenommen [2], mit denen sich diese Verifikationen vornehmen lassen.

Nach einer Methode von Wilf und Zeilberger sollen diese Techniken nun auf Mehrfachsummen/integrale übertragen werden. Hier treten enorme Komplexitätsprobleme auf, die es zu beheben gilt. Eine derartige Implementierung ist in Arbeit.

Literatur

1. W. Koepf: *Algebraische Darstellung transzendenter Funktionen*. Themen und Anwendungen der Computeralgebra, Computeralgebra-Rundbrief 16, Fachgruppe Computeralgebra der GI-DMV-GAMM, 12–18 (1995)
2. W. Koepf: *REDUCE package for indefinite and definite summation*. SIGSAM Bulletin 29, 14–30 (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. In Anwendungen treten zusätzlich Symmetrien durch natürliche geometrische Gegebenheiten auf.

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 Computeralgebra 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. Die Klassifikation von Normalformen basiert auf Gröbner Basen bzgl. induzierter gewichteter Ordnungen. Das algorithmische Vorgehen ist genau umgekehrt zu den sonst üblichen Handrechnungen, in dem mit dem Tangentialraum, der die Kodimension bestimmt, gestartet wird. Im Berichtszeitraum wurden neue Techniken zur Behandlung der Terme höherer Ordnung entwickelt, die die alten heuristischen Methoden ersetzen. Die Theorien wurden in REDUCE implementiert und wurden für einige Gruppen getestet. Die Resultate dieser Arbeit sind in einem Preprint 1995 [1] erschienen.

Literatur

1. K. Gatermann, R. Lauterbach: *Automatic classification of normal forms*. ZIB-Berlin, Preprint SC 95-3 (1995), eingereicht bei Nonlinear Analysis Theory, Methods and Applications.

Dünnbesetzte Gleichungssysteme

Bearbeiter: K. Gatermann

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

Beschreibung der Forschungsarbeit: Bei der Lösung von algebraischen Gleichungssystemen interessieren zwei Aspekte, die sich gegenseitig fast ausschließen. Einerseits möchte man die Lösungen numerisch approximieren, andererseits ist es in Anwendungen oft wichtig, alle Lösungen zu kennen. Für dünnbesetzte Polynome (in der Darstellung durch Monome treten nur wenige Monome auf) gibt es ein theoretisches Resultat 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. In 1994 wurde dieses Verfahren auf seine Eigenschaften bzgl. Symmetrie untersucht, was in der Arbeit [1] ausgeführt wurde. Dabei ist die Ausnutzung der Symmetrie sehr wichtig für die Effizienz des Verfahrens.

Die Modifikation des statischen Algorithmus in einen adaptiven Algorithmus ist der zweite wesentliche Beitrag zur Effizienz, der in [2] dargelegt wird. In dem adaptiven Aufbau der Unterteilung der Polytope werden die Monome nach und nach geliftet und die bereits vorhandene Unterteilung durch weitere Zellen ergänzt. Dieser neue Zugang für Tupel von Polytopen bringt ein vertieftes Verständnis vorhandener Methoden für Triangulierungen eines Polytops. Außerdem sind die Ergebnisse für die Eliminationstheorie im allgemeinen vielversprechend.

Mit dem neuen gemischt symbolisch-numerischen Verfahren wurden erfolgreich algebraische Gleichungen aus der Robotik und den Ingenieurwissenschaften gerechnet. Das Projekt konnte in dem Berichtszeitraum abgeschlossen werden.

Literatur

1. J. Verschelde, K. Gatermann: *Symmetric Newton Polytopes for Solving Sparse Polynomial Systems*. Adv. Appl. Math. 16, No. 1, 95–127 (1995)
2. J. Verschelde, K. Gatermann, R. Cools: *Mixed Volume Computation by Dynamic Lifting applied to Polynomial System Solving*. Katholieke Universiteit Leuven, Preprint TW 222 (1995). Erscheint in Journal of Discrete and Computational Geometry.

Anwenderprogramme in REDUCE

Bearbeiter: W. Koepf, H. Melenk, W. Neun, A. Bernig, L. Temme

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Berichtszeitraum wurden etliche REDUCE-Pakete implementiert, die im Zusammenhang mit Anwendungen stehen bzw. von REDUCE-Anwendern benötigt wurden.

Als diskretes Analogon der Laplace-Transformation wird die Z-Transformation vor allem in der Signalverarbeitung verwendet. Residuen spielen für die Berechnung der inversen Z-Transformation rationaler Funktionen eine entscheidende Rolle. Die vorgenommene REDUCE-Implementierung berechnet die Z-Transformierte sowie deren Inverse für viele Funktionen.

Durch eine geschickte Vereinfachung eines trigonometrischen Polynoms kann entschieden werden, ob es sich um das Nullpolynom handelt. Daher sind derartige Vereinfachungen für den Anwender wichtig. Bei der vorgenommenen REDUCE-Implementierung kann der Benutzer zwischen

- dem Expandieren und dem Zusammenfassen trigonometrischer Ausdrücke
- sowie der Darstellung durch trigonometrische, hyperbolische bzw. durch exponentielle Terme

auswählen. Ferner wird ein Faktorisierer trigonometrischer Polynome bereitgestellt.

Die entsprechenden REDUCE-Pakete wurden im Berichtszeitraum fertiggestellt und sind Teil der neuen REDUCE Version 3.6.

Literatur

1. W. Koepf (Ed.): *REDUCE packages on power series, Z-transformation, residues and trigonometric simplification*. ZIB-Berlin, TR 95-3 (1995)

Symmetrie Paket in Maple

Bearbeiter: K. Gatermann

Kooperation: F. Guyard (WIAS Berlin), P. Worfolk (Geometry Center, Minneapolis, USA)

Beschreibung der Forschungsarbeit: In der Analysis von äquivarianten dynamischen Systemen werden Phänomene untersucht, die wesentlich durch die Symmetrie bestimmt sind. Da Symmetrien durch Gruppen beschrieben werden, sind algebraische Methoden in diesem Zweig der Analysis üblich. Zu diesen Methoden zählen unter anderem die Untersuchung der Verzweigungsgleichungen und die sogenannte orbit space Reduktion. Allerdings werden die involvierten Rechnungen meistens per Hand durchgeführt. Dies ist ein ideales Betätigungsfeld für die Computeralgebra, die die Behandlung der typischen Fragestellungen mittels Gröbner Basen erlaubt. Besonderes Interesse verdienen die kontinuierlichen Lie Gruppen, da sie für Anwendungen besonders wichtig sind. Zum Beispiel hat die Erde die Symmetrie der Gruppe $SO(3)$. Bezüglich der kompakten Lie Gruppen mußte zunächst Theorie aufarbeitet werden. Obwohl für endliche Gruppen das prinzipielle Vorgehen klar ist, ergeben sich Verbesserungen im Detail. Dagegen ist für kontinuierliche Gruppen ein neues Konzept zu erarbeiten.

Erste Ergebnisse konnten bezüglich des algorithmischen Beweises der Vollständigkeit von fundamentalen Äquivarianten erzielt werden.

Für die Implementation wurde Maple als Computeralgebra Sprache gewählt, da es einerseits einen hohen Verbreitungsgrad hat und andererseits offen für Benutzerpakete ist. Der Nachteil bestand allerdings darin, daß das Gröbner Basen Paket in Maple den Anforderungen dieses Projektes angepaßt werden mußte.

2.2.10 Theorie der ganzzahligen Optimierung

Testmengen in der Ganzzahligen Programmierung

Bearbeiter: R. Urbaniak, R. Weismantel

Förderung: Das Projekt wurde durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft im Rahmen des Graduiertenkollegs “Algorithmische Diskrete Mathematik” Berlin, gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Für ein gegebenes ganzzahliges Problem wird eine Testmenge als eine Menge von Vektoren definiert, so daß jeder nicht optimale, zulässige Punkt durch Addition eines Elements aus der Testmenge verbessert werden kann (siehe z.B. Graver [1], Thomas [2], Urbaniak [4]). In den letzten Jahren gab es eine Reihe von Ergebnissen, die hoffen lassen, daß Algorithmen basierend auf Testmengen zur Lösung ganzzahliger Programme erfolgreich eingesetzt werden können (siehe Weismantel [5]). Die in Urbaniak, Weismantel & Zielger [3] vorgestellten Algorithmen zur Berechnung einer Testmenge sind jedoch in seiner Form zur Lösung von großen Problemen nicht geeignet. Deswegen ist das Konzept der Zerlegung des Ausgangsproblems in mehrere Teilprobleme hinsichtlich der effizienten Berechnung einer Testmenge besonders wichtig. Betrachtet wurden zunächst graphentheoretische Probleme wobei der Schwerpunkt darauf gelegt wurde, wie sich Operationen auf Graphen wie Löschen eines Knoten und Hinzufügen, Löschen und Kontraktion einer Kante auf die Testmenge, die als gegeben vorausgesetzt wird, auswirken. Da sich diese Operationen auch als Operationen auf Spalten und Zeilen des entsprechenden Programms ausdrücken lassen, ist zu erwarten, daß sich die dort gewonnenen Erkenntnisse zumindest teilweise auf beliebige ganzzahlige Programme verallgemeinern lassen. Ein Schwerpunkt der weiteren Forschung wird darauf gelegt, (allgemeine) Dekompositionsergebnisse in der ganzzahligen Optimierung zur Beschreibung von Testmengen zu nutzen.

Literatur

1. J.E. Graver: *On the foundations of linear and integer programming I*. Mathematical Programming **8** (1975)
2. R.R. Thomas: *Gröbner Basis Methods for integer programming*. PhD. Dissertation, Cornell University, USA (1994)
3. R. Urbaniak, R. Weismantel, G.M. Ziegler: *A variant of the Buchberger algorithm for integer programming*. ZIB–Berlin, Preprint SC 94–29 (1994)
4. R. Urbaniak: *Gröbner Basen in der Ganzzahligen Programmierung*. Diplomarbeit, TU Berlin (1995)
5. R. Weismantel: *Knapsack problems, Test Sets and Polyhedra*. Habilitationsschrift, TU Berlin (1995)

Stabile Mengen und Färbungen in perfekten Graphen

Bearbeiter: M. Grötschel, A. Wagler

Kooperation: Stefan Hougardy (Humboldt–Universität zu Berlin)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Verschiedene kombinatorische Optimierungsprobleme können als Färbungs- oder Stabile-Mengen-Probleme spezieller Graphen verstanden werden. Als gemeinsame Oberklasse vieler dieser speziellen Graphen führte BERGE 1960 die *perfekten Graphen* ein.

Diese Namensgebung erscheint aus heutiger Sicht mehr als gerechtfertigt: einerseits verallgemeinern Resultate über perfekte Graphen viele andere Theoreme der Graphentheorie (z.B. sind berühmte Min–Max–Sätze nur Spezialfälle des Perfekte–Graphen–Theorems von LOVÁSZ, 1972), andererseits haben perfekte Graphen ein gutes algorithmisches Verhalten (nach GRÖTSCHEL, LOVÁSZ und SCHRIJVER (1981) sind Färbungs- und Stabile-Mengen–Problem für perfekte Graphen in polynomialer Zeit lösbar). Darüber hinaus sind perfekte Graphen auch in der Polyedertheorie von Bedeutung (das Stabile-Mengen–Polytop perfekter Graphen kann vollständig beschrieben werden).

Leider ist für diese Graphenklasse mit so vielen schönen Eigenschaften noch keine in polynomialer Zeit nachprüfbare Charakterisierung bekannt. Überhaupt ist die graphentheoretische Charakterisierung perfekter Graphen ein schwieriges Problem, was die seit 35 Jahren unbewiesene Perfekte–Graphen–Vermutung von BERGE (1960) zeigt.

Wir arbeiten in diesem Zusammenhang an folgenden Problemstellungen :

- strukturelle Untersuchungen von perfekten Graphen oder z.B. von (verallgemeinerten) Färbungs- und Stabile-Mengen-Problemen.
- Untersuchungen von bzgl. bestimmter Graphen-Parameter kritischen Graphen.
- Beweis der Perfektheit neuer (möglichst in polynomialer Zeit erkennbarer) Graphenklassen, siehe [1].
- Finden neuer (graphentheoretischer) Charakterisierungen perfekter Graphen (z.B. durch Verschärfung geeigneter Eigenschaften von Oberklassen perfekter Graphen).

Literatur

1. V.B. Le, S. Hougardy A. Wagler: *Wing-Triangulated Graphs are Perfect*. TU Berlin, Preprint No. 434 (1995)

Algorithmische Fragestellungen aus der Geometrie

Bearbeiter: R. Weismantel

Kooperation: M. Henk (Fachbereich Mathematik, TU Berlin)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung von Algorithmen zur numerischen Behandlung von Fragestellungen aus der Geometrie der Zahlen und der Konvexgeometrie. Gegenwärtig werden insbesondere folgende Themen untersucht.

Hilbertbasen polyedrischer Kegel, siehe [2],

Kürzeste und nächste Vektoren in Gittern, siehe [1],

Simultane diophantische Approximation von Zahlen.

Effiziente Verfahren, welche diese Fragestellungen behandeln, finden Anwendung in der ganzzahligen Optimierung.

Literatur

1. M. Henk: *Note on shortest and nearest lattice vectors*. Technische Universität Berlin, Preprint No. 430/1995 (1995)
2. R. Weismantel: *Hilbert bases and the facets of special knapsack polytopes*. Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, Preprint SC 94-19 (1994)

Ganzzahlige und gemischt ganzzahlige Rucksackprobleme

Bearbeiter: A. Martin, R. Weismantel

Kooperation: M. Henk (Fachbereich Mathematik, TU Berlin), L. Wolsey, Y. Pochet (CORE, Belgien)

Förderung: Das Projekt wird durch die Europäische Union (“Twinning”) 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 auf die Untersuchung gemischt ganzzahliger Rucksackprobleme und auf Probleme des Packens kombinatorischer Unterprobleme unter Rucksacknebenbedingungen. Ferner untersuchen wir die Polyeder und Testmengen für Probleme, bei denen mehrere Rucksackungleichungen simultan zu behandeln sind.

Literatur

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

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.E. Ferreira (University of São Paulo, Brasilien), M. Laurent (ENS, Frankreich), L. Wolsey (CORE, Belgien)

Förderung: Das Projekt wird durch die DFG und die Europäische Union (“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. Deza, M. Laurent, M. Grötschel: *Complete description of Small Multicut Polytopes*. In: P. Gritzmann, B. Sturmfels (eds): *Applied Geometry and Discrete Mathematics: The Victor Klee Festschrift*, AMS and ACM, vol. 4 221–252 (1991)
2. M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel: *Optimum Path Packing on Wheels: The Consecutive Case*. Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, Preprint SC 93–26 (1993)
3. 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 Berlin, Preprint SC 94–16 (1994)

Gittermethoden für die ganzzahlige Programmierung

Bearbeiter: R. Schultz, R. Weismantel

Kooperation: A. Schulz, G.M. Ziegler (Fachbereich Mathematik, TU Berlin), R. Thomas (Texas A&M University)

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 – beziehungsweise Lovász & Scarf), andererseits Verfahren, die Testmengen für ganzzahlige Programme konstruieren.

In Sturmfels, Weismantel, Ziegler [2] wurde untersucht, wie die Gitterreduktion mit Gröbnerbasisverfahren simuliert werden kann. Solche und verwandte Techniken wurden in Urbaniak, Weismantel, Ziegler [4] zur Lösung ganzzahliger Optimierungsprobleme angewendet. Eine algebraische Interpretation dieses Verfahrens führt zu dem Begriff eines abgeschnitten Ideals, welcher in [3] eingeführt wurde.

In [1] konnte gezeigt werden, daß für 0/1-Programme das Problem, einen augmentierenden Vektor zu finden, nicht schwerer ist, als das Problem, eine optimale Lösung des Programms zu konstruieren. Dieses Resultat rechtfertigt im Sinne der Komplexitätstheorie den “Testmengen”-Ansatz für 0/1-Programme. Wir versuchen gegenwärtig, dieses Resultat auf Nicht-0/1-Programme zu verallgemeinern.

Literatur

1. A. Schulz, R. Weismantel, G.M. Ziegler: *0/1 integer programming: optimization and augmentation are equivalent*. ZIB-Berlin, Preprint SC 95-08 (1995)
2. B. Sturmfels, R. Weismantel, G.M. Ziegler: *Gröbner bases, lattices, corner polyhedra, and integer programming*. ZIB-Berlin, Preprint SC 94-26 (1994), erschienen in Beiträge Algebra und Geometrie, **36**, No. 2, 281-298 (1995)
3. R. Thomas, R. Weismantel: *Truncated Gröbner bases for integer programming*. ZIB-Berlin, Preprint SC 95-09 (1995)
4. R. Urbaniak, R. Weismantel, G.M. Ziegler: *A variant of the Buchberger Algorithm for Integer Programming*. ZIB-Berlin, Preprint SC 94-29 (1994)

2.2.11 Lösung allgemein-linearer und gemischt-ganzzahliger Optimierungsprobleme

Parallelisierung des Pricings beim Dualen Simplex Verfahren

Bearbeiter: A. Martin

Kooperation: R.E. Bixby (Rice University, Houston, Texas, USA)

Förderung: Das Projekt wurde durch das Center for Research on Parallel Computing (Houston, Texas, USA) gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: In den vergangenen Jahren wurden große Fortschritte gemacht, lineare Programme schneller und effizienter zu lösen, siehe beispielsweise die Implementierungen von CPLEX und OSL. Trotzdem erscheint es nach wie vor notwendig, die Lösungsverfahren für lineare Programme zu verbessern, insbesondere für solche linearen Programme, die bei der ganzzahligen Optimierung und in der Kombinatorischen Optimierung vorkommen. Eine Möglichkeit, diese Verfahren zu beschleunigen, besteht darin, Parallelrechner zu nutzen und Teile des sequentiellen Codes (in unserem Fall Teile von CPLEX) zu parallelisieren, siehe auch Projekt "Simplex-Algorithmen". Wir haben uns auf die "Steepest-Edge" Version des Dualen Simplex Verfahrens, eine Methode, die häufig in Schnittebenenverfahren zur Lösung ganzzahliger Programme verwendet wird, konzentriert. Konkret wurden drei verschiedene parallele Implementierungen untersucht. Eine verwendet PVM, eine System V Shared-Memory Methoden der Interprozessorkommunikation, und eine die PowerC Erweiterung von C auf einem Silicon Graphics Mehrprozessor-Rechner. Diese Versionen haben wir auf unterschiedlichen parallelen Plattformen getestet, dazu zählten Workstation Cluster, eine Sun S20-502, ein Silicon Graphics Mehrprozessor-Rechner sowie eine IBM SP2. Die Ergebnisse sind gemischt. Mit PVM konnten nur bei Beispielen, für die das Verhältnis Anzahl Zeilen zu Anzahl Spalten sehr groß ist, vernünftige Ergebnisse erzielt werden. PVM scheint nur geeignet für Probleme, deren Speicherplatzanforderung zu groß für einen Prozessor sind. Die System V Shared-Memory Version war wesentlich besser, wenngleich auch hier oft nicht die gewünschten Laufzeitverbesserungen erzielt werden konnten. Am besten schnitt die auf Threads basierende PowerC Version von Silicon Graphics ab. Die Ergebnisse bestätigen bis auf wenige Ausnahmen die Erwartungen.

Literatur

1. R.E. Bixby, A. Martin: *Parallelizing the Dual Simplex Method*. ZIB-Berlin, SC 95-45 (1995)

Lösung ganzzahliger Programme

Bearbeiter: A. Martin, R. Weismantel

Kooperation: R.E. Bixby (Rice University, Houston, Texas, USA)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Mittelpunkt dieses langfristig angelegten Projekts steht die Lösung (gemischt) ganzzahliger linearer Programme, das heißt die Lösung von Problemen der Form

$$\begin{aligned} \min \quad & c^T x \\ & Ax \leq b \end{aligned} \tag{1}$$

mit $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$, $c \in \mathbb{R}^n$ und Variablen x_1, \dots, x_n , die binär, ganzzahlig oder kontinuierlich sein können. Bereits seit vielen Jahren werden am ZIB verschiedene Projekte durchgeführt zur Analyse und Lösung speziell strukturierter Programme der Form (1). Die in diesen Projekten gewonnenen Erfahrungen sollen nun genützt und vereint werden, um allgemeine Probleme obiger Form zu lösen, d.h. Probleme über die a-priori keine strukturellen Eigenschaften bekannt sind.

Wir haben damit begonnen, einen "Preprozessor" zu schreiben, der versucht redundante Information in der Problembeschreibung zu eliminieren und durch logische Implikationen die Formulierung zu verschärfen.

Desweiteren werden gegenwärtig Kenntnisse über das Rucksackpolyeder integriert ([1], [2]). Dazu fassen wir jeweils eine Ungleichung oder durch Aggregation mehrere Ungleichungen als eine Rucksack-Bedingung auf und versuchen daraus verletzte Rucksack-Ungleichungen abzuleiten. Der Erfolg dieser Vorgehensweise soll zunächst an den MIPLIB-Problemen getestet werden.

Literatur

1. R. Weismantel: *On the 0/1 knapsack polytope*. ZIB-Berlin, Preprint SC 94-01 (1994)
2. R. Weismantel: *Hilbert bases and the facets of special knapsack polytopes*. ZIB-Berlin, Preprint SC 94-19 (1994)

Ein paralleles Branch-and-Cut-Framework zur Lösung großer kombinatorischer Optimierungsprobleme

Bearbeiter: M. Grammel

Kooperation: Cray Research Inc., Eagan/USA

Beschreibung der Forschungsarbeit: In diesem Projekt wird ein generisches Framework in Form einer C++-Klassenbibliothek erstellt, das die Entwicklung vielfältiger und effizienter paralleler Branch-and-Cut-Algorithmen (B&C) unterstützt. Der gewählte objektorientierte Ansatz gewährleistet eine gute Erweiterbarkeit, Austauschbarkeit und Wiederverwendbarkeit von Komponenten. Man erhält spezielle B&C-Algorithmen, indem Komponenten als abgeleitete C++-Klassen spezialisiert oder um neu hinzugefügte Klassen erweitert werden. Auf diese Weise wurden unter Verwendung eines im ZIB entwickelten sequentiellen Schichtebenen-Codes verschiedene B&C-Versionen für Set-Partitioning-Probleme realisiert.

Ein weiteres Merkmal des Frameworks ist, daß aus vorhandenen Komponenten sequentielle wie parallele B&C-Implementierungen abgeleitet werden können. Basis hierfür ist ein selbst entwickeltes paralleles Programmiermodell, das die Erzeugung aktiver, nebenläufiger Objekte gestattet, jedoch die Art der Synchronisation und Kommunikation zwischen diesen verbirgt. Eine Implementierung des Programmiermodells für die Message-Passing-Bibliothek PVM erlaubt es, parallele B&C-Codes auf dem Cray T3D Parallelrechner sowie auf Workstation-Clustern laufen zu lassen.

Im Berichtszeitraum wurden die generische Grundversion des Frameworks und hiervon abgeleitete Set-Partitioning-Versionen weiter ausgebaut und optimiert. Speziell auf dem Cray T3D ergab sich die Notwendigkeit einer sparsamen Verwendung von Speicherplatz (nur 64 MB pro PE) sowie die Verringerung des Kommunikations-Overheads. Die Klassengliederung auf der Ebene des Schichtebenenverfahrens wurde überarbeitet und erweitert. Wichtige Ausbauschwerpunkte hierbei waren die Implementierung eines globalen Pools für separierte Ungleichungen, Aufruf paralleler primaler Heuristiken und die Einführung von reduzierten Spaltensätzen in lokalen LPs. Derzeit wird an weiteren Performance-Verbesserungen, insbesondere des Lastausgleiches, gearbeitet.

Simplex-Algorithmen

Bearbeiter: R. Wunderling

Kooperation: Cray Research Inc., Eagan/USA

Beschreibung der Forschungsarbeit: Im Rahmen einer Kooperation mit Cray Research sind parallele Implementierungen des Simplex-Algorithmus für unterschiedliche Parallelrechnerarchitekturen entstanden: DoPlex, eine Implementierung für Multiprozessor-Rechner mit verteiltem Speicher, und SMOplex, eine Implementierung für Mehrprozessor-Rechner mit gemeinsamem Speicher. Mit DoPlex konnte für geeignete Probleme beim Einsatz von 32 Prozessoren des Parallelrechners Cray T3D eine Beschleunigung um einen Faktor 20 erzielt werden.

Zusätzlich zur Parallelisierung des Pricings (vgl. Projekt “Parallelisierung des Pricings beim Dualen Simplex Verfahren”) kommt bei beiden parallelen Algorithmen mit dem sogenannten *block pivoting* ein neues Verfahren zum Einsatz, bei dem mehrere sequentielle Simplex-Iterationen zu einem komplexeren, parallelen Schritt zusammengefaßt werden. Weiterhin wurden verschiedene Operationen auf dünn besetzten Matrizen sowie Suchalgorithmen parallelisiert.

Beide Implementierungen folgen einem objekt-orientierten Softwareentwurf und basieren auf einer gemeinsamen Basis(-klasse). Diese Basis ist SoPlex, ein sequentieller Simplex-Algorithmus, der im Vergleich zum Vorjahr auch weiter ausgebaut und beschleunigt wurde.

Parallele Sparse-LU-Zerlegung für den T3D-Parallelrechner

Bearbeiter: R. Wunderling, G. Skorobohatyj

Beschreibung der Forschungsarbeit: In Zusammenhang mit der Parallelisierung des Simplex-Algorithmus wurden parallele Varianten der dort verwendeten LU-Zerlegung für dünnbesetzte, nicht symmetrische Matrizen auf dem Cray T3D implementiert. Eine Variante wurde mittels Cray MPP Fortran formuliert, eine andere wird derzeit in C++ realisiert. Ein Anliegen hierbei ist, die Eignung beider Varianten, die unterschiedliche sogenannte Programmierparadigmen repräsentieren, für Algorithmen auf irregulären Daten zu überprüfen.

Da es sich bei dem Cray T3D um einen Parallelrechner mit verteiltem Speicher handelt, wird eine Verteilung der Daten erforderlich. Das MPP Fortran unterstützt einen datenparallelen Ansatz, indem es den gesamten verteilten Speicher als einen zusammenhängenden Adressraum erscheinen läßt und bei einem Zugriff auf entfernten Speicher die nötige Kommunikation implizit auslöst. Dagegen muß in C++ die Verteilung und Kommunikation im Programm explizit ausgedrückt werden. Um dies zu unterstützen, wurde eine C++-Klasse entwickelt, die typische Kommunikationsmuster effizient implementiert.

Trotz der großen Unterschiede bei dem zugrundeliegenden Programmiermodell, unterscheiden sich die Algorithmen beider Varianten nur marginal. Sie beruhen auf einem Eliminationsverfahren, bei dem mehrere Pivotelemente zu einem sogenannten Blockpivot zusammengefaßt und parallel eliminiert werden. Dabei ist es notwendig, daß die gewählten Pivotelemente kompatibel sind, was einen zusätzlichen Arbeitsschritt gegenüber sequentiellen Algorithmen bedingt.

Beide parallelen Implementierungen erzielen erst bei großen Problemen eine nennenswerte Beschleunigung gegenüber einer optimierten sequentiellen Version, etwa bei solchen, die nur knapp in den Speicher eines Prozessorelementes passen. Der Vorteil der parallelen Varianten besteht hauptsächlich darin, daß sie für noch größere Probleme verwendbar sind (scale-up). Zu einer abschließenden Bewertung beider Ansätze bedarf jedoch es noch weitergehender Optimierungen.

Dekomposition von Matrizen

Bearbeiter: R. Borndörfer, A. Martin

Kooperation: C.E. Ferreira (Universität São Paulo, São Paulo, Brasilien)

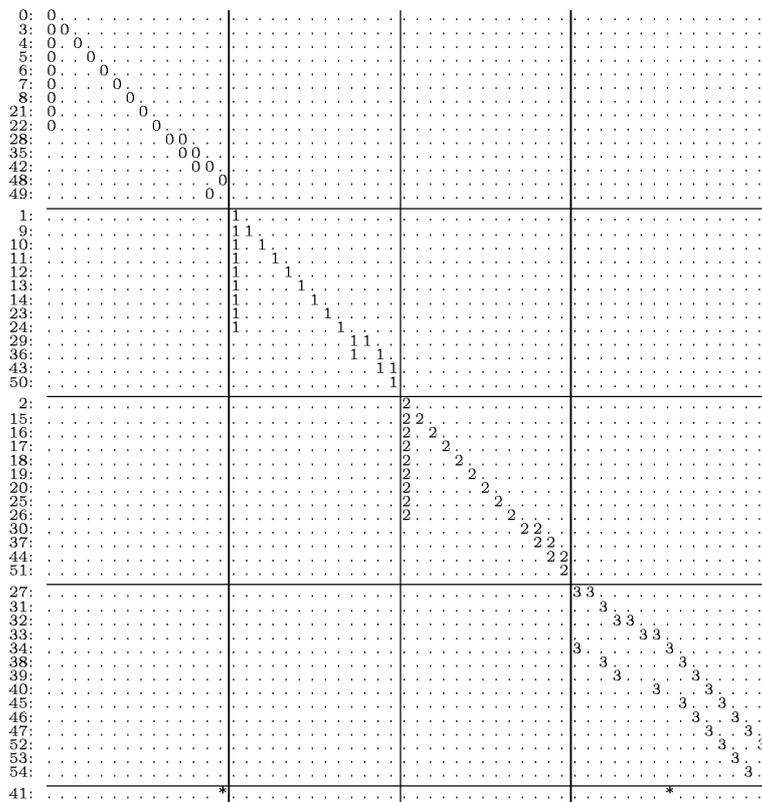
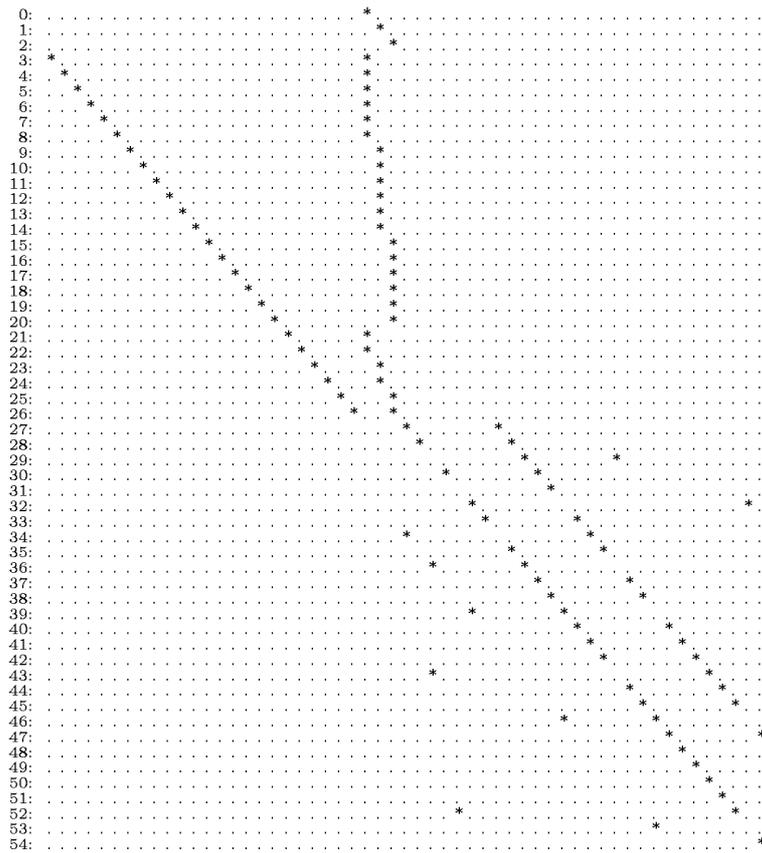
Förderung: DAAD, im Rahmen des Programms “Projektbezogener Wissenschaftleraustausch mit Brasilien – PROBRAL”

Beschreibung der Forschungsarbeit: In diesem Projekt beschäftigen wir uns mit einem Problem, das sowohl bei der Parallelisierung der LU-Faktorisierung innerhalb des Simplex-Verfahrens als auch bei der Lösung ganzzahliger linearer Programme seine Anwendung findet. Gegeben ist eine Matrix A und eine Anzahl B von Blöcken der Größe K . Ziel ist es, möglichst viele Zeilen der Matrix A den Blöcken zuzuweisen, so daß es keine Spalte gibt, die einen Nichtnull-Eintrag in zwei Zeilen hat, die zu verschiedenen Blöcken gehören.

Bei einer Parallelisierung der LU-Faktorisierung entsprechen die Blöcke den zur Verfügung stehenden Prozessoren. Als Kapazität der Blöcke wählt man beispielsweise $\frac{\text{Anzahl Zeilen}}{K}$, um eine gleichmäßige Auslastung der Prozessoren zu erreichen. Für eine zulässige Lösung des obigen Matrixdekompositions-Problems lassen sich alle Zeilen, die demselben Block zugewiesen werden, unabhängig von allen zu anderen Blöcken zugewiesenen Zeilen faktorisieren. Die verbleibenden Zeilen, das heißt diejenigen Zeilen, die keinem Block zugewiesen werden konnten, müssen im Anschluß sequentiell abgearbeitet werden.

Bei der Lösung ganzzahliger linearer Programme gibt eine solche Dekomposition der Matrix in Blöcke wichtige Informationen über die Struktur des zugrundeliegenden Problems und damit Entscheidungshilfen für das Lösungsverfahren, beispielsweise auf welchen Variablen verzweigt werden soll oder für welche Nebenbedingungen weitere Ungleichungen erzeugt werden sollen.

Zur Lösung des Matrixdekompositions-Problems (MDP) haben wir begonnen, einen Branch-&-Cut Algorithmus zu entwickeln. Wir haben das (MDP) als ganzzahliges lineares Programm formuliert und die LP-Relaxierung durch einige neue Klassen von facetten-definierenden Ungleichungen verschärft. Die Separierung dieser Ungleichungen bilden den Kern unseres Branch-&-Cut Algorithmus. Wir haben bisher unsere Verfahren an kleineren Problemen erfolgreich getestet.



Dekomposition in 4 Blöcke (mit Zeilen-/Spalten-Permutation)

Optimale Blockauswahl bei der Kraftwerkseinsatzplanung

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

Kooperation: W. Römisch, D. Dentcheva, A. Möller (Institut für Mathematik, Humboldt–Universität zu Berlin), M. Jünger, S. Thienel (Universität zu Köln), VEAG Vereinigte Energiewerke Aktiengesellschaft Berlin

Förderung: Das Projekt wurde durch das Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie und die Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Problem der optimalen Blockauswahl (unit commitment) besteht in der kostenoptimalen Auswahl von Erzeugereinheiten eines Kraftwerkssystems, so daß die auftretende Last in einem gewissen Planungszeitraum (mittel- bis langfristig) gedeckt wird und weitere wirtschaftliche und technologische Nebenbedingungen eingehalten werden. Für Elektroenergieversorger ist die optimale Blockauswahl eine wichtige Routineaufgabe bei der Kraftwerkseinsatzplanung. Resultat der optimalen Blockauswahl sind Einsatzpläne für die einzelnen Erzeugereinheiten.

Das Kraftwerkssystem der VEAG Vereinigten Energiewerke AG Berlin besteht aus thermischen Einheiten (konventionellen Kraftwerksblöcken und Gasturbinen) sowie Pumpspeicherwerken. Die zu optimierenden Kosten setzen sich aus Brennstoffkosten für das Anfahren und den Betrieb der Kraftwerksblöcke zusammen. Einsatzpläne basieren auf einem Zeitraster (viertelstündlich, stündlich oder gröber) und beinhalten Schaltzustände und Leistungswerte für die Kraftwerksblöcke sowie Leistungswerte für den Turbinen- bzw. Pumpbetrieb in den Pumpspeicherwerken. Zu den Nebenbedingungen zählen die Lastdeckung, das Vorhalten einer rotierenden Reserve, Leistungsbeschränkungen der Erzeugereinheiten, Mindeststillstandzeiten der thermischen Blöcke nach Trennung vom Netz und Bilanzen in den Pumpspeicherwerken. Typische Zeithorizonte für die Optimierung reichen von wenigen Tagen bis zu mehreren Monaten.

Unser mathematisches Modell der optimalen Blockauswahl ist ein großdimensionales gemischt-ganzzahliges Optimierungsproblem mit linearen Nebenbedingungen. Für lineare Brennstoffkostenfunktionen wurden mit Hilfe von Branch-and-Bound Techniken und Lagrange Relaxation Testrechnungen für Systeme mit bis zu 25 thermischen Einheiten und 7 Pumpspeicherwerken über Zeithorizonte bis zu 8 Tagen im Stundenraster durchgeführt. Aktuelle Untersuchungen zielen auf die Ausnutzung der Facettenstruktur des Restriktionspolyeders in Branch-&-Cut Routinen. Der Zugang über Lagrange Relaxation wird durch die Einbeziehung moderner Methoden der nichtdifferenzierbaren Optimierung (Bundle-Trust Verfahren) weiterentwickelt.

Literatur

1. D. Dentcheva, A. Möller, P. Reeh, W. Römisch, R. Schultz, G. Schwarzbach, J. Thomas: *Optimale Blockauswahl bei der Kraftwerkseinsatzplanung*. Manuskript, VEAG Vereinigte Energiewerke AG Berlin, Humboldt-Universität zu Berlin, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, (1995)
2. A. Möller, W. Römisch: *A Dual Method for the Unit Commitment Problem*. Manuskript, Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Mathematik, Preprint Nr. 95-1 (1995)
3. D. Müller: *Minimierung stückweise linearer Zielfunktionen mit Anwendung in der elektrischen Lastverteilung*. Diplomarbeit (Betreuer: R. Schultz), Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Mathematik (1995)

2.2.12 Nichtlineare Methoden in der ganzzahligen Optimierung

Semidefinite Relaxationen für kombinatorische Optimierungsprobleme

Bearbeiter: C. Helmberg, R. Weismantel

Kooperation: F. Rendl (Technische Universität Graz, Österreich), M. Jünger (Institut für Informatik, Universität zu Köln), G. Rinaldi (IASI, Rom, Italien)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Semidefinite Programmierung bezeichnet lineare Programmierung über positiv semidefiniten Matrix-Variablen und ist zur Zeit weltweit ein ausgesprochen aktives Forschungsgebiet. Die Möglichkeit, mittels semidefiniter Programme sehr gute nichtlineare Relaxationen für kombinatorische Optimierungsprobleme zu erstellen, wurde schon vor vielen Jahren erkannt. Die Arbeiten waren jedoch notwendigerweise theoretischer Natur, da damals keine effizienten Algorithmen zur Lösung derartiger Probleme existierten. Nun, mit der Entwicklung Innerer-Punkte Methoden für die semidefinite Programmierung [1], stehen effiziente Verfahren zur Verfügung. Semidefinite Programme eignen sich insbesondere für die Modellierung von Relaxationen quadratischer 0–1 Optimierungs Probleme, wie zum Beispiel

- Max Cut: ist äquivalent zu quadratischer 0–1 Optimierung ohne Nebenbedingungen.
- Max Clique: Gesucht ist ein maximaler (möglicherweise gewichteter) vollständiger Teilgraph.
- Quadratischer Rucksack: Dies entspricht quadratischer 0–1 Optimierung mit einer linearen Nebenbedingung.
- Quadratische 0–1 Optimierung mit quadratischen und linearen Nebenbedingungen.
- Graph Färbungen und Partitionen: Gesucht sind typischerweise Färbungen mit möglichst wenig Farben oder gewichtsm minimale Färbungen mit k Farben.

Wir untersuchen theoretische und praktische Eigenschaften der semidefiniten Relaxationen dieser Probleme. Ein generischer Ansatz für die Entwicklung derartiger Relaxationen wird in [2] vorgestellt. Wie in der linearen Programmierung lösen wir zuerst ein leichtes Anfangsproblem und nähern dann sukzessive die konvexe Hülle der zulässigen Punkte des Ursprungsproblems durch Hinzufügen von Schnittebenen an. Wegen der stark unterschiedlichen Struktur des nichtlinearen

Anfangsproblems bieten sich jedoch neue Möglichkeiten für den Entwurf von Separationsalgorithmen. Dabei sind durchaus auch aufwendigere Verfahren in Betracht zu ziehen, weil der zur Lösung der semidefiniten Relaxationen benötigte Rechenaufwand relativ hoch ist und kubisch in der Anzahl der Nebenbedingungen wächst. Sowohl für Max Cut [3] als auch für den quadratischen Rucksack [4] haben wir bereits sehr gute Ergebnisse erzielt.

Literatur

1. C. Helmberg, F. Rendl, R. Vanderbei, H. Wolkowicz: *An Interior-Point Method for Semidefinite Programming*. Erscheint in SIAM J. Optim.
2. C. Helmberg, S. Poljak, F. Rendl, H. Wolkowicz: *Combining Semidefinite and Polyhedral Relaxations for Integer Programs*. IPCO IV Proc., LNCS 920, Springer-Verlag, pp. 124–134 (1995)
3. C. Helmberg, F. Rendl: *Solving Quadratic (0,1)-Problems by Semidefinite Programs and Cutting Planes*. Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, Preprint SC 95–35 (1995)
4. C. Helmberg, F. Rendl, R. Weismantel: *Quadratic Knapsack Relaxations Using Cutting Planes and Semidefinite Programming: extended abstract*, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, Preprint SC 95–37 (1995)

Eigenwertmethoden für Diskrete Optimierungsprobleme

Bearbeiter: C. Helmberg, R. Weismantel

Kooperation: F. Rendl (Technische Universität Graz, Österreich)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Zur Zeit sind Innere-Punkte Methoden die besten Verfahren, um semidefinite Programme zu berechnen. Sie approximieren die Optimallösung durch eine Folge von Newton-Schritten. Die meiste Rechenzeit beansprucht dabei das Erstellen und Faktorisieren einer vollständig besetzten, positiv definiten Matrix, deren Ordnung gleich der Anzahl der (linearen) Nebenbedingungen des semidefiniten Programms ist. Für Anwendungen aus der Praxis wird dieses Verfahren deshalb sehr schnell zu langsam.

Viele semidefinite Relaxationen für kombinatorische Optimierungsprobleme lassen sich äquivalent als Eigenwertminimierungsaufgaben formulieren. Das Minimieren des größten Eigenwerts einer Matrix ist wohl ein konvexes, jedoch kein polyedrisches oder glattes Optimierungsproblem. Ein Standardverfahren für derartige Aufgabenstellungen ist zum Beispiel der bundle-trust Algorithmus, dem eine Routine zur Verfügung gestellt werden muß, die zu einem gegebenen Punkt den Funktionswert und einen Subgradienten berechnet. Die Berechnung weniger extremer Eigenwerte sowie der zugehörigen Eigenvektoren ist mittels Lanczos-Algorithmus insbesondere für dünn besetzte Matrizen recht effizient möglich.

Die aus den kombinatorischen Anwendungen abgeleiteten Eigenwertprobleme haben eine sehr spezielle Struktur. Ziel des Projekts ist es, maßgeschneiderte Algorithmen für diese Klasse von Problemen zu entwickeln und zu implementieren. Dabei geht es nicht so sehr um das exakte Lösen der semidefiniten Relaxationen, vielmehr soll ein Werkzeug zur Verfügung gestellt werden, das innerhalb einer angemessenen Zeit sowohl gute Lösungen als auch gute Schranken zur Verfügung stellt.

Da die Eigenwertprobleme naturgemäß große Ähnlichkeiten zu den entsprechenden semidefiniten Relaxationen aufweisen, erwarten wir, daß wir unser Wissen und unsere Erfahrung im semidefiniten Bereich gut in die "Welt der Eigenwerte" übertragen können.

2.2.13 Stochastische Optimierung

Struktur, Stabilität und Lösungsverfahren in der stochastischen Optimierung

Bearbeiter: N. Gröwe, R. Schultz

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

Förderung: Das Projekt wurde durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (im Normalverfahren) und die Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung Berlin 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 verfügt man außerdem oftmals nur über Approximationen des dem stochastischen Programm unterliegenden Wahrscheinlichkeitsmaßes. Dies ist Motivation für Untersuchungen zur Stabilität stochastischer Programme bezüglich Störungen des unterliegenden Wahrscheinlichkeitsmaßes.

Im Jahr 1995 wurden im Projekt folgende Ergebnisse erzielt:

- Entwicklung eines Lösungsverfahrens für stochastische Programme unter Nutzung von statistischen Schätzern, die auf großen Stichprobenumfängen beruhen, Anwendung auf die optimale Lastverteilung in Kraftwerkssystemen bei ungewissem Elektroenergiebedarf,
- Ausdehnung hinreichender Bedingungen für die starke Konvexität von Erwartungswertfunktionalen auf allgemeinere Klassen zweistufiger stochastischer Programme,
- Aussagen zur gleichmäßigen Konvergenz von Erwartungswertfunktionalen in Zweistufenproblemen mit zufälliger Kompensationsmatrix bei Schätzung mittels empirischer Verteilungen,
- Entwicklung eines Lösungsverfahrens für ganzzahlige stochastische Programme unter Nutzung von Gröbner-Basis-Methoden.

Literatur

1. N. Gröwe: *Estimated Stochastic Programs with Probabilistic Constraints*, eingereicht bei: European Journal of Operational Research
2. N. Gröwe: *Numerical Solution and Asymptotic Analysis of Stochastic Programs*, Dissertation, Humboldt–Universität zu Berlin, Institut für Mathematik (1995)
3. G. Pflug, A. Ruszczyński, R. Schultz: *On the Glivenko–Cantelli Problem in Stochastic Programming: Linear Recourse*. International Institute for Applied Systems Analysis (IIASA) Laxenburg, Working Paper WP-95-003, 1995, eingereicht bei: Mathematics of Operations Research.
4. R. Schultz: *Discontinuous Optimization Problems in Stochastic Integer Programming.*, Konrad–Zuse–Zentrum Berlin, Preprint SC 95–20 (1995), erscheint in: ZAMM - Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik.
5. R. Schultz: *Strong Convexity in Stochastic Programs with Complete Recourse II: Partially Random Right–Hand Side*. Konrad–Zuse–Zentrum Berlin, Preprint SC 95–21 (1995), eingereicht bei: Mathematics of Operations Research.
6. R. Schultz, L. Stougie, M.H. van der Vlerk: *Solving Stochastic Integer Programs with Complete Recourse: A Framework using Gröbner Bases*. Konrad–Zuse–Zentrum Berlin, Preprint SC 95–23 (1995), eingereicht bei: Mathematical Programming.

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 (Institut für Mathematik, Humboldt-Universität zu Berlin)

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

Beschreibung der Forschungsarbeit: In diesem Projekt werden Instrumente entwickelt, 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 (Optimierung und Dimensionierung von ACD-Systemen, Performance-Analyse bei Systemen mit selektiver Trunk-Reservation),
- Statistische Lastvorhersagen und Modellierungen in Kraftwerkssystemen,
- Optimierung in Kraftwerkssystemen (Lastverteilung, Blockauswahl, Optimierung unter Ungewißheiten).

Literatur

- [1] A. Brandt, M. Brandt: *On the Sojourn Times for Many-Queue Head-of-the-Line Processor-Sharing Systems with Permanent Customers*. Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, Preprint SC 95-34 (1995)
- [2] A. Brandt, M. Brandt: *Bericht zum Thema "ACD-Systeme II"*, SIEMENS AG, München 1995
- [3] A. Brandt, M. Brandt: *Bericht zum Thema "ACD-Systeme III"*, SIEMENS AG, München 1995
- [4] A. Brandt, M. Brandt, H. Pohl: *Zwischenbericht zum Thema "Approximation der Überlaufströme bei Systemen mit selektiver Trunk-Reservation für heterogene Quellen"*, TELEKOM AG FTZ, Darmstadt (1995)

- [5] M. Brandt: *Approximations for the Distribution Function of the Sum of iid Random Variables with Compact Support in \mathbb{R}_+* . Eingereicht bei: Annals of Probability, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, Preprint SC 95-33 (1995)
- [6] D. Dentcheva, A. Möller, P. Reeh, W. Römisch, R. Schultz, G. Schwarzbach, J. Thomas: *Optimale Blockauswahl bei der Kraftwerkseinsatzplanung*. Vereinigte Energiewerke AG Berlin, Humboldt-Universität zu Berlin, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin 1995 (Manuskript)
- [7] N. Gröwe: *Numerical Solution and Asymptotic Analysis of Stochastic Programs*. Dissertation, Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Mathematik (1995)
- [8] N. Gröwe, W. Römisch, R. Schultz: *A Simple Recourse Model for Power Dispatch under Uncertain Demand*. Annals of Operations Research **59** 135-164 (1995)
- [9] J. Polzehl: *Regression-Based Short-Term Prediction of Electrical Load for a Power System*. American Statistical Association 1994 Proceedings of the Section on Physical & Engineering Sciences, 285-290 (1995)
- [10] W. Römisch, R. Schultz: *Decomposition of a Multi-Stage Stochastic Program for Power Dispatch*. Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Mathematik, Preprint 95-7, 1995, erscheint in: ZAMM – Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik.

Optimale Lastverteilung mit unvollständiger Information unter Echtzeit-Bedingungen

Bearbeiter: R. Schultz

Kooperation: W. Römisch, D. Dentcheva, M. Nowak (Institut für Mathematik, Humboldt-Universität zu Berlin), VEAG Vereinigte Energiewerke Aktiengesellschaft Berlin

Förderung: Das Projekt wurde durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (im Schwerpunktprogramm "Echtzeit-Optimierung großer Systeme") und die Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Bei der Optimierung der elektrischen Lastverteilung in Kraftwerkssystemen entstehen Echtzeit-Anforderungen durch den Zeittakt für Steuerbefehle an Erzeugereinheiten und durch unvollständige Information wie z.B. über den zukünftigen Lastverlauf, was wegen der Verkopplung aktueller und zukünftiger Steuerbefehle eine Off-Line Optimierung unmöglich macht und mit wachsender Information über das System zu seiner ständigen Reoptimierung zwingt. Gemessen an der Zahl der Variablen und Restriktionen ist die Lastverteilung in Kraftwerkssystemen wie dem des Kooperationspartners VEAG Berlin ein großdimensionales Optimierungsproblem. Ziel des Vorhabens ist die Entwicklung mathematischer Modelle, Algorithmen und Computercodes für die optimale Lastverteilung in Echtzeit. Methodischer Ansatz ist die Modellierung des Echtzeit-Optimierungsproblems als großes gemischt-ganzzahliges stochastisches Programm. Aus seiner Kopplungsstruktur werden Dekompositionsansätze für echtzeitfähige Algorithmen abgeleitet. Dazu sind Methoden der gemischt-ganzzahligen, der stochastischen und der nichtglatten Optimierung anzupassen, zu kombinieren und weiterzuentwickeln. Die unvollständige Information wird über Wahrscheinlichkeitsverteilungen modelliert, für die echtzeitfähige Aufdatierungen zur Erfassung des Informationszuwachses entwickelt werden.

Literatur

1. W. Römisch, R. Schultz: *Decomposition of a Multi-Stage Stochastic Program for Power Dispatch*. Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Mathematik, Preprint 95-7 (1995), erscheint in: ZAMM – Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik.

2.2.14 On- und Offline Transportprobleme

Echtzeit-Optimierung komplexer Transportsysteme

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

Kooperation: Siemens-Nixdorf AG (Augsburg), Herlitz AG (Berlin)

Förderung: Das Projekt wurde durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft im Schwerpunktprogramm "Echtzeit-Optimierung großer Systeme" gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Transportsysteme werden sorgfältig entworfen, damit notwendige Transportaufgaben effizient erledigt werden können. Derartige Systeme sind jedoch auch dadurch gekennzeichnet, daß eine Vorab-Optimierung des operativen Einsatzes in der Regel nicht möglich ist. Während des Systembetriebs entstehen unvorhersagbar neue Transportaufträge, alte werden storniert; Störungen und Staus verändern die Systemeigenschaften. Diese Umstände machen eine Online-Planung erforderlich; unter Echtzeit-Bedingungen müssen gute Entscheidungen zur Abarbeitung der Aufträge getroffen werden.

Das Ziel des Projekts besteht darin, praxistaugliche mathematische Modelle für derartige Echtzeit-Aufgaben zu entwerfen, diese Modelle mathematisch zu untersuchen und daraus algorithmische Strategien abzuleiten. Wir konzentrieren uns dabei auf Transportaufgaben, die zu Modellen aus dem Bereich der Kombinatorischen Optimierung mit stochastischen und nichtlinearen Komponenten führen. Wir wollen für einzelne konkrete Transportsysteme echtzeit-taugliche Verfahren entwickeln und implementieren. Ferner soll ihre Praxistauglichkeit anhand echter Fallbeispiele in Zusammenarbeit mit Partnern in der Industrie getestet werden.

(1) **Fahrbewegungen des Bediengeräts eines automatischen Hochregallagers**

Bei der Siemens-Nixdorf Informationssysteme AG (SNI) werden in einem voll-automatischen Hochregallager alle internen Transportbewegungen durch ein Bediengerät abgearbeitet. Um Verzögerungen an den Montagelinien und Rückstaus im Bereich der Anlieferung zu vermeiden, müssen die Güter so ein-, um- und ausgelagert werden, daß eine Zielfunktion (Summe der Leerfahrzeiten, gewichtete Summe der Wartezeiten bis zur Auftragsabarbeitung o. ä.) minimiert wird. Aufgrund der unvorhersagbaren Reaktionszeiten des Systems bezüglich Auftragsingang, -beendigung oder -stornierung ist ein Echtzeit-Verfahren erforderlich, welches schnell (manchmal in weniger als einer Sekunde) eine gute Lösung, also eine Fahrauftragszuweisung an das Regalbediengerät, bestimmt.

(2) **Disposition von Fahrzeugen für den Behindertentransport (Telebus)**

Die Berliner Senatsverwaltung für Soziales betreibt einen Fahrdienst für Behinderte, bei dem i.a. Fahrtwünsche per Telefon mitgeteilt werden. Derzeit müssen

diese bis spätestens einen Tag vorher angemeldet werden, so daß off-line Modelle verwendet werden können. Ziel ist es, ein Dispositionssystem zu entwickeln, welches erlaubt, auch kurzfristig eingehende Fahrtwünsche und Stornierungen zu disponieren. Hierzu ist es erforderlich, praktisch ohne Zeitverzug eine gute zulässige Lösung zu konstruieren, um dem Anrufer sofort mitzuteilen, ob sein Fahrtwunsch erfüllt werden kann oder ihm ggf. Alternativen anzubieten.

(3) Fahrauftragszuweisung in einem fahrerlosen Transportsystem

In einem flexiblen Fertigungssystem der Siemens-Nixdorf Informationssysteme AG (SNI) wird der betriebsinterne Waren- und Produktfluß in insgesamt vier Fertigungshallen durch zwölf fahrerlose Transportfahrzeuge bestritten. Da die Warenanlieferungen und die Anforderungen der manuellen Montage nicht minutengenau geplant werden können, ist auf kurzfristig eingehende Aufträge zu reagieren, die umgehend disponiert werden müssen. Um Verzögerungen im Produktionsfluß zu vermeiden, ist es das Ziel, die Transportaufträge möglichst schnell abzuarbeiten. Bei Störung von einzelnen Fahrzeugen oder Teilstrecken ist eine sofortige Umdisponierung der Aufträge und, da defekte Fahrzeuge auch Fahrstrecken blockieren, unter Umständen eine Änderung der Fahrtrouten erforderlich.

(4) Steuerung von Kommissioniergeräten

Bei der Herlitz AG in Berlin werden aus Regallagern Kundenaufträge kommissioniert. Acht Kommissioniergeräte, "bestückt" mit jeweils 19 Aufträgen, fahren dazu auf einem festen Rundkurs an den Regalen entlang und stoppen, falls ein Artikel aus dem Regal genommen werden muß. Da die Fahrzeuge sich nicht gegenseitig überholen können, müssen nachfolgende Fahrzeuge hinter vorausfahrenden warten. Die Aufgabe ist, die Aufträge so auf die Fahrzeuge zu verteilen, daß die Stauzeiten minimiert und die Aufträge termingerecht bearbeitet werden. Die Aufträge müssen in engen Zeitfenstern in Echtzeit disponiert werden.

Literatur

- [1] A. Abdel-Aziz Abdel-Hamid, N. Ascheuer, M. Grötschel, H. Schorer: *Simulation und Optimierung einer PC-Fertigung unter Echtzeitbedingungen*. In: A. Bachem, M. Jünger, R. Schrader (Hrsg.): *Mathematik in der Praxis – Fallstudien aus Industrie, Wirtschaft, Naturwissenschaften und Medizin*. Springer-Verlag (1995)
- [2] N. Ascheuer: *Hamiltonian Path Problems in the on-line optimization of Flexible Manufacturing Systems*. Dissertation, Technische Universität Berlin, (1995)

Fahrzeugeinsatzplanung im Behindertentransport

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

Kooperation: Berliner Zentrallausschuß für Soziale Aufgaben e.V. (BZA)

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

Beschreibung der Forschungsarbeit: TELEBUS ist der soziale Behindertenfahrdienst in Berlin. Ziel des Systems ist die Schaffung von Mobilität für Schwerbehinderte, die das öffentliche Nahverkehrssystem nicht benutzen können. Hierzu gehören außer der reinen Beförderung mit speziellen Kleinbussen eine Reihe von Serviceleistungen wie Hilfe beim Ein- und Ausstieg aus dem Fahrzeug. Jeden Tag gehen 1000 bis 1500 Fahrtwünsche bei Telebus ein und es stellt sich das Problem, eine Fahrzeugeinsatzplanung zu erstellen, so daß alle Beförderungen möglichst pünktlich und auf direktem Weg durchgeführt werden, während gleichzeitig die Kosten niedrig sein sollen.

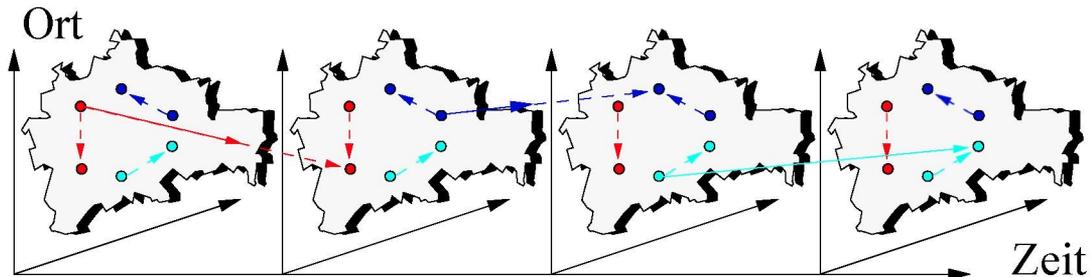
Für dieses Telebus-Dispositionsproblem haben wir ein zweistufiges Lösungsverfahren entwickelt. Im ersten Schritt erzeugt ein parametrisierter Matrixgenerator Touren für einzelne Fahrzeuge, die in Form einer 0/1-Matrix abgespeichert werden. Die Tourenmatrix beschreibt also eine Menge verschiedener Möglichkeiten, die Fahrtwünsche zu erfüllen. Das Problem der Auswahl der optimalen Tourenkombination aus dieser Matrix ist ein *Set-Partitioning-Problem*, das in einem zweiten Schritt mit einem Branch&Cut-Algorithmus gelöst wird. Zusätzlich können in die Matrixerzeugung auch Heuristiken integriert werden. Ein solcher heuristischer Matrixgenerator ist seit Juli 1995 bei unserem Kooperationspartner, dem Berliner Zentrallausschuß für Soziale Aufgaben e.V., der den Telebus betreibt, für den Tagesbetrieb installiert. Im praktischen Einsatz konnten damit erhebliche Kosteneinsparungen bei gleichzeitiger Verbesserung des Service erreicht werden.

Der Branch&Cut-Algorithmus basiert auf der Kenntnis der polyedrischen Struktur des zu dem Problem gehörigen Set-Partitioning-Polytops. Da das Set-Partitioning-Polytop der Durchschnitt eines Set-Packing- und eines Set-Covering-Polytops ist, verwenden wir für diese Polyeder bekannte Ungleichungen in unserer Implementation. Leider gibt es jedoch für Covering-Probleme nur sehr wenige algorithmisch nutzbare Klassen von Ungleichungen.

Wir haben deshalb eine neue Klasse von Bedingungen für Covering-Probleme entwickelt. Die Grundidee ist, daß Packing und Covering über das Komplementieren von Variablen eng miteinander zusammenhängen. Unsere Methode erzeugt aus einem Covering-Problem ein Packing-Problem durch Aggregation von Variablen. Dieses Packing-Problem hängt in dem Sinne eng mit dem ursprünglichen Covering-Problem zusammen, als jede Ungleichung für das abgeleitete Packing-Problem in eine Ungleichung für das Covering-Problem rückübersetzt werden kann. Zur Ableitung solcher Ungleichungen haben wir einen Separationsalgorithmus

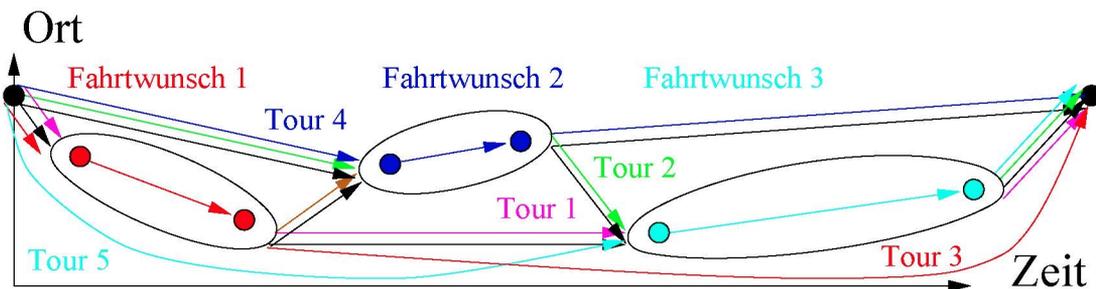
mus entwickelt, der sich mit dem beim Set-Partitioning üblichen Preprocessing koppeln läßt. Unsere Rechenergebnisse für Standardtestbeispiele aus der Literatur und für Telebusprobleme zeigen die potentielle Nützlichkeit unserer Methode.

Planungstag: Fahrtwünsche örtlich/zeitlich



1. Schritt

Orts-/Zeitgraph: Fahrtwünsche und Verknüpfungen



2. Schritt

Set-Partitioning-Modell

minimiere $c_1 x_1 + c_2 x_2 + c_3 x_3 + c_4 x_4 + c_5 x_5$

Fahrtwunsch 1 $1x_1 + 0x_2 + 1x_3 + 0x_4 + 0x_5 = 1$

Fahrtwunsch 2 $1x_1 + 1x_2 + 0x_3 + 1x_4 + 0x_5 = 1$

Fahrtwunsch 3 $1x_1 + 1x_2 + 0x_3 + 0x_4 + 1x_5 = 1$

Tour 1 Tour 2 Tour 3 $x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 \in \{0,1\}$

Schematische Darstellung der Fahrzeugeinsatzplanung

Literatur

- [1] F. Klostermeier, C. Küttner: *Kostengünstige Disposition von Telebussen*. Diplomarbeit, Technische Universität Berlin (1993)

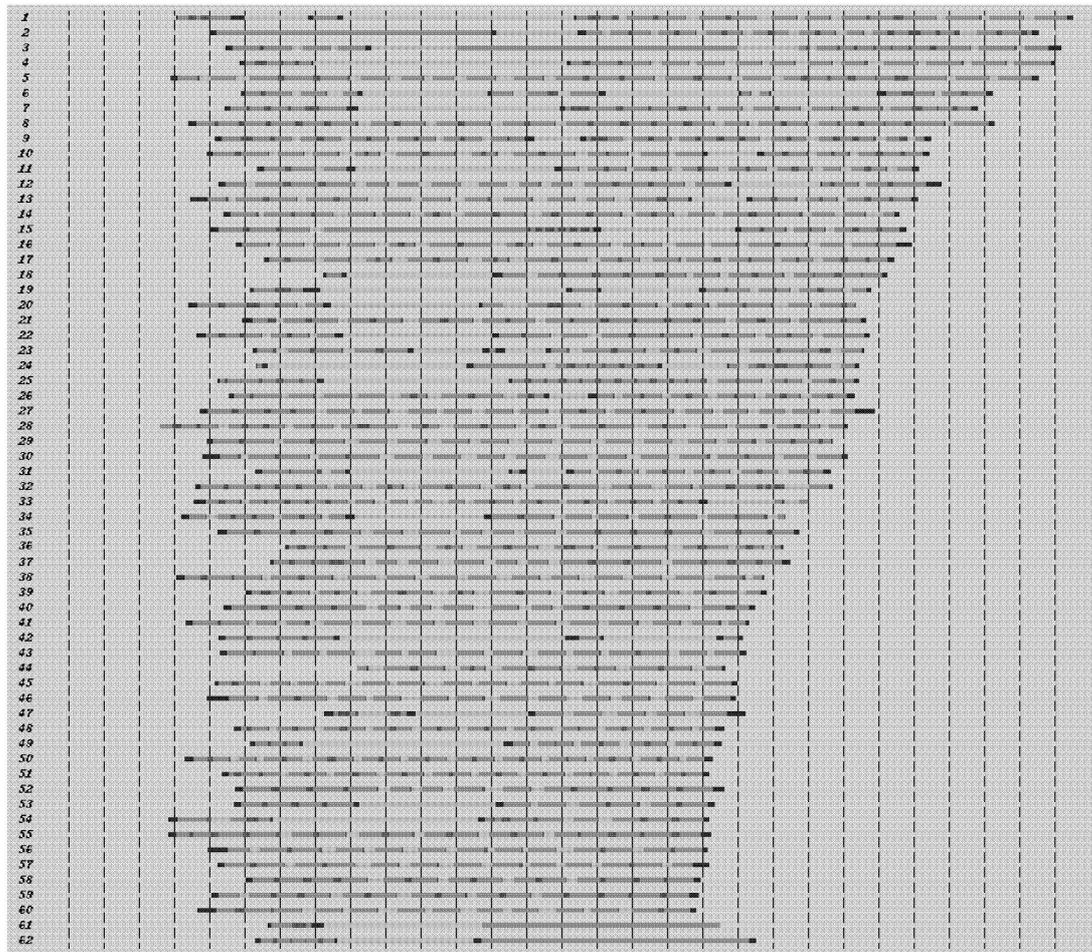
Fahrzeugumlaufplanung im Öffentlichen Personennahverkehr (ÖPNV)

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

Kooperation: HanseCom GmbH (Hamburg), Berliner Verkehrsbetriebe / IVU GmbH (Berlin)

Förderung: Das Projekt wurde durch das Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Aus einem Linienplan und einem Fahrplan werden Fahrgastfahrten (inkl. Sonderfahrten) definiert. Jede *Fahrgastfahrt* wird durch ein Streckenstück, einen Starthaltepunkt, einen Endhaltepunkt, eine Anfangszeit und eine Endzeit bestimmt. Alle Fahrzeuge eines Typs und eines Betriebshofs werden zu sogenannten *Depots* zusammengefaßt. Eine Fahrgastfahrt muß von genau einem Fahrzeug eines zulässigen Depots vom Start- bis zum Endhaltepunkt bedient werden. Neben den Fahrgastfahrten gibt es noch weitere Arten von Fahrten, die als *Leerfahrten* bezeichnet werden: *Einsetzfahrten* für die Fahrzeugzuführung von einem Depot zu einer Fahrgastfahrt, *Aussetzfahrten* für die Fahrzeugrückführung von einer Fahrgastfahrt zum Depot und *Kopplungen* für die Verknüpfung zweier Fahrgastfahrten. Kopplungen werden unabhängig davon definiert, ob ein Fahrzeug lediglich wendet und eine Linie in der entgegengesetzten Richtung bedient oder ob ein Fahrzeug zu einer anderen Linie wechselt. Die Aufgabe der *kostenminimalen Fahrzeugumlaufplanung* besteht in der Zuordnung der Fahrzeuge zu den Fahrgastfahrten, so daß alle Fahrgastfahrten bedient werden und eine den betrieblichen Belangen genügende Kostenfunktion minimiert wird. Fahrzeugumlaufplanungsprobleme mit einem einzigen Depot können als Minimal-Kosten-Flußprobleme modelliert werden und sind deshalb polynomial lösbar. Jedoch schon ab zwei Depots reihen sie sich in die Klasse der *NP*-schweren Probleme im strengen Sinne ein. Für den Mehr-Depot-Fall wurde ein Schnittebenenverfahren in Verbindung mit einem Branch-&-Bound-Code implementiert. Das Verfahren wird gleichzeitig durch Heuristiken zur Bestimmung unterer Schranken und zulässiger Lösungen unterstützt. Durch die Bestimmung unterer Schranken kann die Güte bereits bekannter zulässiger, jedoch noch nicht optimaler Umlaufpläne abgeschätzt werden. Wir sind inzwischen in der Lage, praktische Anwendungsprobleme der Hamburger Hochbahn AG, der Verkehrsbetriebe Hamburg-Holstein AG und der Berliner Verkehrsbetriebe zu lösen. Diese realen Probleme sind teilweise von enormer Größenordnung. Die Berechnung einer Optimallösung bzw. der Beweis der Optimalität einer Lösung für die sehr großen Umlaufplanungsprobleme erfordert noch erheblichen Rechenaufwand. Jedoch gelingt es uns in allen Fällen, auf leistungsfähigen Workstations innerhalb weniger Stunden Rechenzeit Lösungen zu konstruieren, die nur um wenige Prozentpunkte vom Optimum abweichen.



Typischer Fahrzeugumlaufplan für ein Hamburger Depot

Literatur

1. A. Löbel, U. Strubbe: *Wagenumlaufoptimierung – Methodischer Ansatz und praktische Anwendung*. ZIB-Berlin, Preprint SC 95-38 (1995)
2. A. Löbel: *Solving Large-Scale Real-World Minimum-Cost Flow Problems by a Network Simplex Method*. ZIB-Berlin, Preprint SC 96-7 (1996)
3. M. Grötschel, A. Löbel, M. Völker: *Optimierung des Fahrzeugumlaufs im Öffentlichen Nahverkehr*. ZIB-Berlin, Preprint SC 96-8 (1996)
4. A. Buchwald: *Heuristiken für die Fahrzeugumlaufplanung im ÖPNV*. Diplomarbeit, Technische Universität Berlin (1994)
5. C. Oliva Seidel: *Fahrzeugumlaufplanung durch Dantzig-Wolfe-Dekomposition: Implementierung eines parallelen Verfahrens*. Diplomarbeit, Technische Universität Berlin (1995)

Effiziente Kommissionierung von Glückwunschkarten

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

Kooperation: Herlitz AG, Berlin

Beschreibung der Forschungsarbeit: In einem Kommissionierbereich der Herlitz AG, Berlin werden aus verschiedenen Glückwunschkarten bestehende Kundenaufträge zusammengestellt. Die Karten (insgesamt 4000 verschiedene Sorten) lagern in vier Regallagern. Nachdem ein Kommissioniermobil (kurz: Mobil) mit 19 Aufträgen “beladen” worden ist, fährt es auf fest vorgegebenem Kurs an den Regalen entlang und stoppt, sobald es eine Regalposition erreicht, von der aus ein Kundenauftrag von einem Kommissionierer manuell mit einem (oder mehreren) Glückwunschkartengebinde “bestückt” werden muß. Für die Mobile gibt es in der Regel keine Möglichkeit, sich gegenseitig zu überholen. Nach Durchlauf der Rundstrecke werden die fertig kommissionierten Kundenaufträge zur weiteren Bearbeitung an andere Abteilungen weitergeleitet. Die gesamte Auftragsabwicklung im Werk unterliegt komplizierten Reihenfolgebedingungen und einer strikten Zeittaktung. Eingehende Aufträge werden in der Regel am Tag des Auftragseingangs innerhalb weniger Stunden ausgeführt, wobei häufig sehr enge Zeitfenster zu beachten sind. Die Kommissionierung ist u.a. auf die Kapazitäten des Versandzentrums abzustimmen. Bei einer ungleichmäßigen Verteilung der Stoppositionen der einzelnen Mobile entsteht eine Schiefast in der Systemauslastung. Die ersten Fahrzeuge durchlaufen den Fahrkurs relativ schnell, wohingegen die später abfahrenden Fahrzeuge oft stoppen müssen und nachfolgende Fahrzeuge an der Weiterfahrt hindern, da keine Überholmöglichkeiten vorhanden sind. Dadurch ist der Anteil an staubedingten Wartezeiten hoch. Unser Ziel ist es, eine Steuerung des Systems (d. h. Zuweisung von Kundenaufträgen auf Mobile) zu entwickeln, die eine gleichmäßige Auslastung des Systems bei schnellstmöglicher und termingerechter Abarbeitung der Aufträge gewährleistet. In einem ersten Schritt wurde das Problem als binäres lineares Programm modelliert, wobei die Gesamtzahl der von den Mobilien ausgeführten Stopps minimiert wird. Diese binären linearen Programme haben sich als besonders schwierig erwiesen. Es konnte gezeigt werden, daß dieses Problem (selbst in der Offline-Version) zur Klasse der *NP*-schweren Probleme gehört. Wir haben verschiedene Heuristiken implementiert, die auch im Echtzeit-Betrieb einsetzbar sind. Mit Hilfe eines von uns entwickelten Simulationsprogramms haben wir das Verhalten der Heuristiken im Echtzeit-Betrieb verglichen. Wir konnten zeigen, daß bei den momentanen technischen Gegebenheiten keine wesentliche Verringerung der Durchlaufzeit möglich ist. Ferner haben wir untersucht, inwieweit eine Verbesserung der Lösungen möglich ist, wenn man die Reihenfolgebedingungen lockert, die für die Aufträge vorgegeben sind. Eine Analyse des mathematischen Modells soll beweisbare Schranken für eine “optimale” Steuerung liefern.

2.2.15 Optimierungsprobleme in der Telekommunikation

Dimensionierung des E-Plus Mobilfunknetzes

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

Kooperation: E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Das Projekt ist eine Kooperation mit der E-Plus Mobilfunk GmbH, einem der drei Mobilfunkanbieter in Deutschland. Im Rahmen dieser Kooperation entwickeln wir ein Tool zur Unterstützung des Dimensionierungsprozesses für das physikalische Netz bei E-Plus.

Da die Unterhaltung des physikalischen Netzes mit hohen Kosten verbunden ist, ist die Entwicklung eines möglichst kostengünstigen Netzes, das Anforderungen wie Ausfallsicherheit gerecht wird, von primärer Bedeutung. Das Problem läßt sich folgendermaßen definieren.

Gegeben ist ein Bedarf zwischen je zwei Knoten des Netzwerkes (jeder Knoten repräsentiert eine Stadt in Deutschland). Wir wollen für jede mögliche Kante (jede Kante repräsentiert eine Verbindung zwischen zwei Städten) aus einer diskreten Menge von möglichen Kapazitäten eine Kapazität auswählen, so daß das Netz (i) kostenminimal ist und (ii) den Bedarf unter folgenden Nebenbedingungen erfüllt: Eine Verbindung zwischen Städten kann verschiedene Medien, z.B. Mietleitungen der Deutschen Bundespost oder Richtfunkssysteme verschiedener Frequenzen nutzen, d.h. das Netz enthält möglicherweise parallele Kanten. Desweiteren soll das Routen des Bedarfs (a) zur Vermeidung technischer Probleme auf längenbeschränkten Wegen erfolgen und (b) höchstens einen zuvor bestimmten Prozentsatz des Bedarfs pro Weg erlauben. Schließlich sollen die gewählten Kapazitäten ein gewisses Maß an Ausfallsicherheit garantieren, d.h. bei Ausfall einer Kante oder eines Knotens sollen die Kapazitäten so ausgewählt werden, daß ein vorgegebener Prozentsatz des Bedarfs umgeleitet werden kann. Eine Lösung besteht aus den gewählten Kapazitäten für jede Kante, sowie den Pfaden zur Erfüllung des Bedarfs in allen Ausfallsituationen.

Unsere Modellierung lehnt sich an die von M. Stoer und G. Dahl [1] an. Wir formulieren das Problem als ein gemischt-ganzzahliges lineares Programm und beschreiben die zugehörigen Polyeder durch gültige Ungleichungen. Aufgrund der großen Zahl von entstehenden Ungleichungen dekomponieren wir das Problem in ein sogenanntes 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 so erhaltenen Lösungen des Master LPs geben eine untere Schranke für die Kosten eines solchen Netzes. Dieses Verfahren in Kombination mit Heuristiken, die schnell eine "gute" zulässige Lösung berechnen, ermöglicht es, eine worst-case Gütegarantie für die

von uns bestimmten Lösungen zu geben.

Eine lauffähige Version unseres Programms ist mittlerweile bei E-Plus installiert und wird zur Planung des physikalischen Netzes eingesetzt. Gegenwärtig entwickeln wir Erweiterungen des obigen Modells zur Verbesserung der Routings und zur Verbesserung der “Implementierbarkeit von Ausfallsicherheit”.

Literatur

1. M. Stoer, G. Dahl: *A polyhedral approach to multicommodity survivable network design*. Numerische Mathematik **68** 149–167 (1994)

Frequenzzuweisung in Mobilfunknetzen

Bearbeiter: R. Borndörfer, A. Eisenblätter, M. Grötschel, A. Martin

Kooperation: E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf)

Beschreibung der Forschungsarbeit: Mobile Telefone, auch Handies genannt, erfreuen sich in Deutschland wachsender Beliebtheit. Das bedarfsgerechte Betreiben der Mobilfunknetze ist mit immer größeren Herausforderungen verbunden. Ein wichtiges Problem, das sogenannte Frequenzzuweisungsproblem, wird vom ZIB zusammen mit der Firma E-Plus Mobilfunk GmbH bearbeitet.

Stationäre Antennen bieten für einen bestimmten Bereich, Zellen genannt, Zugang zum Mobilfunknetz. In Abhängigkeit vom geschätzten Gesprächsaufkommen wird für jede Zelle bestimmt, wieviele Frequenzen ihr zuzuordnen sind. Das Problem besteht darin, jeder Zelle den vorgegebenen Bedarf an Frequenzen zuzuweisen, wobei eine Reihe von Nebenbedingungen einzuhalten und die Gesamtinterferenz im Netz zu minimieren ist.

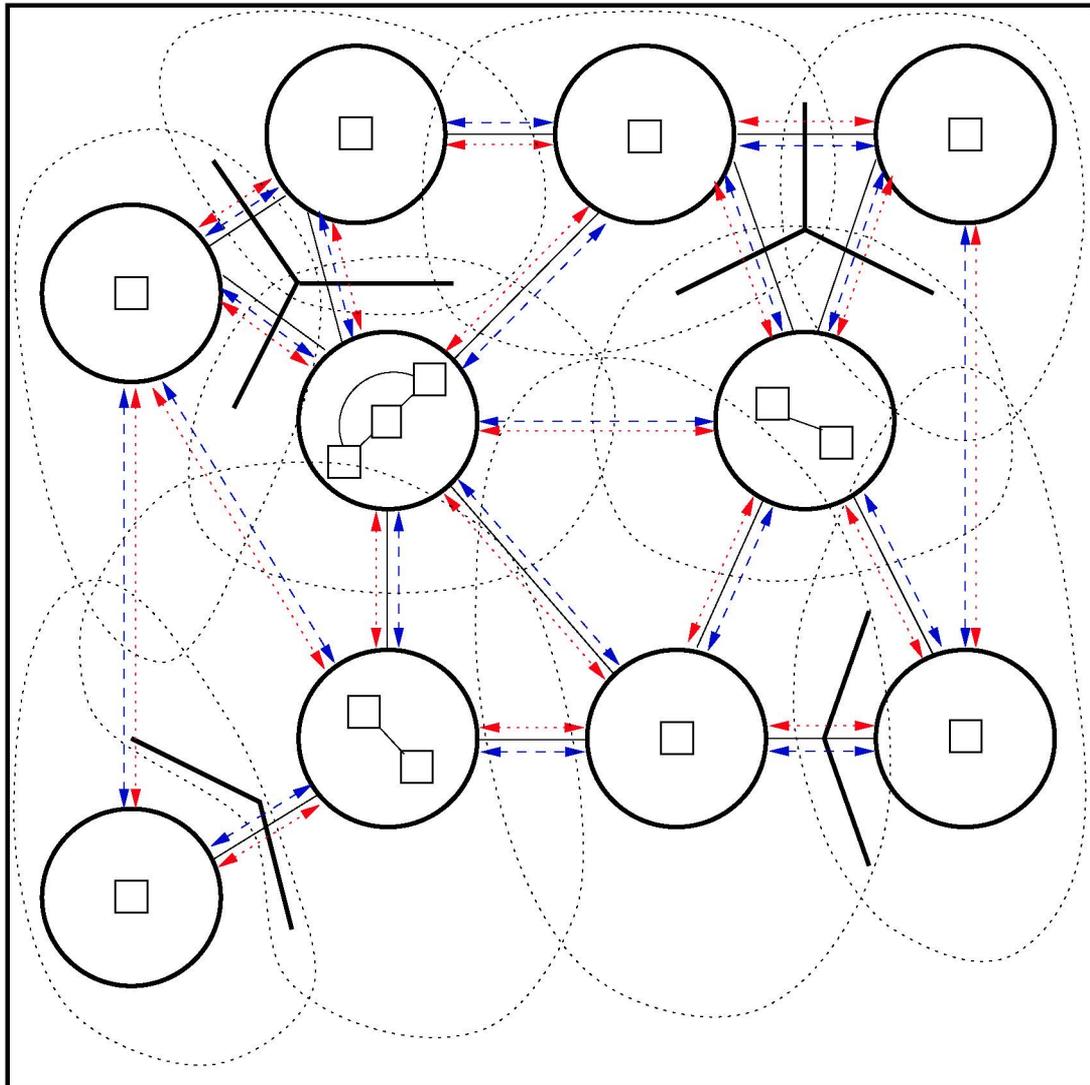
Das Mobilfunknetz wird als Graph modelliert. Zellen werden durch die ihrem Bedarf entsprechende Anzahl Knoten repräsentiert. Jedem Knoten ist genau eine Frequenz aus einem vorgegebenen Spektrum zuzuweisen. Jeder Kante sind 3 Werte zugeordnet, die folgendermaßen interpretiert werden:

- (a) die minimalen Distanz, die bei der Zuweisung der Frequenzen an die inzidenten Knoten einzuhalten ist;
- (b) die erwartete Interferenz, falls die inzidenten Knoten dieselbe Frequenz erhalten;
- (c) die erwartete Interferenz, falls den inzidenten Knoten benachbarte Frequenzen zugewiesen werden.

Ein zulässiger Frequenzplan hält alle Mindestabstände laut (a) ein. Unter den zulässigen Plänen sind solche mit minimaler Gesamtinterferenz gemäß (b) und (c) zu bestimmen.

Im ersten Teil des Projektes wurden auf der Basis zweier mathematischer Modelle verschiedene schnelle Heuristiken entwickelt und evaluiert, die zulässige Frequenzpläne mit geringen Interferenzen berechnen. Für Probleme kleiner und mittlerer Größe können bereits sehr gute Ergebnisse erzielt werden.

Ein Schwerpunkt der künftigen Arbeit wird in der Entwicklung von Verfahren zur Berechnung unterer Schranken für die Gesamtinterferenz liegen.



Schematische Darstellung eines Mobilfunknetzes

Approximation von Überlaufströmen in Systemen mit selektiver Trunk-Reservation für heterogene Quellen

Bearbeiter: M. Brandt

Kooperation: A. Brandt (Wirtschaftswissenschaftliche Fakultät, Humboldt-Universität zu Berlin), FTZ der Deutschen Telekom AG (Darmstadt)

Förderung: Dieses Projekt wird durch die Arbeitsgemeinschaft industrielle Forschung e.V. unter der Projektträgerschaft des BMBF sowie durch die Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Wir betrachten einen Übertragungskanal in einem breitbandigen Mehrdienstnetz (B-ISDN). Dem Kanal wird eine Überlagerung einer festen Anzahl unterschiedlicher Verkehrsströme mit unterschiedlichen Intensitäten, Bandbreitenanforderungen und mittleren Belegungs-dauern angeboten. Die Verkehrsströme nutzen den Kanal gemeinsam bei selektiver Trunk-Reservation-Strategie, d.h. eine ankommende Forderung wird abgewiesen, wenn die bei Ankunft noch verfügbare freie Kapazität des Kanals kleiner als eine vorgegebene vom Forderungstyp abhängige Schranke ist. Selektive Trunk-Reservation ist eine einfach zu installierende und effektive Kontrollmethode in modernen Telekommunikations-Netzwerken. Ein großer Vorteil der selektiven Trunk-Reservation-Technik ist ihre relativ große Insensivität gegenüber Veränderungen von Parametern der ankommenden Verkehrsströme.

Das beschriebene System kann als ein Bediensystem modelliert werden, wobei die Anzahl der Bediener der Kapazität des Kanals entspricht. Am System kommen verschiedene Typen von Forderungen entsprechend Poisson-Prozessen mit typabhängigen Intensitäten an. Eine ankommende Forderung wird akzeptiert, wenn bei Ankunft höchstens eine vom Forderungstyp abhängige Anzahl von Bediengeräten belegt ist, sonst wird sie abgewiesen (selektive Trunk-Reservation-Strategie). Eine akzeptierte Forderung von festem Typ belegt eine feste Anzahl von Bediengeräten entsprechend der Bandbreitenanforderung dieses Typs. Die Bedienzeiten einer akzeptierten Forderung sind exponentiell verteilt mit typabhängigen mittleren Bedienzeiten. Die abgewiesenen Forderungen eines festen Typs bilden den individuellen Überlaufstrom dieses Typs, der auf ein Bediensystem mit unendlich vielen Bediengeräten geleitet wird.

Ist die Anzahl der unterschiedlichen Typen von Forderungen nicht zu groß, so erhält man die individuellen Blockierungswahrscheinlichkeiten für die einzelnen Typen von Forderungen durch Lösung der Balance-Gleichungen für die stationären Anzahlen von Forderungen der einzelnen Typen im System. Im allgemeinen sind Approximationen der individuellen Blockierungswahrscheinlichkeiten und der individuellen Überlaufströme (z.B. durch Interrupted-Poisson-Prozesse) von Interesse.

Literatur

1. A. Brandt, M. Brandt, H. Pohl: *Zwischenbericht zum Thema "Approximation der Überlaufströme bei Systemen mit selektiver Trunk-Reservation für heterogene Quellen"*. TELEKOM AG FTZ, Darmstadt (1995)
2. S. Röhl: *Untersuchungen zu Überlaufströmen und zur Optimalität der trunk reservation in Bedienmodellen*. Diplomarbeit, Humboldt-Universität zu Berlin (1995)

Routing in ATM-Netzwerken

Bearbeiter: A. Martin

Kooperation: G. Dahl (Universität Oslo, Norwegen),
M. Stoer (Telenor Research, Norwegen)

Förderung: Das Projekt wurde durch Telenor Research, Norwegen gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: ATM (Asynchronous Transfer Mode) ist ein Transportverfahren für Breitbandnetze und wird allgemein als die Netzwerk-Technologie der Zukunft eingeschätzt. Netze, die unter ATM-Technologie laufen, besitzen sehr hohe Flexibilität und können Kapazitäten auf Anfrage bereitstellen, beispielsweise für Videokonferenzen oder Computersimulationen. Ein ATM-Netz basiert auf den Übertragungskanälen des zugrundeliegenden physikalischen Netzes. Die Knoten des physikalischen Netzes bilden die sogenannten Digital Cross Connects (DCCs), und jede Verbindung 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, ausgedrückt in Mb/s (Megabits per second). 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 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, wobei alle Anforderungen unter Einhaltung der Kapazitäten der Express-Leitungen bedient werden müssen. Darüber hinaus ist eine Zielfunktion, die die Installationskosten für die Express-Leitungen und die Routing-Kosten der Anforderungen widerspiegelt, zu minimieren. Wir haben zur Lösung dieses Problems einen polyedrischen Ansatz entwickelt. Nach Modellierung des Problems als ganzzahliges lineares Programm haben wir die LP-Relaxierung durch eine Reihe neuer gültiger und facetten-definierender Ungleichungen verschärft. Die Separierung dieser Ungleichungen bildet den Kern unseres Branch-&-Cut Algorithmus. Wir sind in der Lage einige realistische Beispiele aus Norwegen mit bis zu 200 Express-Leitungen optimal zu lösen. Für größere Instanzen können wir garantieren, daß unsere Lösung höchstens um 8% vom Optimalwert abweicht.

Literatur

1. G. Dahl, A. Martin, M. Stoer: *Routing through virtual paths in layered telecommunication networks*. Research Note N 78/95, Telenor Research and Development, Kjeller, Norway (1995)

Dimensionierung von ACD-Systemen mit Zwangsansage und ungedul- digen Kunden

Bearbeiter: M. Brandt

Kooperation: A. Brandt (Wirtschaftswissenschaftliche Fakultät, Humboldt-Universität zu Berlin), Siemens AG, Abteilung Private Netze (München)

Förderung: Dieses Projekt wurde durch die Senatsverwaltung für Wissen-
schaft und Forschung gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: ACD steht für Automatic Call Dis-
tributor. Wir betrachten das folgende ACD-System, das aus einer Gruppe von s Agenten und einer endlichen Anzahl von Warteplätzen besteht: Am System kommen Anrufe von außerhalb gemäß einem Poisson-Prozeß an. Ein anrufender Kunde, der keinen freien Warteplatz vorfindet, geht verloren. Ist ein Warteplatz frei, so belegt der Kunde einen Warteplatz und erhält eine Ansage fester Dauer durch das System. Falls ein Agent nach dieser Ansage frei ist, so wird der Kunde durch einen der Agenten bedient, sonst beginnt der Kunde zu warten. Die War-
tedisziplin ist FCFS. Aber die Kunden sind ungeduldig, d.h., wenn die virtuelle Zeit, die ein Kunde auf Bedienung zu warten hätte, eine zufällige Zeit (maxi-
male Geduld) überschreitet, so geht der Kunde verloren. Die maximale Geduld kann einer wirklichen Geduld des Kunden oder einem speziellen Management des ACD-Systems für jene Kunden entsprechen, deren Wartezeit eine akzeptable Dauer überschreitet, z.B. werden diese Kunden durch spezielle Agenten bedient oder auf ein anderes ACD-System umgeleitet. Die Bedienungszeiten durch die Agenten sind exponentiell verteilt. Die folgenden Performance-Größen sind von Interesse:

1. Die Verlustwahrscheinlichkeit, d.h. die Wahrscheinlichkeit, daß ein anrufender Kunde keinen freien Warteplatz vorfindet,
2. die Abbruchwahrscheinlichkeit, d.h. die Wahrscheinlichkeit, daß ein akzeptierter Kunde aufgrund seiner Ungeduld verloren geht,
3. die bedingte Wartezeitverteilung eines akzeptierten Kunden vom Eintritt in das System bis zu seiner Bedienung unter der Bedingung, daß er bedient wird.

Das System kann durch ein 2-Knoten-Seriennetz mit zustandsabhängigen An-
kunftsdaten beschrieben werden, wobei der erste Knoten aus einem Bediensystem mit unendlich vielen Bediengeräten besteht, von denen die Kunden bei Akzep-
tanz eine konstante Bedienzeit (Ansage) erhalten, und der zweite Knoten ein Bediensystem mit s Bediengeräten und unendlichem Warteraum darstellt, wobei die wartenden Kunden ungeduldig sind, das heißt sie gehen verloren, wenn die Wartezeit die zufällige maximale Geduld überschreitet.

Literatur

1. A. Brandt, M. Brandt: *Bericht zum Thema "ACD-Systeme III"*. Siemens AG, München (1995)

2.2.16 Statistische Modellierung von Ursache–Wirkungsbeziehungen

Projection Pursuit Verfahren

Bearbeiter: J. Polzehl

Kooperation: B. Grund (University of Minnesota, St. Paul, USA), S. Klinke (HU–Berlin, SFB 373)

Förderung: Das Projekt wurde durch die Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung und den SFB 373 der DFG gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Der Begriff “Projection Pursuit” 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 dar, die in der Lage sind, den “curse of dimensionality” zu überwinden.

In Polzehl (1995) wird ein auf Projection Pursuit Ideen basierender Zugang zur nichtparametrischen Diskriminanzanalyse entwickelt. 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 (1995) 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 Grund & Polzehl (1996) Bias–korrigierte Bootstrap Bandweitenselektoren vorgeschlagen, die sich durch optimale asymptotische Raten und akzeptables empirisches Verhalten auszeichnen.

Literatur

1. B. Grund, J. Polzehl: *Bias–corrected bootstrap bandwidth selection*. Technical Report 611, School of Statistics, University of Minnesota.
2. P. Hall, S.N. Lahiri, J. Polzehl: *On bandwidth choice in nonparametric regression with both short– and long–range dependent errors*. Erscheint in: *Annals of Statistics*.
3. P. Hall, J. Polzehl: *On Fractal Like Properties of Boolean Models*. Erscheint in: *Annals of Statistics*.
4. S. Klinke, J. Polzehl: *Exploratory projection pursuit*. In: W. Härdle, S. Klinke, B.A. Turlach (eds.): *Xplore an interactive statistical computing environment*. Springer–Verlag, 203–226 (1995)
5. J. Polzehl: *Projection Pursuit Discriminant Analysis*. *Computational Statistics & Data Analysis*, **20** 141–157 (1995)

Modellwahl und Genauigkeitsaussagen in nichtlinearen heteroscedastischen Regressionsmodellen

Bearbeiter: J. Polzehl

Kooperation: O. Bunke, B. Droge (Humboldt–Universität zu Berlin, Sonderforschungsbereich 373)

Förderung: Das Projekt wurde durch die Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung und den SFB 373 der DFG gefördert.

Beschreibung der Forschungsarbeit: Lineare und nichtlineare Regressionsmodelle werden auf vielen Gebieten bei der Analyse experimenteller Daten zur Beschreibung des Zusammenhanges zwischen Variablen eingesetzt. Im Normalfall ist es nicht bekannt, ob ein spezielles Regressionsmodell die unbekannt wahre Regressionsfunktion hinreichend gut beschreibt. Die Analyseresultate können stark vom gewählten parametrischen Modell abhängen.

Aus diesem Grund sollte eine sorgfältige Auswahl des Regressionsmodells, basierend auf Kenntnissen und Erfahrungen aus dem Anwendungsgebiet sowie auf statistischen Methoden, erfolgen. Dies schließt die Suche nach nichtlinearen Transformationen der Beobachtungen oder geeigneten Varianzmodellen mit dem Ziel einer verbesserten Modellierung ein. Innerhalb dieses Projektes werden Strategien für eine datenabhängige Auswahl geeigneter nichtlinearer Regressionsmodelle untersucht.

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.

Zur Einschätzung der Genauigkeit von Parameterschätzungen, Vorhersagen und Kalibrationsergebnissen werden Konfidenz-, Vorhersage- und Kalibrationsintervalle in heteroscedastischen nichtlinearen Regressionsmodellen untersucht. Die entwickelten Intervalle basieren auf modernen Resamplingmethoden (Bootstrap). Damit kann, im Gegensatz zu traditionellen Methoden, auf einschränkende Modellannahmen weitgehend verzichtet werden. Zu beiden Punkten sind umfangreiche Programmentwicklungen erfolgt. Die Arbeiten sind eng mit Forschungsprojekten des Sonderforschungsbereiches 373 “Quantifikation und Simulation Ökonomischer Prozesse” an der HUB verknüpft. Hier wird die von uns entwickelte Methodik bei der Analyse volkswirtschaftlicher Daten eingesetzt.

Mögliche weitere Anwendungsbereiche existieren vor allem im Bereich der pharmazeutischen, chemischen und biotechnologischen Forschung.

Literatur

1. O. Bunke, B. Droge, J. Polzehl: *Selection of Models and Confidence Intervals in Heteroscedastic Nonlinear Regression*. Erscheint in: ASA 1995 Proceedings of the Biopharmaceutical Section.
2. O. Bunke, B. Droge, J. Polzehl: *Model Selection, Transformations and Variance Estimation in Nonlinear Regression*. Eingereicht bei: Biometrics.
3. O. Bunke, B. Droge, J. Polzehl: *Splus Tools for Model Selection in Nonlinear Regression*. Eingereicht bei: Journal of Computational and Graphical Statistics.
4. M. Neumann, J. Polzehl: *Simultaneous Bootstrap Confidence Bands in Nonparametric Regression*. Eingereicht bei: Journal of Nonparametric Statistics.

3 Wissenschaftliche Dienstleistungen

Neue Wege der wissenschaftlichen Informationsversorgung: Bedingungen, Chancen und Risiken

Bearbeiter: M. Grötschel, J. Lügger

Kooperation: U. Zimmermann (Technische Universität Braunschweig)

Projektbeschreibung: Das wissenschaftliche Publizieren hat eine historische Wasserscheide erreicht. Durch verschiedene schnell und gleichzeitig ablaufende Prozesse ist das sensible System der Versorgung mit wissenschaftlicher Literatur derzeit gefährdet. Mit der "explosiv anschwellenden Informationsmenge" trifft eine "finanzielle Budgetkrise an Bibliotheken" zusammen, die durch "ständig wachsende Zeitschriftenpreise" verschärft wird. Andererseits transformieren überall verfügbare digitale Netze, preiswerte Server mit Speichern im Bereich mehrerer Gigabytes, Laserdrucker, leistungsfähige Lichtsatz- und Grafiksoftware unsere Welt von einer, in der nur einige Verlage wissenschaftliche Arbeiten drucken und verteilen konnten, in eine, in der praktisch jeder selbst drucken und auch die Verteilung von Artikeln, Büchern und Skripten etc. zu geringen Kosten und über große Entfernungen hinweg offerieren kann.

A. Odlyzko von AT&T Bell Labs hat die Bedingungen des wissenschaftlichen Publizierens in einer umfassenden Arbeit analysiert [6]. Er sagt den nahenden Tod der wissenschaftlichen Journale voraus, sieht jedoch in den neuen elektronischen Technologien eher Chancen als Risiken. Verleger und Bibliotheken sehen sich aber vor große Herausforderungen gestellt, ebenso die Wissenschaften mit ihrer Standardpraxis des Begutachtens und Referierens. Alle am Prozeß Beteiligten sind sich einer "Krise in der traditionellen Informationsversorgung" mehr oder weniger bewußt [1] [2] [3]. In den mathematischen Fachbibliotheken Deutschlands stehen Abbestellungen von Zeitschriften in erheblichem Umfang an [7]. Das Papier hat als traditionelles Publikationsmedium offenbar seine "Systemgrenzen" erreicht. Es ist außerdem für die Publikation eines breiteren Spektrums wissenschaftlicher Ergebnisse wenig geeignet, zu dem heute in der Mathematik und den Naturwissenschaften auch Software, Datensammlungen, Visualisierungen, etc. gehören.

Das zentrale Problem der wissenschaftlichen Informationsversorgung ist derzeit: "Wie können Informationsflut und gleichzeitiger Informationsmangel bewältigt werden?". Eine These der Überlegungen dieses Projekts ist, daß die Antwort darauf in einem "Übergang in die elektronische Welt" liegt [4] [5]. Völlig neue Formen der wissenschaftlichen Kommunikation müssen und können gefunden werden, effizientere und auch kostengünstigere. Die verschiedenen Arbeiten untersuchen die Bedingungen, die Chancen und Risiken des anstehenden strukturellen Wandels. Sie diskutieren anhand von einfachen Modellen verteilter Informationssysteme auch technische und ökonomische Aspekte des Übergangs. Die Diskussion ist na-

turgemäß vom Standpunkt der Wissenschaften aus geführt, insbesondere aus der Sicht der Mathematik. Der Strukturwandel wird jedoch alle beteiligten Gruppen einbeziehen: Bibliotheken, Verleger, Fachinformationszentren und – nicht zuletzt – die Wissenschaftler der verschiedensten Fachrichtungen als die eigentlichen Produzenten der Information. Um ihn zu meistern, werden neue Formen der Kooperation notwendig, zwischen den verschiedenen Fachdisziplinen und auf allen Ebenen – lokal, national und auch international.

Literatur

1. M. Grötschel, J. Lügger: *Die Zukunft wissenschaftlicher Kommunikation aus Sicht der Mathematik*. Spektrum der Wissenschaft, 3/1995 39–43
2. M. Grötschel, J. Lügger: *Wissenschaftliche Kommunikation am Wendepunkt: Bibliotheken im Zeitalter elektronischer Netze*. Zeitschrift für Bibliothekswesen und Bibliographie (ZfBB) 42/3, (1995); ZIB–Berlin, TR 95–01 (1995)
3. M. Grötschel, J. Lügger, U. Zimmermann: *Wissenschaftliche Kommunikation am Wendepunkt? Zwänge, Krisen und Chancen aus Sicht der Mathematik (Kurzfassung)*. Proc. VCH Bibliothekartreffen, Verlag Chemie, Weinheim (1995); ZIB–Berlin, TR 95–08 (1995)
4. M. Grötschel, J. Lügger: *Aufbau elektronischer Informations- und Kommunikationsstrukturen*. W. Neubauer (Hrsg.): Proc. Deutscher Dokumentartag 1995, 26.-28. Sept., Fachhochschule Potsdam; Deutsche Gesellschaft für Dokumentation, Frankfurt 1995, 13-58 und GMÖOR Newsletter 3/4 1995, 24-66; ZIB–Berlin, TR 95–10 (1995)
5. M. Grötschel, J. Lügger: *Neue Produkte für die digitale Bibliothek: die Rolle der Wissenschaften*. Erscheint in: Symposion “Die unendliche Bibliothek”, Verlag Harrassowitz (1996)
6. A. Odlyzko: *Tragic Loss or Good Riddance? The impending demise of traditional scholarly journals*. Intern. J. Human-Computer Studies (früher Intern. J. Man-Machine Studies); gekürzte Fassung in Notices Amer. Math. Soc., January 1995
7. T. Winter, U. Zimmermann: *Zur Entwicklung des Zeitschriftenbestandes an mathematischen Fachbibliotheken*. DMV–Mitteilungen 1/1995, p. 34–42

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: Im Rahmen der Aktivitäten des DMV-Projektes “Fachinformation” haben die DMV und das ZIB im Dialog mit allen Kooperationspartnern ein umfassendes Konzept für ein elektronisches Informations- und Kommunikationssystem in der Mathematik entwickelt. Dieses sieht den Aufbau eines dezentralen elektronischen Informationsangebots vor [1] [2]. Die Wissenschaftler als Produzenten und als Nutzer wissenschaftlicher Information rücken in das Zentrum. Sie stellen ihre Ergebnisse im Internet freizügig zur Verfügung. Umgekehrt haben sie freien Zugriff auf die Ergebnisse ihrer Kollegen. Sie sehen die Internet-Informationssysteme als ein wichtiges Instrument für eine aktuelle, kostengünstige und effiziente Informationsversorgung in den Wissenschaften an. Die Fachbereiche haben sich auf der Konferenz der Mathematischen Fachbereiche (26.5.1995 in Berlin) und dem Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultätentag (9.–10.6.1995 in Halle) eindeutig für ein solches Projekt ausgesprochen.

Wie ist der gegenwärtige Stand der Nutzung elektronischer Information und Kommunikation in der Mathematik in Deutschland?

- Fachbereiche, Forschungsinstitute, aber auch die Informationsversorger der Mathematik, wie wissenschaftliche Bibliotheken und Verlage sowie das FIZ Karlsruhe, haben mit dem Aufbau eigener Informationsserver im Internet begonnen. Inzwischen verfügen fast alle mathematischen Fachbereiche in Deutschland über eigene WWW-Server (Anfang 1996 gab es 65 Server). Daneben haben auch die DMV, mehrere Fachgruppen der DMV, Sonderforschungsbereiche und Verbundprojekte eigene Server aufgebaut.
- Die WWW-Server enthalten bereits vielfältige Informationen. Dazu gehören unter anderem Preprints, Vorlesungsskripte, Studieninformationen, Mitarbeiterverzeichnisse. Die Server sind vielfach aus Initiativen einzelner Mitarbeiter und Studenten in den Fachbereichen entstanden. Die Fachinformationsbeauftragten aus dem DMV-Projekt “Fachinformation” haben in vielen Fachbereichen die Koordinierung der elektronischen Information und Kommunikation in den Fachbereichen übernommen.

- Die Server sind unterschiedlich strukturiert, das Informationsangebot ist unterschiedlich weit ausgebaut. Die Suche nach Informationen ist oft zeitraubend, mühselig und nicht immer erfolgreich. Obwohl zum Beispiel inzwischen mehr als 2.500 Preprints auf den Servern nachgewiesen und teilweise als Volltext angeboten werden, kann das Angebot auch hier keineswegs als vollständig oder systematisch bezeichnet werden. Im Rahmen des DMV-Projektes “Fachinformation” wurden Ansätze für eine im wesentlichen einheitliche Strukturierung der Server entwickelt.
- Der Fachbereich Mathematik der Universität Osnabrück hat experimentell untersucht, mittels des Internet-Werkzeugs Harvest die mathematischen Preprints auf den WWW-Servern der Fachbereiche zu erfassen und absuchbar zu machen. Das ist als ein erster Test anzusehen, um geeignete Tools für die Suche in verteilten Datenbeständen zu schaffen.
- Die Universität Bielefeld bereitet im Auftrag der DMV die Herausgabe eines universellen elektronischen Journals, der *Documenta Mathematica*, vor. Hierzu hat sie die technischen und organisatorischen Voraussetzungen geschaffen.
- Die DMV hat 1995 mit dem Aufbau eines eigenen Informationsservers begonnen. Die Fachgruppen der DMV (Computeralgebra, Optimierung, Scientific Computing, Stochastik) bedienen sich zunehmend der elektronischen Information und Kommunikation. Sie betreiben elektronische Diskussionsforen und haben eigene Informationssysteme im World Wide Web aufgebaut.
- Das ZIB hat den Server der *International Mathematical Union* (IMU) aufgebaut. Zudem steht am ZIB ein Server zur Ankündigung des *International Congress of Mathematicians 1998* (ICM 1998) in Berlin zur Verfügung. Mit den *Math-Net Links to the Mathematical World* wurde ein Verzeichnis mathematikrelevanter Ressourcen in aller Welt bereitgestellt, siehe dazu auch die gesonderte Projektbeschreibung.
- Die Redaktion des “Zentralblatt für Mathematik” hat mit dem Aufbau des Servers der *European Mathematical Society* (EMS) begonnen. Dort stehen u.a. eine Reihe elektronischer Journale im Volltext zur Verfügung.

Die DMV und das ZIB sehen die Förderung der elektronischen Information und Kommunikation in Deutschland als wichtigen Beitrag zur wissenschaftlichen Infrastruktur an. Sie haben deshalb – auch außerhalb ihrer eigenen Wissenschaften – intensiv für die Akzeptanz dieser auf die “Datenautobahnen im Wissenschaftsbereich” abzielenden Ideenwelt geworben, auch im Kreis von Bibliothekaren und Dokumentaren (siehe auch den Beitrag “Neue Wege der wissenschaftlichen Informationsversorgung”). Um diese langfristigen Ziele zu erreichen, ist jedoch eine

intensive Kooperation aller Beteiligten notwendig. DMV, DPG, GDCh und GI haben deshalb eine Kooperationsvereinbarung abgeschlossen [2].

Für den weiteren raschen Ausbau des verteilten Informationssystems für die Mathematik hat die DMV eine Förderung des Vorhabens durch das BMBF angestrebt. Das Referat Fachinformation des BMBF sieht das Projekt aber in dieser Form als nicht förderungsfähig an und setzt für eine Förderung elektronischer Dienste prinzipiell die Entgeltlichkeit der Leistungen voraus. Die DMV bemüht sich gegenwärtig um das Einwerben anderer Fördermittel für das Vorhaben.

Literatur

1. W. Dalitz, M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber: *Verteiltes Informationssystem für die Mathematik – Kurzfassung eines Projektplans der DMV*; ZIB-Berlin, TR 95-06 (1995)
2. M. Grötschel: *Neues zum Thema IuK und Kooperationsvereinbarung zwischen der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV), der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG), der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) und der Gesellschaft für Informatik (GI) zur elektronischen Information und Kommunikation*; DMV Mitteilungen 3/1995, p. 6-11

Das Projekt “Fachinformation” 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, Heidelberger Akademie der Wissenschaften

Förderung: Das Projekt wurde durch das BMBF gefördert.

Projektbeschreibung: Das 1992 im Rahmen des “Fachinformationsprogramm der Bundesregierung 1990–1994” begonnene Projekt “Fachinformation” (voller Titel “Verbesserung des benutzerorientierten Zugriffs auf fachspezifische Online-Datenbanken und CD-ROM für Mathematische Institute der Bundesrepublik Deutschland”) der DMV wurde Ende 1995 erfolgreich abgeschlossen.

An dieser Stelle sollen die wichtigsten Ergebnisse des Projektes kurz dargestellt werden:

- Das Projekt führte zu einer flächendeckenden Nutzung der Online- und CD-ROM-Datenbanken in den mathematischen Fachbereichen in Deutschland. Vor Beginn des Projektes hatten nur einige wenige Fachbereiche Datenbanken genutzt.
- Die Nutzung der Datenbanken MATH und CompactMATH hat sich im Projekt vervielfacht. 1992 nutzten die Fachbereiche die Datenbank MATH im Durchschnitt jeweils für 269 DM pro Monat. Dieser Wert stieg im Jahr 1993 auf 668 DM, im Jahr 1994 auf 948 DM und erreichte pro Monat im Jahr 1995 schließlich 1417 DM. Die Nutzung der Datenbanken differiert aber noch zwischen den verschiedenen Fachbereichen und auch innerhalb der Fachbereiche.
- Die Nutzung der Online-Datenbanken im Projekt konzentrierte sich stark auf die Datenbank MATH. Der Anteil dieser Datenbank an der Gesamtnutzung machte mehr als 85 % am Gesamtumfang der Nutzung aller im Rahmen des Projekts vom FIZ Karlsruhe angebotenen Datenbanken (MATH, MATHDi, COMPUSCIENCE, PHYS und CONF) aus.
- Die Anzahl der Fachbereiche, die die Datenbanken intensiv nutzen (mehr als 20.000 DM p.a.), hat im Projekt stark zugenommen. Die Nutzung der Datenbanken in den neuen Ländern wurde weit in das Projekt hinein durch Umstrukturierungen und langandauernde bauliche Provisorien erheblich beeinträchtigt, hat sich aber im weiteren Verlauf des Projekts deutlich konsolidiert und stabilisiert.

- Die Schaffung der Funktion des Fachinformationsbeauftragten in den Fachbereichen hat sich als eine notwendige Voraussetzung für die Akzeptanz und eine hohe Nutzung der Datenbanken erwiesen. Die Fachinformationsbeauftragten haben sich sehr engagiert für die Verbreitung des “Know How” der elektronischen Information und Kommunikation in ihren Institutionen eingesetzt.
- Die Akzeptanz der Datenbanken hängt wesentlich von den technischen Rahmenbedingungen ab. Wichtig für eine breite Akzeptanz elektronischer Fachinformation ist die Verfügbarkeit des Mediums vom Arbeitsplatz aus. In allen Fachbereichen, die am DMV-Projekt “Fachinformation” teilgenommen haben, sind Recherchen in der Online-Datenbank MATH an allen vernetzten Arbeitsplatzcomputern möglich. Die Inhouse-Datenbank CompactMATH ist allerdings – bis zur Fertigstellung eines stabilen und brauchbaren Retrievals unter dem Betriebssystem UNIX – nur an Einzelplätzen oder in PC-Netzen zugänglich.
- Die dezentrale Nutzung der Datenbanken erfordert einen einfachen und unkomplizierten Zugang zu den Datenbanken (automatischer Verbindungsaufbau, Paßwortschutz, etc.). Im Rahmen der Projekte “Fachinformation” der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG) und der DMV haben verschiedene Fachbereiche hier eigene, brauchbare Software-Lösungen entwickelt, die von allen Fachbereichen verwendet werden.
- Die Datenbank CompactMATH bietet neben einem befehlsorientierten auch einen menügesteuerten Retrievalmodus zur Auswahl. Das ist für die Online-Datenbank bisher nicht der Fall. Der Einsatz der Retrievalsprache Messenger ist gerade für den gelegentlichen Nutzer deutlich komplizierter.
- Einführungs- und Schulungsveranstaltungen sowie individuelle Nutzerunterweisungen vermittelten mehr als 3.500 Wissenschaftlern und Studenten Kenntnisse in der Nutzung elektronischer Fachinformation. Eine weitergehende Integration der Datenbanknutzung in die Lehre, etwa durch Aufnahme dieses Stoffes in die Prüfungsordnung, ist für die Mathematik nicht sinnvoll und wird von allen Fachbereichen als nicht notwendig angesehen. Schulungen und Einführungsveranstaltungen in die Datenbanknutzung haben sich zunehmend auf persönliche Beratungen und Unterweisungen verlagert.
- Die Fachinformationsbeauftragten haben zusätzlich umfangreiches Lehr- und Übungsmaterial entwickelt und zumeist auch auf den Informationsservern der Fachbereiche bereitgestellt, so daß man sich Kenntnisse in der Datenbanknutzung auch “online” im Selbststudium aneignen kann.

- Die Bedeutung der Datenbanken MATH und CompactMATH ist gegenüber der gedruckten Ausgabe des “Zentralblatt für Mathematik” deutlich gestiegen. Gegenwärtig sind die Datenbanken in vielen Fachbereichen die tragenden Säulen elektronischer Fachinformation.
- Der Wert der Datenbanken liegt – nach Meinung der Fachinformationsbeauftragten – in der schnellen Einarbeitungsmöglichkeit in ein neues Gebiet. Die Datenbanken gestatten allerdings keinen Überblick über den aktuellen Stand der Forschung.
- Die Fachbereiche betonen, daß das Werkzeug Datenbanken auch in der Zukunft wichtig und notwendig sein wird. Die Datenbanken müssen aber in Zukunft in das gesamte Spektrum elektronischer Informationen eingebettet werden.
- Das Projekt ist zu einem Forum des Meinungsaustausches der Nutzer und der Datenbankanbieter geworden. Die Datenbanken konnten nicht zuletzt wegen des konstruktiven Dialogs zwischen den Datenbankanbietern und den Nutzern wesentlich verbessert werden (neue Version der CD-ROM CompactMATH, elektronische Bereitstellung der bisher nicht elektronisch erfaßten Jahrgänge des Referateorgans “Zentralblatt für Mathematik”, Aktualitätsverbesserung der Online-Datenbank MATH). Die Datenbanken bedürfen nach wie vor einer ständigen Verbesserung. Besonders vordringlich ist die Bereitstellung einer stabilen UNIX-Version für die CD-ROM CompactMATH.
- Die Datenbankanbieter haben sich – im Dialog mit der DMV – für eine neue, nutzerfreundliche Preispolitik für das Zentralblatt entschieden. Die neue Preisregelung betrifft die gedruckte Ausgabe des Zentralblatt, die Online-Datenbank MATH und die CD-ROM Datenbank CompactMATH. Die Preisregelung sieht vor, daß neben der Grundgebühr für die Bereitstellung der Daten ein einheitlicher – relativ geringer – Aufpreis für jedes weitere Medium hinzukommt. Insbesondere sind die jährlichen Kosten für die Nutzung der Online-Datenbank MATH unabhängig vom Nutzungsumfang und damit haushaltstechnisch kalkulierbar.

Das DMV-Projekt fiel in eine Zeit des Umbruchs der elektronischen Fachinformation. Während sich die elektronische Fachinformation in den Fachbereichen zu Beginn des Projekts im wesentlichen auf die Nutzung von Datenbanken und electronic Mail beschränkte, gehören zu Ende des Projektes neben den Datenbanken auch die Internet-Dienste sowie elektronische Bibliotheksdienste zum alltäglich benutzten Werkzeug der Wissenschaftler und Studenten. Die ständige Verbesserung der Ausstattung der Arbeitsplätze bezüglich Hardware und Vernetzung in den Fachbereichen hat zudem die Nutzung elektronischer Fachinformation weiter beschleunigt.

Die Gleichsetzung von elektronischer Fachinformation und Datenbanken hat sich im Projekt vor allem durch die schnelle Entwicklung des Internet und der Informationssysteme, insbesondere des World Wide Web, als zu eng erwiesen.

Um diesen Entwicklungen Rechnung zu tragen, wurde im Rahmen des DMV-Projekts das Konzept des verteilten Informationssystems für die Mathematik geboren. Die Weiterentwicklung dieses Konzepts und erste praktische Schritte sind separat dargestellt.

Die im Rahmen des Projekts veranstalteten acht Workshops haben wesentlich zur Meinungsbildung in den Fachbereichen und zu neuen Aktivitäten der Fachbereiche auf dem Gebiet der elektronischen Information und Kommunikation beigetragen. Zu den Workshops, die im Jahr 1995 stattgefunden haben, verweisen wir auf den Abschnitt "Tagungen und Veranstaltungen des ZIB".

Literatur

1. M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber: *Abschlußbericht zum DMV-Vorhaben "Verbesserung des benutzerorientierten Zugriffs auf fachspezifische Online-Datenbanken und CD-ROM für Mathematische Institute der Bundesrepublik Deutschland"*.

Elektronische Informationsangebote für die Mathematik

Bearbeiter: W. Dalitz, G. Heyer, G. Skorobohatyj

Kooperation: E. Grosse (AT&T Bell Labs, New Jersey, USA), Fachgruppen “Numerische Software”, “Computeralgebra”, “Optimierung” (SIGOPT) und “Stochastik” von GI, GAMM und DMV

Projektbeschreibung: Im eLib-Server bietet die Abteilung Software-Information seit 1989 Mathematikern und Anwendern mathematischer Verfahren in aller Welt den kostenfreien Zugriff auf mathematische Forschungssoftware, Datensammlungen und Dokumente aus allen Bereichen der Mathematik an. Dieses Informationsangebot wurde 1995 weiter ausgebaut und an die rasante Entwicklung der Werkzeuge im Internet angepaßt. Durch den Einsatz eines Hyper-G-Servers sind bessere Orientierungs- und Suchmöglichkeiten entstanden, auch für Benutzer, die über WWW-Clients zugreifen. Insbesondere erschließt eine Testimplementierung die umfangreiche und vielschichtige NetLib durch eine hierarchische, d.h. auf Unterverzeichnisse einschränkbare Suche, die mehrere Suchbegriffe wie Autor, GAMS-Klassifikation etc. berücksichtigen kann.

Weiterhin wurden die Online-Sammlungen MP-TESTDATA und MATHPROG von Testdaten beziehungsweise Programmen für den Bereich Kombinatorische Optimierung ausgebaut.

Der Einsatz des Mailverteilers *Majordomo* und seine Intergration in den eLib-Server erlaubte die Einrichtung und effiziente Betreuung von moderierten elektronischen Diskussionslisten für eine Reihe von Fachgruppen, deren Beiträge automatisch in absuchbaren Archiven abgelegt werden. Der eLib-Server realisiert hier erste Konzepte des *Verteilten Informationssystems für die Mathematik*, das an anderer Stelle beschrieben ist.

Die Anzahl der Zugriffe auf die eLib über E-Mail, Telnet und Gopher ging dagegen stark zurück. Weiterhin verfolgen wir jedoch das Prinzip der “Offenheit bzgl. des Zugriffs” im Internet, so daß alle Angebote mit möglichst allen etablierten Zugriffswerkzeugen erreichbar sind, auch wenn sich Darbietung und Bedienung systembedingt deutlich unterscheiden.

Informationsserver für die International Mathematical Union (IMU) und den International Congress of Mathematicians Berlin 1998 (ICM'98)

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

Kooperation: Executive Committee der International Mathematical Union (IMU), Organisationskomitee des International Congress of Mathematicians Berlin 1998 (ICM'98)

Projektbeschreibung: Der Informationsserver der *International Mathematical Union* (IMU), der über die Aktivitäten der IMU (Kongresse, Komitees, Fields Medaillen, etc.) informiert und insbesondere als globaler Einstiegspunkt zu elektronischen mathematischen Informationsangeboten in aller Welt gedacht ist, wurde 1995 weiter ausgebaut.

Der Informationsserver für den 1998 in Berlin stattfindenden *International Congress of Mathematicians* (ICM'98) wurde ebenfalls weitergeführt. Hier finden sich das aktuelle Programm und weitere Informationen über den Kongreß.

Beide Server wurden auf der Basis der Hyper-G-Server-Software aufgebaut, die über eine integrierte Datenbank verfügt. Dadurch sind alle Dokumente automatisch nach Titel, Stichworten und Volltext suchbar und die Hyperlinks bleiben auch bei Umstrukturierungen des Servers konsistent.

In einem separaten Teilprojekt entstand eine Sammlung elektronischer mathematischer Ressourcen im *World Wide Web*, die *Math-Net Links to the Mathematical World*. Diese Sammlung enthält u.a. Hyperlinks auf elektronische mathematische Journale, Preprint- und Software-Archive und zu mathematischen Gesellschaften, Fachgruppen und Institutionen. Dieser Dienst soll in den zentralen IMU-Server integriert werden, sobald bestimmte Maintenance-Fragen geklärt sind. Eine erste Implementierung zielt ab auf die Überwachung der Aktualität und Konsistenz der Verweise und auf die Koordination der WWW-orientierten Listen mit Hyper-G-basierten Dokumentmengen, die eine hierarchische Suche erlauben.

Hyper-G: Tutorials und Lehrbuch

Bearbeiter: W. Dalitz, G. Heyer

Projektbeschreibung: Wegen der überzeugenden Konzepte von Hyper-G hat das ZIB den mathematischen Fachbereichen empfohlen, diese Server-Software für den Aufbau der lokalen Informationsserver im Rahmen des verteilten Informationssystems für die Mathematik zu verwenden. Im Gegensatz zu den wichtigsten anderen WWW-Servern stellt Hyper-G die Struktur des Informationsangebotes den Erstellern und Lesern graphisch dar und bietet viele weitere Orientierungshilfen. Alle Dokumente werden automatisch in einer integrierten Datenbank nach Titeln, Stichworten und Volltext indexiert und sind damit suchbar. Dieselbe Datenbank verwaltet auch die Hyperlinks zwischen den Dokumenten, und bewahrt deren Konsistenz bei Umstrukturierungen, so daß es keine "hängenden Links" mehr gibt.

Um die Fachbereiche mit der Benutzung von Hyper-G vertraut zu machen, veranstaltete die Abteilung Software-Information bereits 1994 ein Tutorial zu Hyper-G und 1995 zwei weitere Tutorials. Damit alle Interessenten in Zukunft einen leichten Einstieg in Hyper-G haben, wurden die Unterlagen dieser Tutorials zu einer umfassenden Einführung in die Benutzung des Systems erweitert und im dpunkt-Verlag als Lehrbuch veröffentlicht. Auch die Erfahrungen beim Aufbau der eigenen, umfangreichen Informationsangebote für das ZIB und die *International Mathematical Union (IMU)* mit Hyper-G sind in dieses Buch eingeflossen. Das Buch beschreibt anschaulich und ausführlich, wie die Benutzer mit den Hyper-G-Clients Harmony und Amadeus browsen und wie sie ihr eigenes hypermediales Informationsangebot im Hyper-G-Server aufbauen können. Es ist auch online auf dem Hyper-G-Server des ZIB verfügbar und enthält eine CD-ROM mit den Hyper-G-Clients Harmony und Amadeus.

Das ZIB ist auch dem Ende 1995 gegründeten Hyper-G-Konsortium beigetreten, das die weitere Entwicklung von Hyper-G und darauf basierender Software koordiniert. Auch schon vor der Gründung des Konsortiums hat die Abteilung Software-Information die Konzepte von Hyper-G und deren Implementierung intensiv mit den Hyper-G-Entwicklern diskutiert und viele Verbesserungsvorschläge gemacht.

Literatur

1. W. Dalitz, G. Heyer: *Hyper-G, das Internet-Informationssystem der 2. Generation*. dpunkt Verlag, Heidelberg (1995) ISBN 3-920993-14-4

Berliner Regionales Testbed (BRTB) – Projekt

Bearbeiter: H. Busch, S. Schulz

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

Projektbeschreibung: Das Projekt “Berliner Regionales Testbed (BRTB)” hat das Ziel, die drei Berliner Universitäten, das Hahn-Meitner-Institut Berlin (HMI), das Institut für Software und Systemtechnik (ISST) der Fraunhofer-Gesellschaft und das ZIB untereinander breitbandig zu vernetzen und neue Anwendungen, die einen Bedarf an hohen Übertragungsraten haben, einzusetzen. Im ZIB werden von den insgesamt fünf Anwendungen zwei realisiert, die in den folgenden Abschnitten beschrieben werden.

Als physikalische Basis für dieses Wissenschafts-Breitbandnetz dient das landeseigene Behördennetz, welches seit 1993 vom Landesamt für Informationstechnik (LIT) geplant und realisiert wird. Auf Grund eines Beschlusses des Berliner Senats sowie einer Verwaltungsvereinbarung zwischen LIT und ZIB im Auftrag der jeweiligen Senatsverwaltungen stellt das Land Berlin pauschal zehn Glasfasern aus diesem Netz den Wissenschaftseinrichtungen zur kostenlosen Nutzung 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 für die Laufzeit des Projekts (Oktober 1994 bis September 1996) vom DFN-Verein (BMBF) gestellt.

Im Laufe des ersten Halbjahres 1995 wurden die Netzgeräte an allen Standorten (mit Ausnahme des ISST, die erheblichen Baumaßnahmen in der Mitte Berlins verzögerten die termingerechte Fertigstellung des LWL-Anschlusses) in Betrieb genommen. Auf einer Festveranstaltung an der Humboldt-Universität zu Berlin am 28. Juni 1995 wurde das BRTB-Netz feierlich vom Staatssekretär der Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung, Herrn Prof. Dr. Erich Thies, in Betrieb genommen.

Im zweiten Halbjahr 1995 wurde der gesamte Datenverkehr zwischen den Berliner Universitäten, dem HMI und dem ZIB ausschließlich über das BRTB-Netz durchgeführt, mit seiner Bandbreite von 155 Mb/s ist es das leistungsfähigste Landesnetz in Deutschland.

Literatur

1. Hubert Busch, Sandra Schulz, Günther Kroß: *Aufbau des Berliner Breitbandnetzes für die Wissenschaft*. ZIB-Berlin, TR 95-5 (1995)

Netzverteilte Visualisierung

Bearbeiter: J.C. Bachmann, H.C. Hege, U. Schwarz, H. Stüben

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, FB Physikalische Ingenieurwissenschaft).

Förderung: Das Projekt wurde durch das BMBF und den DFN-Verein im Rahmen des Projektes “Berliner Regionales Testbed (BRTB)” gefördert.

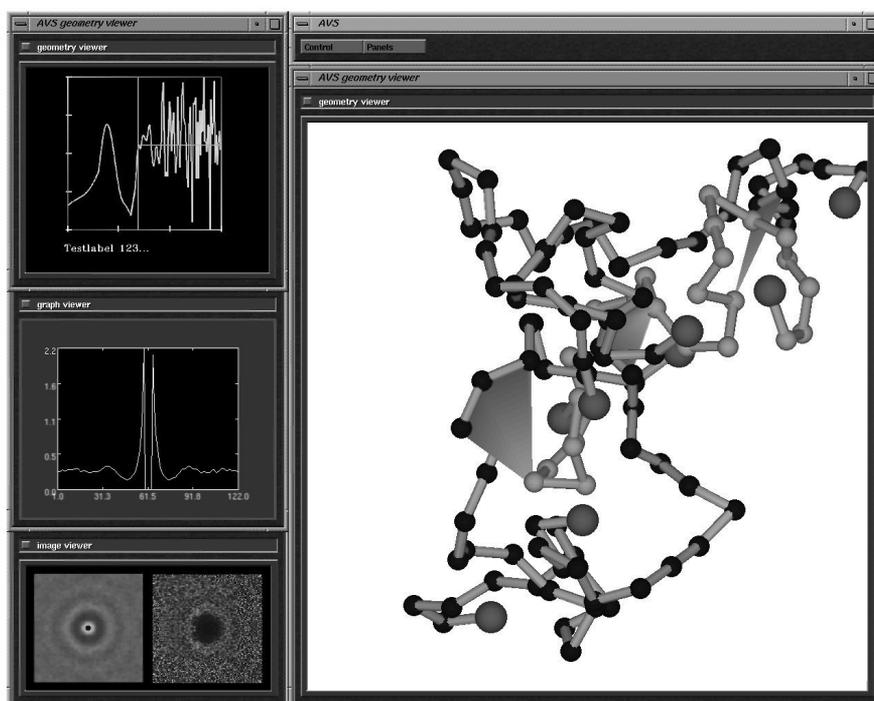
Projektbeschreibung: Ziel dieses Projektes ist es, für Forschungsdisziplinen die mit Simulationsexperimenten arbeiten, geeignete Visualisierungswerkzeuge zu schaffen. Hierbei soll insbesondere der Einsatz von Ressourcen im Netz ermöglicht werden, die Nutzung des Breitbandnetzes selbst für den Anwender aber weitgehend transparent bleiben.

Die Projektarbeiten umfaßten u.a. folgende Punkte:

- *Exemplarische Visualisierungsumgebungen*
Für verschiedene wissenschaftliche Anwendungen wurden auf der Basis von erweiterbaren Visualisierungssystemen (AVS, Iris Explorer, Oorange,...) beispielhafte Simulations- und Visualisierungsumgebungen erstellt. Diese Umgebungen werden in den beteiligten Anwendungsprojekten im täglichen Arbeitsprozeß eingesetzt.
- *Interaktive Simulationssteuerung*
Es wurden Werkzeuge geschaffen, die erlauben, aus verbreiteten Visualisierungspaketen, wie AVS und Explorer heraus in eine remote laufende Simulation einzugreifen, etwa um Parameter zu verändern oder sich über den Stand der Simulation zu informieren.
- *Echtzeit-MPEG-Encoding*
Zur visuellen Kontrolle und Steuerung von Simulationen ist eine praktisch verzögerungsfreie Kompression und Bewegtbildübertragung erforderlich. Aus diesem Grund wurde für den Parallelrechner Cray T3D ein Algorithmus entwickelt, der es ermöglicht, Komprimierungsraten von weit über 25 fps (frames per second) zu erreichen und auch hochaufgelöste Filme, z.B. solche in HDTV-Format, zu komprimieren.
- *Objektorientierte Visualisierungsumgebung*
Am Sonderforschungsbereich 288 “Differentialgeometrie und Quantenphy-

sik” der Technischen Universität Berlin entsteht derzeit ein neues objekt-orientiertes Visualisierungssystem (Orange) für wissenschaftliche Zwecke. Zur netzverteilten Visualisierung mit diesem Paket wird entsprechende Software entwickelt.

- *Video-Aufzeichnungsservice*
Spezial-Hardware und -Software, wie sie zur hochqualitativen Aufzeichnung von digitalen Bildsequenzen auf Videoband erforderlich ist, wird im Netz bereitgestellt. Der Aufzeichnungsservice wird als Dienstleistung des ZIB internen und externen Anwendern zur Verfügung gestellt.
- *Werkzeuge zur Filmbearbeitung*
Das Erstellen von Videofilmen aus digitalem Bildmaterial legt den Wunsch zur Filmbearbeitung (z.B. Texteinblendungen, Bildüberblendungen, usw.) nahe. Dazu wurde ein digitales Schnittstudio, angepaßt auf die speziellen Bedürfnisse der Wissenschaft, entwickelt.



Visualisierungsumgebung für molekulardynamische Simulationsexperimente

Videoaufzeichnung

Bearbeiter: J.C. Bachmann, O. Paetsch, J. Langendorf

Förderung: Das Projekt wurde durch das BMBF und den DFN-Verein im Rahmen des Projektes “Berliner Regionales Testbed (BRTB)” gefördert.

Projektbeschreibung: Das Endprodukt von Visualisierungen sind Einzelbilder und zunehmend auch Filme. Die Filme werden zunächst digital und dann, etwa zu Präsentations- oder Lehrzwecken, auf Videoband gespeichert. Eine Videoaufzeichnung, d.h. eine Übertragung digitaler Bilddaten auf analoge Videoträger, ist daher ein von vielen Wissenschaftlern geforderter Service.

Die bei der Videoerzeugung anfallenden Probleme bestehen in der Verarbeitung riesiger Datenmengen (1 Minute unkomprimierter Videofilm entspricht einem Datenvolumen von ca. 1.8 GByte) sowie der Wandlung digitaler Signale in analoge Videosignale. Um Studioqualität zu erreichen, ist teure Spezialhardware erforderlich, deren Betrieb auch Spezialwissen voraussetzt.

Wesentliche Komponenten des am ZIB angebotenen Videoaufzeichnungsservices sind:

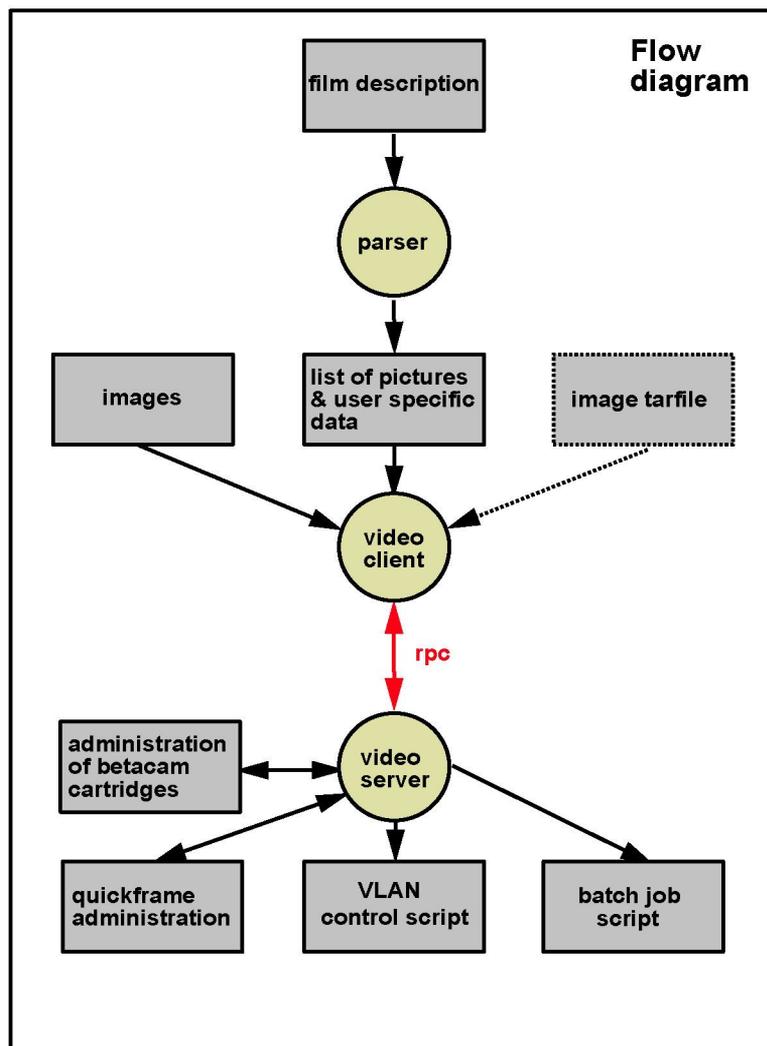
- digitaler Videospeicher (Quickframe)
- VLAN-Steuerung
- Betacam-Recorder
- S-VHS/VHS-Recorder.

Die Videoaufzeichnung genügt folgenden Anforderungen:

- automatische Aufzeichnung digitaler Rasterbilder auf Betacam-, S-VHS- oder VHS-Videokassetten entsprechend einer vom Benutzer erstellten Filmbeschreibung
- keinerlei Belastung des Benutzers durch technische Dinge, wie die Steuerung der beteiligten Videogeräte
- Existenz einer Filmbeschreibungssprache mit einfacher Syntax zur Steuerung des “Schnitts” der einzelnen Bilder zu einem Film
- automatische Verwaltung der Aufzeichnungen auf dem digitalen Bildspeicher und den (Benutzern zugeordneten) Betacamkassetten um einen späteren Zugriff, etwa zum Kopieren bereits erzeugter Sequenzen, zu ermöglichen.

Hat der Benutzer Bilddaten erzeugt und eine Filmbeschreibung erstellt, so bieten sich ihm zwei Möglichkeiten, den Aufzeichnungsservice zu nutzen:

- Start eines “Videoclienten” auf seinem Rechner, der eine Netzverbindung zum Videoserver im ZIB herstellt und die Bilder in den digitalen Videospeicher (Quickframe) am ZIB schreibt
- Übertragung der digitalen Bilddaten in den Archivspeicher des ZIB und dortiger Start des Videoclienten mit der Filmbeschreibung.



Datenfluß der Videoaufzeichnung am ZIB

Objekt-Orientierte Visualisierungsumgebung – Oorange

Bearbeiter: A. Friedrich, U. Schwarz

Kooperation: U. Pinkall, C. Gunn, P. McDonough, D. Oliver, A. Ortmann, K. Polthier (Sfb 288 “Differentialgeometrie und Quantenphysik” der TU Berlin)

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

Projektbeschreibung: Im Rahmen des Berliner Regionalen TestBeds für Breitbandnetze (BRTB) ist unter Mitarbeit des ZIB am SFB 288 der TU Berlin eine objekt-orientierte Visualisierungsumgebung entstanden – Oorange.

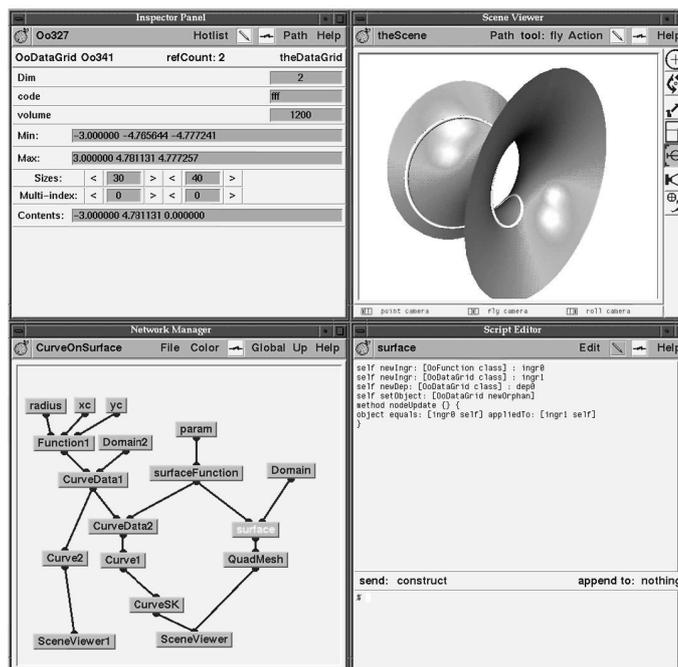
Oorange ist ein Framework für experimentelle Mathematik. Es richtet sich an alle Arbeitsgruppen, die Computer sowohl für mathematische Forschung als auch für Lehre einsetzen. Die Bedürfnisse der computer-basierten experimentellen Mathematik bestimmen in natürlicher Weise den Aufbau von Oorange.

- *Objekt-Orientiertheit*
Mathematische Objekte können in einfacher und angemessener Weise im Computer repräsentiert werden.
- *Interpreter*
Interpretierte Sprachen erlauben es dem Benutzer Ausdrücke auszuwerten, oder allgemeiner Experimente durchzuführen, ohne zeitaufwendiges Compilieren.
- *Dynamisches Laden*
Vom Benutzer entwickelte Algorithmen werden unter minimalem Zeitaufwand zur Laufzeit dem stabilen Kernsystem hinzugefügt.
- *Kommunikationsinfrastruktur*
Eine integrierte Kommunikationsinfrastruktur erlaubt es dem Benutzer sich auf seine mathematische Zielsetzung zu konzentrieren und seine Ergebnisse als fertige *Module*, die dem System hinzugefügt werden können, zu verteilen. Im wesentlichen werden folgende Dienste geboten:
 - *Update* zur Verwaltung der Abhängigkeiten im *Objektnetzwerk*
 - *Inspektion* zum Inspizieren und Editieren jedes im System vorhandenen Objekts
 - *Display* zur Visualisierung und Manipulation von 2D- und 3D-Objekten
 - *Animation* zum automatischen Ablauf von Experimenten
 - *Archivierung* zur Abspeicherung von Ergebnissen zwecks Kommunikation und Wiederverwendung

– *Dokumentation* aller Komponenten (On–line–Hilfe).

Oorange ist in gewissem Sinn eine Sammlung von Werkzeugen die über diese Infrastruktur miteinander kommunizieren. Zu diesen Werkzeugen zählen:

- *Netzwerk–Manager* zur grafischen Darstellung der *Objektnetzwerke*, mit Werkzeugen zum interaktiven Erzeugen und Bearbeiten solcher Objektnetzwerke (s. Abb., unten links)
- *Script–Editor* zum Editieren des zu jedem *Knoten* des Netzwerkes gehörenden (zur Laufzeit interpretierten) Scripts und damit zur Steuerung und Veränderung des Ablaufs von Experimenten (s. Abb., unten rechts)
- *Inspektor–Manager* zum Inspizieren und Verändern jedes zum aktuellen Knoten gehörenden Objekts (s. Abb., oben links)
- *2D– und 3D–Viewer* zur Darstellung von geometrischen Objekten und Bildern (s. Abb., oben rechts).



Typische Oorange Session

Einheitliche Datenumgebung auf heterogenen Rechnernetzen

Bearbeiter: G. Maierhöfer, P. Müller

Kooperation: BRTB-Projekt *hotcon* (Fraunhofer Gesellschaft – FhG, Institut für Software- und Systemtechnik (ISST)), lose Zusammenarbeit: Rechenzentrum der Universität Stuttgart (RUS), FU Berlin

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

Projektbeschreibung: Mit dem Ausbau des Berliner Hochgeschwindigkeits-MAN im Rahmen des Projektes “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 auseinandersetzen.

Mit Hilfe eines *verteilten Dateisystems* kann ein einheitlicher Namensraum und damit ein einheitlicher Zugriff auf Programme und Daten für den Nutzer angeboten werden. Im Rahmen des BRTB-Projekts *Einheitliche Datenumgebung auf heterogenen Rechnernetzen* wird mit dem Einsatz des *Andrew File System* (AFS) ein solcher einheitlicher Namensraum zur Verfügung gestellt.

Für das Berliner Breitbandnetz für die Wissenschaft (*Berlin Research Area Information Network – BRAIN*) wurde im Berichtszeitraum die *Berliner Software Distribution* (BeSD) eingerichtet. BeSD weitet das im Rechenzentrum der Universität Stuttgart entwickelte Prinzip der Software-Distribution auf den Berliner Raum aus.

In Berlin wird durch *BRAIN* eine Vielzahl wissenschaftlicher Einrichtungen mit einem Hochgeschwindigkeitsnetzwerk verbunden. Die dadurch erreichte “enge” Kopplung dieser Einrichtungen ermöglicht eine kooperative Bereitstellung von Software.

Im Rahmen von BeSD wird Software von globaler Bedeutung (z. B. GNU-Software) berlinweit zur Verfügung gestellt. Die Software wird komplett installiert (*ready-to-run*), so daß ein Nutzen bei allen beteiligten Einrichten sofort nach der Installation möglich ist. Die einzige Voraussetzung hierfür ist das einmalige Einrichten des Zugriffs auf die Software in BeSD.

Ziel ist es, daß sich möglichst viele Einrichtungen an der Bereitstellung von Software in BeSD beteiligen. Nur so kann der derzeit anfallende Aufwand zur Softwarepflege und die damit verbundenen Kosten reduziert werden.

Zur Zeit bietet BeSD ausschließlich Software aus dem UNIX Bereich an. Um auch dem großen Potential an PC-Nutzern diesen Dienst anzubieten, wurden verschiedene Anbindungsmöglichkeiten von PC-Software getestet. Das Angebot von BeSD soll 1996 um PC-Software erweitert werden.

Effektiver Einsatz von Höchstleistungsrechnern in der Materialforschung

Bearbeiter: S. Bartmann, H. Stauffenberg

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

Projektbeschreibung: Die Schwerpunkte dieses Projektes sind:

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

Ein besonderer Arbeitsschwerpunkt im Berichtszeitraum lag bei der wissenschaftlichen und programmtechnischen Beratung bei der Benutzung der FEM-Programme ABAQUS/Standard, ABAQUS/Explicit und ADINA auf den CRAY-Rechnern des ZIB.

Ferner wurde für die BAM weitere Software aus dem Bereich FEM einschließlich Pre- und Postprocessing ausgewählt, bereitgestellt und dokumentiert. In enger Abstimmung mit Mitarbeitern der BAM wurden auch neue Fortran- und C-Programme für die CRAY-Rechner erstellt bzw. portiert und optimiert.

Auch die Einrichtung und Betreuung von UNIX-Arbeitsplätzen und ihrer Integration in ein TCP/IP-Netzwerk waren Bestandteil der Kooperation. Zur optimalen Nutzung der Rechnerkapazitäten am ZIB wurden insbesondere verteilte Anwendungen zwischen CRAY- und Arbeitsplatzrechnern entwickelt, u.a. unter Einsatz der Visualisierungssoftware EnSight.

Bei der Nutzung des lokalen Netzwerks, bei Fragen des Zugangs zu den CRAY-Rechnern und ihren speziellen Eigenschaften und der Aufteilung von Arbeitsschritten auf Rechner mit sehr unterschiedlichen Eigenschaften war eine intensive Beratung einzelner Mitarbeiter der BAM von besonderer Bedeutung.

Kooperationsprojekte mit der (GMD – Forschungszentrum Informatik GmbH)

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.

Netzwerktechnologie und Hochleistungsprotokolle

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

Kooperation: GMD-FOKUS (Berlin), Fachbereich NTHP, Delphi-Projekt (Universität Patras/ Griechenland)

Förderung: Das Projekt wird durch DeTeBerkom gefördert.

Projektbeschreibung: Auf der Basis des in den Vorjahren im Rahmen des BERKOM-Projektes “BERMATE” entwickelten ATM-Netzadapters wurde in einem neuen Projekt “BATES-Berkom ATM Technology Evaluation System” ein ATM-Testsystem konzipiert und implementiert.

Mit Hilfe des Bates-System wird dem Netzwerk-Operator die Möglichkeit gegeben, den Status eines komplexen ATM-Netzwerkes zu kontrollieren und Fehlerfälle wie Protokollfehler im ATM-, AAL-, Signalisierungs- oder OAM-Protokoll festzustellen und gegebenenfalls Fehlersituationen aufzuzeichnen oder Verletzungen von Qualitätsparametern (QoS) auf der Übertragungsstrecke anzuzeigen.

Das Testsystem besteht aus vier Hardware-Modulen im VMEbus-Format mit eigener Busplatine, und ist über ein schnelles SBus-Hostinterface mit (320 Mbit/s DMA-Transferrate) mit einer SUN-Sparc Station 20 oder einer VMEbus Sparc CPU (Betriebssystem Solaris) gekoppelt. Der Einsatz von FPGA-Bausteinen und die Multiprozessor-Architektur (Signalprozessoren TMS320C40 auf jedem Modul) von Bates ermöglichte die Implementierung von Test- und Meßfunktionen sowie der ATM/AAL Protokollbearbeitung in programmierbarer, vom Host ladbarer, Hardware.

Das im Projekt Bermate entwickelte TAXI-Netzinterface für 100/140 Mbps wurde, um Meßdaten vorzubearbeiten, für den Bateseinsatz modifiziert. Zusätzlich wurde in Kooperation mit dem Delphi-Projekt ein SDH/SONET Interface für 155 Mbps (optisch und elektrisch) entwickelt.

Das Bates-Testsystem ermöglicht Echtzeit-Analysen von ATM- und AAL-Schicht; dabei können Bandbreiten-Statistiken von bis zu 1024 VPI/VCI-Kanälen er-

stellt werden oder mit Hilfe von Testzellen, die Zeitstempel und Sequenznummern beinhalten, Zellverluste oder -verzögerungen ermittelt werden. Darüber hinaus können auch AAL5 PDU-Längenstatistiken erzeugt werden sowie CRC-Fehler festgestellt und statistisch ausgewertet werden. Durch die Aufzeichnung von ATM-Zellströmen im Hauptspeicher des Hosts, sind typische Verkehrscharakteristiken erfaßbar und eine spätere Wiedergabe zu Testzwecken mit Zelljitter kleiner 1µs möglich.

Zur einfachen Erzeugung von Testszenarien, d.h. Erzeugung, Veränderung, Auswertung und Darstellung von Zellströmen wurde für die Hostrechner ein modularer Satz von C-Programmen implementiert.

Durch die benutzerfreundliche graphische Bedienoberfläche (Tcl/Tk-basierend) ist das System übersichtlich und leicht zu bedienen; die zusätzlich möglichen Echtzeit-Darstellungen von ATM/AAL-Statistiken ergeben Bildschirmausgaben von hoher Aussagekraft.

TANGRAM

Bearbeiter: Gerd Schürmann (Leiter — GMD-FOKUS), Klaus-D. Engel (ZIB)

Projektbeschreibung: Ziel, des durch die DeTeBerkom geförderten Kooperationsprojektes der GMD-FOKUS mit dem ZIB, ist die Erstellung und Erprobung verteilter, integrierter Plattformen für multimediale Telekommunikation, Management, Mobilität und Sicherheit.

Bis vor kurzem wurde die Entwicklung anwendungsunterstützender Infrastruktur in den Bereichen verteilter Systeme, Netzwerk- und Dienstmanagement, Telekommunikation, Mobilität, Sicherheit und Datenbanken unabhängig voneinander durchgeführt. Bedingt durch die Möglichkeiten neuer Dienste sowie die Erwartungen und Anforderungen von potentiellen Diensteanbietern, Dienstnutzern und Netzwerkbetreibern, ergibt sich jedoch zunehmend die Notwendigkeit der Integration dieser Ansätze. Zudem erlauben und verlangen die vorhandenen und sich abzeichnenden technischen Entwicklungen den Entwurf und die Umsetzung einheitlicher Konzepte für künftige Telekommunikationsanwendungen. Dieser Trend ist international bereits von vielen Industrieunternehmen, insbesondere im Telekommunikationsbereich, erkannt worden. Entsprechende Aktivitäten spiegeln sich wider in der Konvergenz ehemals unabhängiger Modellierungsansätze wie Open Distributed Processing(ODP), Object Management Group (OMG), Telecommunications Management Network (TMN), Intelligent-Network (IN), Telecommunications Information Networking Architecture Consortium (TINA-C) und Universal Personal Telecommunications (UPT).

Schon heute gibt es prototypische Systeme, die diese Zukunftsvision in Teilen demonstrieren. Und diese Prototypen sind auf dem Weg zu Produkten. Jeder, der morgen an dem sich entwickelnden Telekommunikationsmarkt teilhaben will,

muß diese Trends beobachten, analysieren und aufgrund eigener Erfahrungen und Zielsetzungen beeinflussen.

Das Projekt TANGRAM der DeTeBerkom stellt eine Grundlage für den Einsatz dieser zukunftsweisenden Entwicklungen im Bereich der Deutschen Telekom dar. Die Untersuchung und Erprobung bestehender und sich entwickelnder Ansätze relevanter Plattformen ist ein Ziel von TANGRAM. Diese Umgebung besteht aus integrierten objektbasierten Plattformen und soll als Prototyp realisiert werden. Charakteristische Eigenschaften von Telekommunikationsanwendungen in einem offenen Markt künftiger Dienste sind:

- Technologie- und Herstellerunabhängigkeit,
- Interoperabilität zwischen Plattformen verschiedenen Typs,
- Schneller Dienstentwicklung,
- einfache Konfiguration und Bereitstellung,
- Wiederverwendbarkeit und Anpaßbarkeit (auch einzelner Komponenten),
- Skalierbarkeit und Portierbarkeit,
- anpaßbar an individuelle Anforderungen von Nutzern,
- Sicherheit von Diensten,
- Mobilität von Nutzern und Endgeräten.

Die Plattformen setzen diese Konzepte, insbesondere die von TINA-C erarbeiteten, um und bilden dadurch ein Netzwerk kooperierender Teilkomponenten. Dabei werden verfügbare Produkte integriert und Komponenten zur Unterstützung zukünftiger verteilter Telekommunikationsanwendungen entwickelt.

Es werden u.a. aus folgenden Bereichen Produkte betrachtet:

- Anwendungsunterstützung: OMG/OMA, ANSAware, NeXTSTEP, Microsoft OLE,
- Verteilung: OMG/CORBA (Common Object Request Broker Architecture), OSF/DCE (Distributed Computing Environment),
- Telekommunikation und Mobilität: INASoft (Distributed Processing Environment),
- Management: OSIMaDE (BERKOM Managementplattform), HP OpenView, Ericsson TMOS,
- Sicherheit: BERKOM Sicherheitsplattform.

DOC++ — ein Dokumentationssystem für C++

Bearbeiter: R. Wunderling, M. Zöckler, D. Stalling

Projektbeschreibung: Je komplexer die Struktur von Software wird, je mehr Mitarbeiter an einem Softwareprojekt arbeiten und je mehr auf Wiederverwendbarkeit von Software geachtet wird, desto wichtiger wird die Dokumentation von Programmtexten.

Mit DOC++ wurde ein System entwickelt, das speziell auf die Bedürfnisse zur Dokumentation von C++ Klassen ausgelegt ist, gleichzeitig aber auch für die Dokumentation von C-Programmen genutzt werden kann. Wesentliche Merkmale des Dokumentationssystems sind:

- Die Dokumentation wird als Kommentar in den Quellcode aufgenommen.
- Die Dokumentation kann in HTML-Format aus dem Quellcode extrahiert werden. Sie kann somit direkt ins WWW eingebunden werden und mit einem HTML-Viewer als Online-Nachschlagwerk durchsucht werden. Die hierarchische Klassenstruktur läßt sich perfekt auf die Dokumentationsstruktur abbilden.
- Die Dokumentation kann aus dem Quellcode als \LaTeX -Text extrahiert werden. Dadurch kann eine gedruckte Version von hohem Qualitätsstandard erzeugt werden, und die Einbeziehung komplexer mathematischer Ausdrücke in die Dokumentation ist möglich.

DOC++ wurde zunächst hausintern und an der University of Houston eingesetzt. Im Januar 1996 wurde es unter der GNU public licence im WWW weltweit zur Verfügung gestellt.

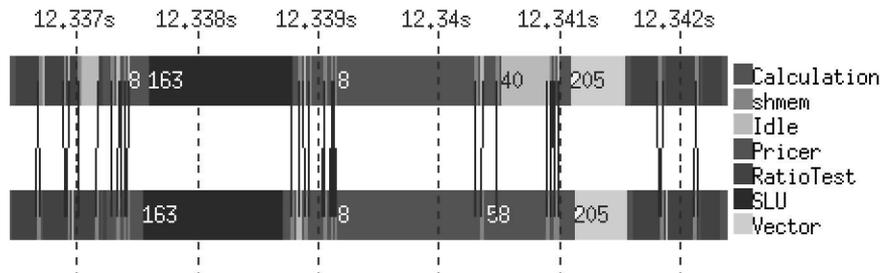
iCC — ein instrumentierendes C++ Frontend

Bearbeiter: R. Wunderling

Kooperation: W. Nagel (KFA Jülich, ZAMM)

Projektbeschreibung: Zur Analyse paralleler Programme reichen die gängigen Hilfsmittel wie etwa Profiler nicht mehr aus. Mit ihnen kann zwar ermittelt werden, in welcher Funktion wieviel Zeit verbraucht wird, es ist jedoch nicht möglich, eine ungünstige Kommunikationsstruktur oder ungleiche Auslastung aufzuspüren. Mit PARvis wurde in der KFA Jülich ein Werkzeug geschaffen, mit dem diese Information für Fortran-Programme gewonnen und grafisch aufbereitet werden kann.

Um PARvis auch für C++ nutzbar zu machen, wurde mit iCC ein entsprechendes C++ Frontend entwickelt. Dieses analysiert ein C++ Programm und fügt in jede gewünschte Funktion oder Kommunikationsaktion eine Registrierung ein, die eine spätere grafische Aufbereitung des parallelen Ablaufes des Programms mit PARvis ermöglicht.



Graphische Darstellung einer Iteration im Simplex-Algorithmus DoPlex auf zwei Prozessoren des Cray T3D Rechners.

Einsatz der Informationstechnik im Museum

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

Kooperation: Deutsches Historisches Museum, Bayerisches Nationalmuseum, Museum für Völkerkunde (Staatliche Museen zu Berlin), Museum für Volkskunde (Staatliche Museen zu Berlin), verschiedene Museen in den neuen Bundesländern (über eine Förderung durch die Robert–Bosch–Stiftung)

Projektbeschreibung: Seit mehreren Jahren wird das am ZIB weiterentwickelte Datenbankprogramm GOS auch von einzelnen großen Museen benutzt. Die Zusammenarbeit ist zum Teil durch direkte Kooperationen mit dem ZIB, zum Teil durch einen Kooperationsvertrag mit dem Institut für Museumskunde der Staatlichen Museen zu Berlin geregelt. Weiterhin gibt es ein von der Robert–Bosch–Stiftung gefördertes Projekt zur EDV–gestützten Inventarisierung in den neuen Bundesländern. Mit dem Deutschen Historischen Museum (DHM) besteht seit September 1991 ein direkter Kooperationsvertrag. Am DHM wird GOS auf etwa 60 zum großen Teil vernetzten PCs unter dem Betriebssystem MS–DOS eingesetzt. Dabei wurden bisher (Januar 1996) etwa 160.000 Objekte nach einem sehr ausführlichen Kategorienschema (ca. 400 Kategorien) inventarisiert (der Gesamtbestand des DHM wird auf ungefähr 600.000 Objekte geschätzt). Seit 1995 werden am DHM auch verstärkt Bilder der Objekte digitalisiert und in die Inventarisationsarbeit integriert. Seit Mitte 1992 gibt es eine intensive Zusammenarbeit mit dem Bayerischen Nationalmuseum in München, welche seit 1995 ebenfalls durch einen direkten Kooperationsvertrag geregelt ist. Im Rahmen dieser Kooperation wurde die gesamte Standortkartei des Bayerischen Nationalmuseums (ca. 160.000 Karteikarten mit durchschnittlich 350 Zeichen pro Karte) in eine GOS–Datenbank überführt. Seit dem Sommer 1994 wird die gesamte Standortverwaltung über diese Datenbank betrieben. 1995 wurde begonnen, auch das bisher manuell geführte Zugangsbuch (Erwerbungs nachweis) auf eine GOS–Datenbank abzubilden. Seit Herbst 1994 läuft am Museum für Volkskunde der Staatlichen Museen zu Berlin ein Projekt zur Erfassung der kompletten Kartei (ca. 200.000 Objekte) durch ABM–Kräfte. Ziel des Projekts ist eine computerunterstützte Vereinheitlichung der vorhandenen Quellen bzw. die Gewinnung von geeigneten Schlagworten aus beschreibenden Texten. Am Museum für Völkerkunde der Staatlichen Museen zu Berlin wird GOS seit 1995 in weiteren Abteilungen (Afrika, Europa, Ostasien, Amerikanische Archäologie) zur Inventarisierung benutzt. Bereits Mitte 1992 wurde gemeinsam mit dem inzwischen aufgelösten Institut für Museumswesen ein Projekt zur computermäßigen Umsetzung eines in der ehemaligen DDR für die meisten Museen verbindlichen Handbuchs zur Inventarisierung begonnen. Durch eine Förderung der Robert–Bosch–Stiftung (bis Februar 1997) konnte dieses Projekt auch im Jahre 1995 fortgeführt werden. Zur Zeit beteiligen sich ungefähr 25 Museen unterschiedlicher Größe (meist ehemalige Regionalmuseen) aus den neuen Bundesländern an diesem Projekt.

4 Rechenzentrum

4.1 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),
- 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.

4.2 Der Berliner Landeshöchstleistungsrechner

Der "Berliner Landeshöchstleistungsrechner" ist ein verteiltes System aus Komponenten für Berechnungen und Datenhaltung. Er besteht zur Zeit aus einem Parallelrechner und einem Vektorrechner mit angemessenen Datenhaltungskomponenten im ZIB sowie den Berliner Anteilen an den Höchstleistungsrechnern des Norddeutschen Vektorrechnerverbundes im RRZN Hannover und an der Universität Kiel. Dieses verteilte System wird durch ein gemeinsames Zulassungsverfahren, ein weitgehend gemeinsames Zugangssystem (NQE) und einheitliche Benutzer- und Projektkennungen zusammengehalten. Alle Komponenten des Landeshöchstleistungsrechners einschließlich des Parallelrechners sind seit ihrer jeweiligen Installation voll ausgelastet. Der Anteil der (ca. 40) vom Zulassungsausschuß empfohlenen Projekte an der Gesamtkapazität betrug 1995 über 90 %, ohne daß die direkt von den Universitäten oder vom ZIB zugelassenen kleineren Projekte dadurch beeinträchtigt wurden. Diese kleineren Projekte dienen der Lehre, der Methodenforschung oder der Vorbereitung von Großprojekten.

Wie in den Vorjahren wurde die Konfiguration im ZIB auch 1995 laufend dem Stand der Technik angepaßt:

- der Vektorrechner Cray Y-MP4D/464 (1,3 GFlops Spitzenleistung, 512 MByte Hauptspeicher) wurde in zwei Schritten durch einen Vektorrechner Cray J932/16-8192 (3,2 GFlops Spitzenleistung, 8 GByte gemeinsamer Hauptspeicher) ersetzt.
- der Parallelrechner Cray T3D SC192-464 wurde im Rahmen einer Kooperation mit der KFA Jülich und dem Hersteller vorübergehend (bis Mitte

1996) von 192 Prozessoren auf 256 Prozessoren (38 GFlops Spitzenleistung, 16,5 GByte verteilter Hauptspeicher) ausgebaut.

- Das im Rahmen des Berliner Regionalen Hochgeschwindigkeitstestnetzes (BRTB) aufgebaute regionale ATM-Netz ging im Frühjahr 1995 in den regulären Produktionsbetrieb.

Die am Jahresende gültige Konfiguration des Berliner Landeshöchstleistungsrechners ist in der Abbildung schematisch dargestellt. Zu den explizit dargestellten Komponenten des Landeshöchstleistungsrechners kommen noch die Berliner Anteile (jeweils 15 Prozent) im Norddeutschen Vektorrechnerverbund: Im Regionalen Rechenzentrum für Niedersachsen (RRZN in Hannover) steht derzeit der leistungsstärkste Vektorrechner im Verbund (Siemens S400/40, 5 GFlops), während die Universität Kiel zwei Vektorrechner in den Verbund eingebracht hat (Cray Y-MP/M92 und Cray J916/16-4096, zusammen 4 GFlops).

Der Übergang zu einem Parallelrechner als leistungsfähigster Komponente des Landeshöchstleistungsrechners hat den Charakter der hier bearbeiteten Projekte deutlich in Richtung auf das eigentliche High Performance Scientific Computing (HPSC) verschoben. Es werden auf dem Parallelrechner ausschließlich Projekte bearbeitet, die mit anderen Hilfsmitteln und den derzeit verfügbaren Algorithmen nicht bearbeitbar sind. In der Regel ist es die Größe der behandelten Modelle, die zu einem realen Hauptspeicherbedarf von weit mehr als 4 GByte führt, während die erzeugten Ergebnisse insbesondere im Bereich der Umweltforschung mehrere TByte langfristigen Speicher belegen. Die Prozessorleistung und die Leistung des Verbindungsnetzwerkes müssen zu diesen Anforderungen in einem ausgewogenen Verhältnis stehen.

Die heutige Konfiguration des ZIB entspricht diesen Anforderungen. Im Rahmen einer Kooperation mit dem HLRZ Jülich und dem Hersteller wurde der ursprünglich mit 192 Prozessoren bestückte Parallelrechner befristet (bis Mitte 1996) auf 256 Prozessoren ausgebaut. Als Gegenleistung stellt das ZIB die Kapazität von 32 Prozessoren dem HLRZ Jülich zur Verfügung. Der Vektorrechner Cray Y-MP wurde wie geplant durch einen Vektorrechner Cray J90 mit 16 Vektorprozessoren ersetzt. Die Konfiguration im ZIB war damit im gesamten Berichtszeitraum eine der größten Rechnerinstallationen in Europa und mit Abstand die größte in Deutschland.

Die Entwicklung neuer Rechnerarchitekturen für den oberen Rand des Leistungsspektrums wird in erster Linie durch drängende Umweltprobleme beschleunigt, die durch die Komplexität der Modelle wesentlich größere Arbeitsspeicher — und damit aber auch entsprechend höhere Rechenleistung als derzeit im ZIB installiert ist — erfordern. Bei den Anwendungen auf dem Parallelrechner des ZIB ist diese Notwendigkeit sowohl im Bereich der Strömungsmechanik, als auch bei den behandelten Stofftransportproblemen klar zu erkennen. Es ist also absehbar, daß der Parallelrechner des ZIB schon 1996 nicht mehr dem dann in der Computerindustrie erreichten technischen Standard entsprechen wird und den Erfordernissen

der Anwender angepaßt werden kann und muß. Die aufgrund dieser Erkenntnis vorgenommene Planung sieht einen Ausbau vor, den der Wissenschaftliche Beirat des ZIB in seiner Beurteilung 1995 als "ausgewogen und sinnvoll" bezeichnet hat. Dabei gelten als Eckdaten für 1996 eine Erhöhung der Rechenleistung und der Hauptspeichergröße gegenüber dem heutigen Stand um einen Faktor drei bis vier und eine Vergrößerung des langfristigen Datenvolumens um einen Faktor fünf bis zehn.

Im Dezember 1995 ist es erfreulicherweise gelungen, durch Bestellung eines Parallelrechners CRAY T3E diese Planung mit den Erfordernissen der Rechenleistung und der Hauptspeichergröße verbindlich zu gestalten.

Das BRTB (Berlin Regional Testbed) war 1995 das schnellste Landesnetz in Deutschland. Die Organisation des Berliner Landesnetzes, die auf den im BRTB geleisteten Vorarbeiten aufbauen soll, ist 1995 nur wenig vorangekommen. Die Ursache hierfür ist vor allem in der schleppenden Bewilligung des Hochgeschwindigkeits-Wissenschaftsnetzes durch den Kabelrat und die erst danach mögliche Festlegung des DFN-Vereins auf eine Haltung gegenüber Landesnetz-Initiativen zurückzuführen.

Die geschilderte Rechnerausstattung des ZIB ist ein technisches Gesamtsystem, in das ein Rechner der HPSC-Leistungskategorie, wie er in den neuesten Empfehlungen des Wissenschaftsrates beschrieben wurde, leicht und besonders kostengünstig eingebettet werden könnte. Betrachtet man diese technischen Voraussetzungen im Zusammenhang mit dem wissenschaftlichen und organisatorischen Umfeld, so bietet sich das ZIB als idealer HPSC-Standort an.

4.3 Software–Ausbau im Berichtszeitraum

Zur Versorgung der Anwendungsbereiche mit den Schwerpunkten

- Theoretische Chemie
- Theoretische Physik
- Ingenieurwissenschaften
- Umweltwissenschaften

wurde das Software–Angebot weiter ausgebaut. Die gesamte bisher auf den Vektorrechnern CRAY Y-MP4D und CRAY Y-MP4E verfügbare Anwendungs-Software konnte für den neuen Vektorrechner CRAY J90 übernommen und um weitere Produkte ergänzt werden. Der Rechner CRAY Y-MP4E wird nur noch als Vorrechner für den Parallelrechner CRAY T3D betrieben. Er wird daher in den Tabellen nicht mehr gesondert aufgeführt. Auf dem Parallelrechner CRAY T3D wurden zusätzliche Werkzeuge für die Programmentwicklung und Optimierung bereitgestellt, um die Portierung weiterer Anwendungen für den Parallelrechner zu unterstützen. Inzwischen stehen auch die ersten Anwendungspakete aus dem Chemie-Bereich für den Parallelrechner zur Verfügung.

Betriebssysteme

Mit dem Austausch des SPARCservers *ufer* und dem Übergang auf das Betriebssystem Solaris 2.3 steht nunmehr auch auf dem Vorrechner *ufer* eine UNIX-Version zur Verfügung, die wie das Betriebssystem UNICOS für den Berliner Landeshöchstleistungsrechner auf UNIX System V Release 4 basiert.

CRAY J90	CRAY T3D	SPARCserver <i>ufer</i>
UNICOS 8.0	UNICOS 8.0 UNICOS MAX 1.2	Solaris 2.3

Compiler

Für die Programmentwicklung stehen Compiler für die Programmiersprachen Fortran 77, Fortran 90, ANSI C und C++ zur Verfügung, wobei jeweils die neuesten Versionen installiert wurden. Die modernen Programmiersprachen Fortran 90 und C++ werden auch auf dem Parallelrechner CRAY T3D zunehmend eingesetzt.

CRAY J90	CRAY T3D	SPARCserver <i>ufer</i>
CF77 6.0	CF77_M 6.0	Sun F77 3.0
CF90 1.0	F90_M 0.1	NAGware f90 2.1
SCC 4.0	SCC_M 4.0 AC 2.6	Sun ANSI C 3.0 GNU C 2.6
C++ 1.0	C++ 1.0	Sun C++ 4.0 GNU C++ 2.6
		Pascal 3.0

Programmierwerkzeuge

Für die Parallelisierung und Optimierung von Anwendungen auf dem Parallelrechner CRAY T3D wurden die Werkzeuge TOP² und PARvis vom Forschungszentrum Jülich (KFA) installiert. Als Message Passing System wurde für den Parallelrechner neben der Cray Shared Memory Library und PVM der neue Standard MPI bereitgestellt.

CRAY J90	CRAY T3D	SPARCserver <i>ufer</i>
CrayTools 1.3	CrayTools 1.3	SPARCworks 3.0
AIT 2.1		AIT 2.1
	FM 1.1	
	MPI 1.4a	
	PARMACS 6.0	
Network PVM-3	MPP PVM-3 Network PVM-3	Network PVM-3
	SHMEM Library	
	TOP ²	
	PARvis	

Numerische Software

Das ZIB hat im Berichtszeitraum gemeinsam mit den drei Berliner Universitäten einen Landesvertrag mit der Numerical Algorithms Group Ltd. (NAG) in Oxford abgeschlossen. Der Vertrag umfaßt die NAG Fortran 77 Library, die NAG Fortran 90 Library, die NAG C Library und die NAG Graphics Library. Auf dem Parallelrechner CRAY T3D und auf dem Vorrechner *ufer* wurden die parallelen Unterprogrammbibliotheken BLACS und ScaLAPACK bereitgestellt.

CRAY J90	CRAY T3D	SPARCserver <i>ufer</i>
CrayLibs 1.2 (BLAS, FFT, LINPACK, EISPACK, LAPACK)	CrayLibs 1.2 (BLAS, BLACS, FFT, LAPACK, ScaLAPACK)	BLAS, BLACS, LAPACK, ScaLAPACK
CERNLIB 93d		CERNLIB 93d
IMSL Parallel Libraries 2.0		
IMSL IDF 1.1		IMSL IDF 1.1
NAG C Library Mark 3		NAG C Library Mark 3
NAG Fortran Library Mark 16	NAG Fortran Library Mark 16	NAG Fortran Library Mark 16
		NAG Fortran 90 Library Release 1
		NAG On-line Supplement

Grafik und Visualisierung

Im Grafikbereich werden für Präsentationsgrafiken weiterhin GKS und X11 sowie die darauf aufbauende NAG Graphics Library und NCAR Graphics eingesetzt.

CRAY J90	SPARCserver <i>ufer</i>
CVT 2.1 (X11R5, Motif, DGL, PEXlib, Tcl, Tk)	OpenWindows 3.3 (X11R5, XView, PEX, XGL)
	Tcl 7.4, Tk 4.0
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
	SuperMongo

Für die Visualisierung von Ergebnissen, die auf dem Landeshöchstleistungsrechner berechnet wurden, stehen auf dem Vorrechner CRAY Y-MP des Parallelrechners die verteilten Visualisierungsumgebungen AVS, EnSight und IRIS Explorer zur Verfügung. Für den Parallelrechner CRAY T3D wurden das Cray Animation Theatre sowie ein parallelisierter MPEG Encoder bereitgestellt. Der parallele

MPEG Encoder ermöglicht es, aus den auf dem Parallelrechner berechneten Ergebnisse in Echtzeit ein MPEG Movie zu erzeugen und über ein schnelles Daten-netz zur Workstation des Benutzers zu übertragen.

CRAY J90	CRAY T3D	CRAY Y-MP	SPARCserver <i>ufer</i>
	Cray Animation Theatre 1.0		
		AVS 5.0	AVS 5.02
EnSight 5.2		EnSight 5.2	
		IRIS Explorer 2.0	
			Khoros 1.0
	MPEG Encoder		

Chemie

Im Bereich Chemie wurden die Programmsysteme CADPAC, DGauss, MNDO94 (UniChem) durch aktuelle Versionen ersetzt. Mit GAMESS-USA und SUPER-MOLECULE stehen die ersten Chemie-Pakete für den Parallelrechner CRAY T3D zur Verfügung.

CRAY J90	CRAY T3D	SPARCserver <i>ufer</i>
AMBER 3.0A		
AMPAC 2.1		
CADPAC 5.2		
CHARMm 22.0		
DGauss 3.0		
GAMESS-UK 5.1		
GAMESS-USA	GAMESS-USA	
GAUSSIAN 92		
GRADSCF 9.6		
GROMOS		
MNDO 94		
MOLPRO94		MOLPRO94 Help
MOPAC 6.02		MOPAC Help
RPAC 8.2		
SPARTAN 2.0		
	SUPERMOLECULE 3.0	
UniChem 3.0		

Strukturmechanik

Im Bereich Strukturmechanik werden die Finite-Elemente-Systeme ABAQUS und ADINA in den aktuellen Versionen eingesetzt.

CRAY J90	CRAY Y-MP
ABAQUS 5.4	
	ADINA 6.1

Informationssystem ZIBIS

Das auf dem World-Wide Web basierende Informationssystem ZIBIS wurde weiter ausgebaut. Auf dem Vorrechner *ufer* wurden die neuesten Versionen der WWW Browser Lynx, Mosaic und Netscape bereitgestellt. Für das Jahr 1996 ist der Übergang vom CERN HTTP Server auf den Netscape HTTP Server geplant.

SPARCserver <i>ufer</i>
CrayDoc 2.2
Lynx
Mosaic 2.4
Netscape 1.1
CERN HTTPD 3.0
Netscape Proxy 1.2

4.4 Rechnernutzung

Die folgende Tabelle gibt den Rechenzeitverbrauch im Jahre 1995 der vom Zulassungsausschuß empfohlenen Projekte wieder. Während die Rechenzeit bei den Vektorrechnern einheitlich auf CPU-Stunden einer CRAY Y-MP umgerechnet ist, wird die abgenommene Leistung am Parallelrechner T3D in PE-Belegungszeit ausgewiesen.

(Erläuterung: Wenn ein Programm eine Stunde lang 16 Prozessoren belegt hat, hat es eine PE-Belegungszeit von 16 Stunden verbraucht). Da die Prozessoren des Parallelrechners RISC-Prozessoren vom Typ DEC Alpha sind, deren Arbeitsweise erheblich von der der Vektorprozessoren abweicht, ist hier keine Umrechnung auf Y-MP-Stunden angebracht: Bei Programmen, die für den Vektorrechner besonders gut geeignet sind, kann eine CPU-Stunde einer Cray Y-MP bis zu 20 Stunden PE-Belegungszeit entsprechen. Im anderen Extremfall eines für den Vektorrechner völlig ungeeigneten Programms kann das Verhältnis eins zu zwei oder sogar eins zu eins sein. In jedem Falle wird aus obiger Tabelle klar, daß der bei weitem überwiegende Teil der Rechenleistung vom Parallelrechner erbracht wird.

**Rechenzeitverbrauch der vom Zulassungsausschuß geprüften Projekte
1995**

Fachgebiet	Gesamtzahl der Projekte	CRAY X-MP (Jan.-Sep. 1995)	CRAY J932/16-8192 (in Y-MP-Einheiten) (Okt.-Dez. 1995)	Anzahl Projekte für T3D	CRAY T3D (PE-Belegungszeit)	CRAY X-MP Kiel (in Y-MP-Einheiten)	S 400 Hannover (in Y-MP-Einheiten)
Physik	19	4.110	3.324	12	644.369	886	8.942
Chemie	32	11.483	12.260	6	21.043	0	391
Klimaforschung	3	3.289	1.341	1	23.407	0	0
Ingenieurwissenschaften	6	0	688	6	487.505	0	0
Summe	60	18.882	17.613	60	1.210.054	886	9.333
An Benutzer abgegebene CPU-Zeit insgesamt		20.812	19.069		1.221.686		

4.5 Interne Dienstleistungen des Rechenzentrums

Die sachgerechte Ausstattung der Arbeitsplätze mit Workstations wurde auch im Berichtszeitraum entsprechend den bereitgestellten finanziellen Mitteln den Erfordernissen der Forschungsarbeit angepaßt und erweitert. Aus Drittmitteln konnte das ZIB zahlreiche neue Projekte anfangen, für deren Mitarbeiter geeignete Arbeitsplätze eingerichtet werden mußten. Leider konnten die vorhandenen Arbeitsplatzrechner nicht in dem Umfang modernisiert werden, wie es im Interesse der technischen Substanzerhaltung und der Anpassung an den aktuellen Standard wünschenswert gewesen wäre. Die folgende Übersicht über die im ZIB installierten Workstations zeigt, daß der überwiegende Teil der Geräte seit drei oder mehr Jahren betrieben wird und mehr als ein Drittel der Geräte älter als vier Jahre ist.

Rechnerausstattung des ZIB Ende 1995 (ohne Großgeräte)

Gerätetyp	Alter in Jahren		
	bis zu drei Jahre	mehr als drei Jahre	Summe
SUN 4/60/65	–	9	9
SUN 4/40	–	36	36
SUN 4/25	–	13	13
SUN 50	–	22	22
SUN 4/470/670	–	3	3
SUN S10	11	1	12
SUN S5/15	18	–	18
SUN S20	17	–	17
SGI/4d30G	–	2	2
SGI/Indigo 1	–	3	3
SGI/Indigo 2	8	–	8
SGI/Indy	4	–	4
SGI/Challenge	1	–	1
HP/9000	–	3	3
IBM/6000	1	–	1
DEC/3100	–	1	1
DEC/AXP	2	–	2
X Terminals	11	7	18
Summe	73	100	173

5 Publikationen und Auszeichnungen

Die mit * gekennzeichneten Veröffentlichungen sind abrufbar über:

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

oder

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

5.1 Preprints

SC 95-01. Wolfram Koepf. *Identities for Families of Orthogonal Polynomials and Special Functions.* *

Abstract: In this article we present new results for families of orthogonal polynomials and special functions, that are determined by algorithmical approaches. In the first section, we present new results, especially for discrete families of orthogonal polynomials, obtained by an application of the celebrated Zeilberger algorithm. Next, we present algorithms for holonomic families $f(n, x)$ of special functions which possess a derivative rule. We call those families *admissible*. A family $f(n, x)$ is holonomic if it satisfies a holonomic recurrence equation with respect to n , and a holonomic differential equation with respect to x , i. e. linear homogeneous equations with polynomial coefficients. The rather rigid property of admissibility has many interesting consequences, that can be used to generate and verify identities for these functions by linear algebra techniques. On the other hand, many families of special functions, in particular families of orthogonal polynomials, are admissible. We moreover present a method that generates the derivative rule from the holonomic representation of a holonomic family. As examples, we find new identities for the Jacobi polynomials and for the Whittaker functions, and for families of discrete orthogonal polynomials by the given approach. Finally, we present representations for the parameter derivatives of the Gegenbauer and the generalized Laguerre polynomials.

SC 95-02. Rüdiger Brand; Willi Freeden; Jochen Fröhlich. *An Adaptive Hierarchical Approximation Method on the Sphere Using Axisymmetric Locally Supported Basis Functions.* *

Abstract: The paper discusses the approximation of scattered data on the sphere which is one of the major tasks in geomathematics. Starting from the discretization of singular integrals on the sphere the authors devise a simple approximation method that employs locally supported spherical polynomials and does not require equidistributed grids. It is the basis for a hierarchical approximation algorithm using differently scaled basis functions, adaptivity and error control. The method is applied to two examples one of which is a digital terrain model of Australia.

SC 95-03. Karin Gatermann; Reiner Lauterbach. *Automatic classification of normal forms.* *

Abstract: The aim of this paper is to demonstrate a specific application of Computer Algebra to bifurcation theory with symmetry. The classification of different bifurcation phenomena in case of several parameters is automated, based on a classification of Gröbner bases of possible tangent spaces. The computations are performed in new coordinates of fundamental invariants and fundamental equivariants, with the induced weighted ordering. In order to justify the approach the theory of intrinsic modules is applied. Results for the groups D_3 , Z_2 , and $Z_2 \times Z_2$ demonstrate that the algorithm works independent of the group and that new results are obtained.

SC 95-04. Atef Abdel-Aziz Abdel-Hamid; Norbert Ascheuer; Martin Grötschel; Herbert Schorer. *Simulation und Optimierung einer PC-Fertigung unter Echtzeitbedingungen.* *

Abstract: Die Business Unit PC in Augsburg ist die zentrale Produktionsstätte der Siemens-Nixdorf Informationssysteme (SNI) AG für Personal Computer sowie für einige Periphergeräte. Das Werk, entworfen nach modernen CIM/CAI-Konzepten (Computer Integrated Manufacturing/ Computer Aided Industry), wurde 1987 errichtet. Bald zeigte sich jedoch, daß es für ein zu geringes Produktionsvolumen ausgelegt war und einige Komponenten des Systems Engpässe im Produktionsbetrieb darstellen. Das Management suchte nach Möglichkeiten, den Produktionsfluß zu verbessern, ohne teure technische Änderungen am System vornehmen zu müssen. Eine Forschungsgruppe des Konrad-Zuse-Zentrums für Informationstechnik (die ehemals an der Universität Augsburg ansässig war) analysierte, unterstützt von einigen Studenten und Ingenieuren der SNI, den Produktionsfluß und lokalisierte Schwachstellen. Basierend auf diesen Erkenntnissen wurden mathematische Fragestellungen erarbeitet und auf mathematischen Optimierungsverfahren basierende Softwarepakete entwickelt, die jetzt teilweise bei SNI im Einsatz sind. Im folgenden werden einige dieser Fragestellungen, deren Modellierung und mathematische Behandlung beschrieben. Einige der Ansätze, die hier dargestellt werden sollen, sind teilweise schon in Grötschel [Grö92] angesprochen worden.

SC 95-05. Thomas Wolf. *Programs for Applying Symmetries of PDEs.* *

Abstract: In this paper the programs **APPLYSYM**, **QUASILINPDE** and **DETRAF0** are described which aim at the utilization of infinitesimal symmetries of differential equations. The purpose of **QUASILINPDE** is the general solution of quasilinear PDEs. This procedure is used by **APPLYSYM** for the application of point symmetries for either

- calculating similarity variables to perform a point transformation which lowers the order of an ODE or effectively reduces the number of expli-

citly occuring independent variables in a PDE(-system) or for

- generalizing given special solutions of ODEs/PDEs with new constant parameters.

The program `DETRAF0` performs arbitrary point- and contact transformations of ODEs/PDEs and is applied if similarity and symmetry variables have been found. The program `APPLYSYM` is used in connection with the program `LIEPDE` for formulating and solving the conditions for point- and contact symmetries which is described in `LIEPDE(1992)`. The actual problem solving is done in all these programs through a call to the package `CRACK` for solving overdetermined PDE-systems.

SC 95-06. Michael Dellnitz; Martin Golubitsky; Andreas Hohmann; Ian Stewart. *Spirals in Scalar Reaction-Diffusion Equations.* *

Abstract: Spiral-like patterns are an often observed phenomenon in chemical experiments such as the Belousov-Zhabotinskii reaction. The talk is concerned with a new PDE model whose solutions have the form of rotating spirals. In contrast to previous approaches it is based on a *scalar* reaction diffusion equation defined on a disk. A particular choice of boundary conditions leads to a non-selfadjoint operator which permits non-trivial dynamics. We study this equation using a combination of equivariant bifurcation theory and numerical simulations. The latter involves the direct simulation of the time dependent system as well as the computation of rotating waves and their stability.

SC 95-07. Rosemary Renaut; Jochen Fröhlich. *A Pseudospectral Chebychev method for the 2D Wave Equation with Domain Stretching and Absorbing Boundary Conditions.* *

Abstract: In this paper we develop a method for the simulation of wave propagation on artificially bounded domains. The acoustic wave equation is solved at all points away from the boundaries by a pseudospectral Chebychev method. Absorption at the boundaries is obtained by applying one-way wave equations at the boundaries, without the use of damping layers. The theoretical reflection coefficient for the method is compared to theoretical estimates of reflection coefficients for a Fourier model of the problem. These estimates are confirmed by numerical results. Modification of the method by a transformation of the grid to allow for better resolution at the center of the grid reduces the maximum eigenvalues of the differential operator. Consequently, for stability the maximum timestep is $O(1/N)$ as compared to $O(1/N^2)$ for the standard Chebychev method. Therefore, the Chebychev method can be implemented with efficiency comparable to that of the Fourier method. Moreover, numerical results presented demonstrate the superior performance of the new method.

SC 95-08. Andreas S. Schulz; Robert Weismantel; Günter M. Ziegler. *0/1-Integer Programming: Optimization and Augmentation are Equivalent.*

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

Abstract: For every fixed set $\mathcal{F} \subseteq \{0,1\}^n$ the following problems are strongly polynomial time equivalent: given a feasible point $x \in \mathcal{F}$ and a linear objective function $c \in \mathbb{Z}^n$,

- find a feasible point $x^* \in \mathcal{F}$ that maximizes cx (Optimization),
- find a feasible point $x^{\text{new}} \in \mathcal{F}$ with $cx^{\text{new}} > cx$ (Augmentation), and
- find a feasible point $x^{\text{new}} \in \mathcal{F}$ with $cx^{\text{new}} > cx$ such that $x^{\text{new}} - x$ is “irreducible” (Irreducible Augmentation).

This generalizes results and techniques that are well known for 0/1-integer programming problems that arise from various classes of combinatorial optimization problems.

SC 95-09. Rekha R. Thomas; Robert Weismantel. *Truncated Gröbner Bases for Integer Programming.*

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

Abstract: In this paper we introduce a multivariate grading of the toric ideal associated with the integer program $\min\{cx : Ax = b, x \in \mathbb{N}^n\}$, and a truncated Buchberger algorithm to solve the program. In the case of $\max\{cx : Ax \leq b, x \leq u, x \in \mathbb{N}^n\}$ in which all data are non-negative, this algebraic method gives rise to a combinatorial algorithm presented in UWZ94.

SC 95-10. Wolfram Koepf; Dieter Schmersau. *On the De Branges Theorem.* *

Abstract: Recently, Todorov and Wilf independently realized that de Branges’ original proof of the Bieberbach and Milin conjectures and the proof that was later given by Weinstein deal with the same special function system that de Branges had introduced in his work. In this article, we present an elementary proof of this statement based on the defining differential equations system rather than the closed representation of de Branges’ function system. Our proof does neither use special functions (like Wilf’s) nor the residue theorem (like Todorov’s) nor the closed representation (like both), but is purely algebraic. On the other hand, by a similar algebraic treatment, the closed representation of de Branges’ function system is derived. Our whole contribution can be looked at as the study of properties of the Koebe function. Therefore, in a very elementary manner it is shown that the known proofs of the Bieberbach and Milin conjectures can be understood as a consequence of the Löwner differential equation, plus properties of the Koebe function.

SC 95-11. Michael Dellnitz; Andreas Hohmann. *A Subdivision Algorithm for the Computation of Unstable Manifolds and Global Attractors.* *

Abstract: Each invariant set of a given dynamical system is part of the global attractor. Therefore the global attractor contains all the potentially interesting dynamics, and, in particular, it contains every (global) unstable manifold. For this reason it is of interest to have an algorithm which allows to approximate the global attractor numerically. In this article we develop such an algorithm using a subdivision technique. We prove convergence of this method in a very general setting, and, moreover, we describe the qualitative convergence behavior in the presence of a hyperbolic structure. The algorithm can successfully be applied to dynamical systems of moderate dimension, and we illustrate this fact by several numerical examples.

SC 95-12. Karin Gatermann. *Testing for S_n -Symmetry with a Recursive Detective.* *

Abstract: In the recent years symmetric chaos has been studied intensively. One knows which symmetries are admissible as the symmetry of an attractor and which transitions are possible. The numeric has been developed using equivariant functions for detection of symmetry and augmented systems for determination of transition points. In this paper we look at this from a sophisticated group theoretic point of view and from the view of scientific computing, i.e. efficient evaluation of detectives is an important point. The constructed detectives are based on Young's seminormal form for S_n . An application completes the paper.

SC 95-13. Wolfram Koepf. *The Identification Problem for Transcendental Functions.* *

Abstract: In this article algorithmic methods are presented that have essentially been introduced into computer algebra within the last decade. The main ideas are due to Stanley[1980] and Zeilberger[1990]. Some of them had already been discovered in the last century (see e. g. Beke[1894]), but because of the complexity of the underlying algorithms have fallen into oblivion. The combination of these ideas leads to a solution of the identification problem for a large class of transcendental functions. We present implementations of these algorithms in computer algebra systems.

SC 95-14. Christof Schütte. *Smoothed Molecular Dynamics For Thermally Embedded Systems.* *

Abstract: This paper makes use of statistical mechanics in order to construct effective potentials for Molecular Dynamics for systems with nonstationary thermal embedding. The usual approach requires the computation of a statistical ensemble of trajectories. In the context of the new model the evaluation of only one single trajectory is sufficient for the determination of all interesting quantities, which leads to an enormous reduction of

computational effort. This single trajectory is the solution to a corrected Hamiltonian system with a new potential \tilde{V} . It turns out that \tilde{V} can be defined as spatial average of the original potential V . Therefore, the Hamiltonian dynamics defined by \tilde{V} is smoother than that effected by V , i.e. a numerical integration of its evolution in time allows larger stepsizes. Thus, the presented approach introduces a Molecular Dynamics with smoothed trajectories originating from spatial averaging. This is deeply connected to time-averaging in Molecular Dynamics. These two types of *smoothed Molecular Dynamics* share advantages (gain in efficiency, reduction of error amplification, increased stability) and problems (necessity of closing relations and adaptive control schemes) which will be explained in detail.

SC 95-15. Rüdiger Schultz. *Structure and Stability in Two-Stage Stochastic Programming.*

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

Abstract: This thesis is concerned with structural properties and the stability behaviour of two-stage stochastic programs.

Chapter 1 gives an introduction into stochastic programming and a summary of the main results of the thesis.

In Chapter 2 we present easily verifiable sufficient conditions for the strong convexity of the expected-recourse function in a stochastic program with linear complete recourse. Different levels of randomness in the data are considered. We start with models where only the right-hand side of the constraints is random and extend these results to the situation where also the technology matrix contains random entries. The statements on strong convexity imply new stability estimates for sets of optimal solutions when perturbing the underlying probability measure. We work out Hölder estimates (in terms of the L_1 -Wasserstein distance) for optimal solution sets to linear recourse models with random technology matrix.

In Chapter 3 (*joint work with Werner Römisch, Berlin*) we are aiming at the Lipschitz stability of optimal solution sets to linear recourse models with random right-hand side. To this end, we first adapt the distance notion for the underlying probability measures to the structure of the model and derive a Lipschitz estimate for optimal solutions based on that distance. Here, the strong convexity established in Chapter 2 turns out as an essential assumption. For applications, however, a Lipschitz estimate with respect to a more accessible probability distance is desirable. Structural properties of the expected-recourse function finally permit such an estimate in terms of the Kolmogorov-Smirnov distance of linear transforms of the underlying measures. The general analysis is specified to estimation via empirical measures. We obtain a law of iterated logarithm, a large deviation estimate and an estimate for the asymptotic distribution of optimal solution sets.

Chapters 4 and 5 deal with two-stage linear stochastic programs where in-

tegrality constraints occur in the second stage. In Chapter 4 we study basic continuity properties of the expected-recourse function for models with random right-hand side and random technology matrix. The joint continuity with respect to the decision variable and the underlying probability measure leads to qualitative statements on the stability of local optimal values and local optimal solutions.

In Chapter 5 we demonstrate that a variational distance of probability measures based on a suitable Vapnik-Červonenkis class of Borel sets leads to convergence rates of the Hölder type for the expected recourse as a function of the underlying probability measure. The rates carry over to the convergence of local optimal values. As an application we again consider estimation via empirical measures. Beside qualitative asymptotic results for optimal values and optimal solutions we obtain a law of iterated logarithm for optimal values.

SC 95-16. Peter Deuffhard; Jens Lang; Ulrich Nowak. *Adaptive Algorithms in Dynamical Process Simulation.* *

Abstract: Dynamical simulation of industrially relevant processes strongly advises the use of algorithms, which are *adaptive* both in time and in space discretization. The paper presents two alternatives: (a) a fully adaptive method of lines approach, which is based on finite difference methods and essentially applicable to 1D problems; (b) a fully adaptive Rothe method, which is based on a fast multilevel finite element method and applicable to 1D up to 3D.

SC 95-17. Sebastian Reich. *A Free Energy Approach to the Torsion Dynamics of Macromolecules.* *

Abstract: Based on the concept of free energy, we give a Hamiltonian formulation for the torsion dynamics of macromolecules. The appropriate reaction coordinates for the free energy calculations are defined in terms of soft constraints as introduced in Brooks, B.R., Zhou, J., and Reich, S., Elastic molecular dynamics with flexible constraints, in preparation and Reich, S., Smoothed Dynamics of Highly Oscillatory Hamiltonian Systems, *Physica D*, to appear, 1995. We consider a few simplifications that allow one to calculate the free energy analytically and to write the corresponding equations of motion as a constrained Hamiltonian system. We also discuss a possible stochastic embedding of the reduced dynamics by means of a generalized Langevin approach.

SC 95-18. Gerhard W. Zumbusch. *Symmetric Hierarchical Polynomials and the Adaptive h - p -Version.* *

Abstract: The h - p -version of finite-elements delivers a sub-exponential convergence in the energy norm. A step towards a full adaptive implementation is taken in the context of unstructured meshes of simplices with

variable order p in space. Both assumptions lead to desirable properties of shape functions like symmetry, p -hierarchy and simple coupling of elements. In a first step it is demonstrated that for standard polynomial vector spaces on simplices not all of these features can be obtained simultaneously. However, this is possible if these spaces are slightly extended or reduced. Thus a new class of polynomial shape functions is derived, which are especially well suited for three dimensional tetrahedra.

The construction is completed by directly minimizing the condition numbers of the arising preconditioned local finite element matrices. The preconditioner is based on two-step domain decomposition techniques using a multigrid solver for the global linear problem $p = 1$ and direct solvers for local higher order problems.

Some numerical results concerning an adaptive (feedback) version of h - p finite elements are presented.

SC 95-19. Ch. Schütte, M. Dinand, G. Zumbusch, R. Brinkmann. *Dynamics of Erbium-doped Waveguide Lasers: Modelling, Reliable Simulation, and Comparison with Experiments.* *

Abstract: A theoretical investigation of the dynamic properties of integrated optical Er-doped waveguide lasers is presented. It includes the construction of a physical model and of numerical techniques which allow reliable simulations of the dynamical behaviour of the laser signal depending on essential parameters of the laser device and on its external, time-dependent pump radiation. Therefore, a physical theory is developed which describes the propagation of light and its interaction with the active substrate in the laser cavity. This is realized in two steps. First, a *fundamental model* based on Maxwell's equations and on rate equations for the transitions in the active medium is constructed. Since this turns out to prohibit reliable simulations, it is, in a second step, reformulated via averaging in time and space which suppresses the fluctuations on the fastest time scales but represents them correctly. For this *reduced model* reliable and efficient simulation techniques using adaptive control schemes are designed and implemented. We apply the linear-implicit Euler discretization with extrapolation in time and a multilevel quadrature scheme in space. Finally, the model is justified in comparison with experimental observations in four cases of technological relevance.

SC 95-20. Rüdiger Schultz. *Discontinuous Optimization Problems in Stochastic Integer Programming.* *

Abstract: Integer stochastic linear programming is considered from the viewpoint of discontinuous optimization. After reviewing solution approaches via mollifier subgradients and decomposition we outline how to base a solution method on efficient pointwise calculation of the objective employ-

ing computer algebra.

SC 95-21. Rüdiger Schultz. *Strong Convexity in Stochastic Programs with Complete Recourse II: Partially Random Right-Hand Side.* *

Abstract: We establish a verifiable sufficient condition for strong convexity of the expected recourse as a function of the tender variable in a two-stage stochastic program with linear recourse. Generalizing a former result where all components of the second-stage right-hand side vector were random we treat the case where only a subvector of the right-hand side is random. As prerequisite, a refined analysis of the polyhedral complex of lineality regions of the second-stage value function is carried out. The sufficient condition for strong convexity allows to widen the class of recourse models for which certain quantitative results on stability and asymptotic convergence of optimal solutions are valid.

SC 95-22. Thomas Wolf. *The program CRACK for solving PDEs in General Relativity. Lecture given at the 152. WE-Heraeus-Seminar on RELATIVITY AND SCIENTIFIC COMPUTING: Computer Algebra, Numerics, Visualization.* *

Abstract: In the introduction an approach to solving differential equations is motivated in which non-linear DEs are not attacked directly but properties like infinitesimal symmetries or the existence of an equivalent variational principle are investigated. In the course of such investigations overdetermined PDE-systems are generated which are to be solved (where the term ‘overdetermined’ just stands for ‘more conditions than free functions’). In section 2. algorithms for simplifying and solving overdetermined PDE systems are given together with examples. References for more details of the corresponding program **CRACK**, written by A. Brand and the author, are given. In sections 3.-5. applications of the program **CRACK** are discussed. The first application is the investigation of symmetries of space-time metrics by solving Killing equations for Killing vectors and Killing tensors and their integrability conditions. A program **CLASSYM** that formulates these equations, written by G. Grebot, is briefly described. In section 4. an example of the original application of **CRACK** is discussed which is the determination of symmetries of a PDE system. The problem is to find the symmetries of an unusual unified field theory of gravitational and hadronic interactions. The application of symmetries with a program **APPLYSYM** is the content of section 5. where an ODE, resulting from an attempt to generalize Weyl’s class of solutions of Einsteins field equations, is solved. The final section is devoted to future work on, first, making a general PDE-solver more flexible and effective, and secondly, on applying it to more advanced applications. This section contains so far unpublished work. An example requiring the extension of **CRACK** to deal with non-polynomial non-linearities results

from an investigation of interior solutions of Einstein's field equations for a spherically symmetric perfect fluid in shear-free motion by H. Stephani. A possible future application of **CRACK** is the determination of Killing tensors of higher rank. In the last sub-section an algorithm for formulating corresponding integrability conditions has been sketched. The maximal number of Killing tensors of rank r in a n -dimensional Riemannian space has been found to be $\frac{1}{r+1} \binom{n+r-1}{r} \binom{n+r}{r}$.

SC 95-23. Rüdiger Schultz; Leen Stougie; Maarten H. van der Vlerk. *Solving Stochastic Programs with Complete Integer Recourse: a framework using Gröbner Bases.* *

Abstract: In this paper we present a framework for solving stochastic programs with complete integer recourse and discretely distributed right-hand side vector, using Gröbner basis methods from computational algebra to solve the numerous second-stage integer programs. Using structural properties of the integer expected recourse function, we prove that under mild conditions an optimal solution is contained in a finite set. Furthermore, we present a basic scheme to enumerate this set and suggest possible improvements to economize on the number of function evaluations needed.

SC 95-24. Gerhard W. Zumbusch. *Adaptive h-p approximation procedures, graded meshes and anisotropic refinement for Numerical Quadrature.* *

Abstract: A set of adaptive algorithms for quadrature on multi-dimensional polyhedral domains is presented. Several kinds of refinement are discussed, covering local improvement of quadrature order and splitting the domain into sub-domains, resulting in isotropic, graded or anisotropic grids. The algorithms are pure local heuristics using no a priori knowledge or tuning parameters. This approach was motivated by results from finite element theory for optimal approximation results. Numerical experiments show the optimality of pure local greedy-like algorithms for singularity-type functions typically occurring in finite element computations.

SC 95-25. Ulrich Nowak. *A Fully Adaptive MOL-Treatment of Parabolic 1D-Problems with Extrapolation Techniques.* *

Abstract: A fully adaptive method is presented for the numerical solution of highly nonlinear, coupled systems of parabolic differential equations in one space dimension. Time discretization is by means of the linearly-implicit Euler discretization. Space discretization is by finite differences on non-uniform grids. Both basic discretizations are combined with extrapolation. Based on local error estimates for both the time and the space discretization error, the accuracy of the numerical approximation is controlled and the discretization stepsizes are adapted automatically and simultaneously. The algorithm is implemented in a user friendly software package,

PDEX1M. To be a powerful tool for users coming from applications the package has been equipped with some additional useful devices.

- SC 95-26. Folkmar A. Bornemann; Peter Nettesheim; Christof Schütte. *Quantum-Classical Molecular Dynamics as an Approximation to Full Quantum Dynamics.* *

Abstract: This paper presents a mathematical derivation of a model for quantum-classical molecular dynamics (QCMD) as a *partial* classical limit of the full Schrödinger equation. This limit is achieved in two steps: separation of the full wavefunction and short wave asymptotics for its “classical” part. Both steps can be rigorously justified under certain smallness assumptions. Moreover, the results imply that neither the time-dependent self-consistent field method nor mixed quantum-semi-classical models lead to better approximations than QCMD since they depend on the separation step, too. On the other hand, the theory leads to a characterization of the critical situations in which the models are in danger of largely deviating from the solution of the full Schrödinger equation. These critical situations are exemplified in an illustrative numerical simulation: the collinear collision of an Argon atom with a harmonic quantum oscillator.

- SC 95-27. Ralf Borndörfer; Martin Grötschel; Andreas Löbel. *Alcuin’s Transportation Problems and Integer Programming.* *

Abstract: The need to solve *transportation problems* was and still is one of the driving forces behind the development of the mathematical disciplines of graph theory, optimization, and operations research. Transportation problems seem to occur for the first time in the literature in the form of the four “River Crossing Problems” in the book *Propositiones ad acuendos iuvenes*. The *Propositiones*—the oldest collection of mathematical problems written in Latin—date back to the 8th century A.D. and are attributed to Alcuin of York, one of the leading scholars of his time, a royal advisor to Charlemagne at his Frankish court.

Alcuin’s river crossing problems had no impact on the development of mathematics. However, they already display all the characteristics of today’s large-scale real transportation problems. From our point of view, they could have been the starting point of combinatorics, optimization, and operations research. We show the potential of Alcuin’s problems in this respect by investigating his problem 18 about a wolf, a goat and a bunch of cabbages with current mathematical methods. This way, we also provide the reader with a leisurely introduction into the modern theory of integer programming.

- SC 95-28. Jochen Fröhlich; Kai Schneider. *An adaptive Wavelet-Vaguelette Algorithm for the Solution of Nonlinear PDEs.* *

Abstract: The paper describes a fast algorithm for the discrete periodic wavelet transform and its inverse without using the scaling function. The

approach permits to compute the decomposition of a function into a lacunary wavelet basis, i.e. a basis constituted of a subset of all basis functions up to a certain scale, without modification. The construction is then extended to operator-adapted biorthogonal wavelets. This is relevant for the solution of non-linear evolutionary PDEs where a priori information about the significant coefficients is available. We pursue the approach described in FrSc94 which is based on the explicit computation of the scalewise contributions of the approximated function to the values at points of hierarchical grids. Here, we present an improved construction employing the cardinal function of the multiresolution. The new method is applied to the Helmholtz equation and illustrated by comparative numerical results. It is then extended for the solution of a nonlinear parabolic PDE with semi-implicit discretization in time and self-adaptive wavelet discretization in space. Results with full adaptivity of the spatial wavelet discretization are presented for a one-dimensional flame front as well as for a two-dimensional problem.

SC 95-29. Peter Deuffhard; Jörg Heroth. *Dynamic Dimension Reduction in ODE Models.* *

Abstract: The paper analyzes a splitting technique into fast and slow dynamical components of ODE systems as suggested by MAAS AND POPE recently. Their technique is based on a real block – Schur decomposition of the Jacobian of the right hand side of the ODE. As a result of the analysis, a computationally cheap monitor for the possible necessary recovering of the splitting is derived by singular perturbation theory. Numerical experiments on moderate size, but challenging reaction kinetics problems document the efficiency of the new device within a linearly-implicit stiff integrator.

SC 95-30. Folkmar A. Bornemann; Christof Schütte. *A Mathematical Approach to Smoothed Molecular Dynamics: Correcting Potentials for Freezing Bond Angles.* *

Abstract: The interaction potential of molecular systems which are typically used in molecular dynamics can be split into two parts of essentially different stiffness. The strong part of the potential forces the solution of the equations of motion to oscillate on a very small time scale. There is a strong need for eliminating the smallest time scales because they are a severe restriction for numerical long-term simulations of macromolecules. This leads to the idea of just freezing the high frequency degrees of freedom (bond stretching and bond angles). However, the naive way of doing this via holonomic constraints is bound to produce incorrect results. The paper presents a mathematically rigorous discussion of the limit situation in which the stiffness of the strong part of the potential is increased to infinity. It is demonstrated that the average of the limit solution indeed obeys a constrained Hamiltonian system but with a *corrected soft potential*. An explicit

formula for the additive potential correction is given and its significant contribution is demonstrated in an illustrative example. It appears that this correcting potential is definitely not identical with the Fixman-potential as was repeatedly assumed in the literature.

SC 95-31. M. Grötschel; A. Martin; R. Weismantel. *Optimum Path Packing on Wheels: The Consecutive Case.*

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

Abstract: We show that, given a wheel with nonnegative edge lengths and pairs of terminals located on the wheel's outer cycle such that the terminal pairs are in consecutive order, then a path packing, i. e., a collection of edge disjoint paths connecting the given terminal pairs, of minimum length can be found in strongly polynomial time. Moreover, we exhibit for this case a system of linear inequalities that provides a complete and nonredundant description of the path packing polytope, which is the convex hull of all incidence vectors of path packings and their supersets.

SC 95-32. Sebastian Reich. *Enhanced long-term simulation of Hamiltonian systems containing a strong non-convex potential.* *

Abstract: Many physical systems exhibit rapid motion coupled to a slowly varying motion. Often the rapid motion is associated with a stiff contribution in the potential energy function. In this context, the situation typically considered in the literature is the one with a strictly convex potential. Under some technical assumptions, one can then show that the slow motion is reproduced by a properly constrained system. In this paper we are concerned with a different situation: Often different time-scales can be found because of many local minima and barrier crossing between these minima. We suggest here to replace the detailed motion in the minima and the local barrier crossings by a statistical model which is then coupled to the slow equations of motion over long periods of time. This leads to Langevin type equations of motion subject to an appropriate time transformation.

SC 95-33. Manfred Brandt. *Approximations for the Distribution Function of the Sum of iid Random Variables with Compact Support in \mathbb{R}_+ .* *

Abstract: In this paper a unified approach to central and decentral approximations of the distribution function $F(x, n)$ of the sum of n iid random variables with compact support in \mathbb{R}_+ is given. This approach yields direct Edgeworth expansion (especially the Central limit theorem) and indirect Edgeworth expansion (Theorem of Bahadur-Rao, large deviation results) within a unified framework. An approximative inversion of the LST of $F(x, n)$ (approximation of the complex inversion integral over a line by an integral over a proper bounded arc with a proper integrand) allows to get these approximations and moreover explicit error bounds.

SC 95-34. Andreas Brandt; Manfred Brandt. *On the Sojourn Times for Many-Queue Head-of-the-Line Processor-Sharing Systems with Permanent Customers.* *

Abstract: We consider a single server system consisting of n queues with different types of customers (Poisson streams) and k permanent customers. The permanent customers and those at the head of the queues are served in processor-sharing by the service facility (head-of-the-line processor-sharing). The stability condition and a pseudo work conservation law will be given for arbitrary service time distributions; for exponential service times a pseudo conservation law for the mean sojourn times can be derived. In case of two queues and exponential service times, the generating function of the stationary distribution satisfies a functional equation being a Riemann-Hilbert problem which can be reduced to a Dirichlet problem for a circle. The solution yields the mean sojourn times as an elliptic integral, which can be computed numerically very efficiently. In case $n \geq 2$ a numerical algorithm for computing the performance measures is presented, which is efficient for $n = 2, 3$. Since for $n \geq 4$ an exact analytical or/and numerical treatment is too complex a heuristic approximation for the mean sojourn times of the different types of customers is given, which in case of a (complete) symmetric system is exact. The numerical and simulation results show that, over a wide range of parameters, the approximation works well.

SC 95-35. Christoph Helmberg; Franz Rendl. *Solving Quadratic (0,1)-Problems by Semidefinite Programs and Cutting Planes.*

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

Abstract: We present computational experiments for solving quadratic (0,1) problems. Our approach combines a semidefinite relaxation with a cutting plane technique, and is applied in a Branch and Bound setting. Our experiments indicate that this type of approach is very robust, and allows to solve many moderately sized problems, having say, less than 100 binary variables, in a routine manner.

SC 95-36. Rekha Thomas; Robert Weismantel. *Test sets and inequalities for integer programs: extended abstract.*

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

Abstract: This paper presents some connections between test sets and valid inequalities of integer programs. The reason for establishing such relationships is the hope that information (even partial) on one of these objects can be used to get information on the other and vice versa. We approach this study from two directions: On the one hand we examine the geometric process by which the secondary polytope associated with a matrix A transforms to the state polytope as we pass from linear programs

that have A as coefficient matrix to the associated integer programs. The second direction establishes the notion of classes of augmentation vectors parallel to the well known concept of classes of facet defining inequalities for integer programs. We show how certain inequalities for integer programs can be derived from test sets for these programs.

SC 95-37. Christoph Helmberg; Franz Rendl; Robert Weismantel. *Quadratic Knapsack Relaxations Using Cutting Planes and Semidefinite Programming: extended abstract.*

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

Abstract: We investigate dominance relations between basic semidefinite relaxations and classes of cuts. We show that simple semidefinite relaxations are tighter than corresponding linear relaxations even in case of linear cost functions. Numerical results are presented illustrating the quality of these relaxations.

SC 95-38. Andreas Löbel; Uwe Strubbe. *Wagenumlaufoptimierung - Methodischer Ansatz und praktische Anwendung.* *

Abstract: Im Rahmen des EDV-gestützten Systems zur **BEtRiebseinsaTz**planung und -**Auswertung** (BERTA) der Berliner Verkehrsbetriebe (BVG) wird ein Modul zur Wagenumlaufoptimierung realisiert. In diesem Aufsatz berichten wir über die betrieblichen Anforderungen und Nebenbedingungen an eine mathematische Optimierung und erläutern unsere Konzepte zur Realisierung eines exakten mathematischen Verfahrens.

SC 95-39. Folkmar A. Bornemann; Christof Schütte. *Homogenization of Highly Oscillatory Hamiltonian Systems.* *

Abstract: The paper studies Hamiltonian systems with a strong potential forcing the solutions to oscillate on a very small time scale. In particular, we are interested in the limit situation where the size ϵ of this small time scale tends to zero but the velocity components remain oscillating with an amplitude variation of order $\mathcal{O}(1)$. The process of establishing an effective initial value problem for the limit positions will be called *homogenization* of the Hamiltonian system. This problem occurs in mechanics as the problem of realization of holonomic constraints, in plasma physics as the problem of guiding center motion, in the simulation of biomolecules as the so called smoothing problem. We suggest the systematic use of the notion of *weak convergence* in order to approach this problem. This methodology helps to establish unified and short proofs of the known results which throw light on the inherent structure of the problem. Moreover, we give a careful and critical review of the literature.

SC 95-40. Peter Nettesheim. *An Explicit and Symplectic Integrator for Quantum-Classical Molecular Dynamics.*

Abstract: This paper presents an explicit and symplectic integrator called PICKABACK for quantum-classical molecular dynamics. This integration scheme is time reversible and unitary in the quantum part. We use the Lie formalism in order to construct a formal evolution operator which then is split using the Strang splitting yielding the symplectic discretization PICHABACK. Finally the new method is compared with a hybrid method in application to two examples: a collinear collision with a quantum oscillator and additionally a photodissociation process of a collinear ArHCl-molecule.

SC 95-41. Geir Dahl; Alexander Martin; Mechthild Stoer. *Routing through virtual paths in layered telecommunication networks. Published as Research Note N 78/95, Telenor Research and Development, Kjeller, Norway. For hardcopy please contact Mechthild Stoer, Telenor Research, Postboks 83, N-2007 Kjeller, NORWAY. e-mail:stoer@nta.no*

Abstract: We study a network configuration problem in telecommunications where one wants to set up paths in a capacitated network to accommodate given point-to-point traffic demand. The problem is formulated as an integer linear programming model where 0-1 variables represent different paths. An associated integral polytope is studied and different classes of facets are described. These results are used in a cutting plane algorithm. Computational results for some realistic problems are reported.

SC 95-42. Wolfram Koepf. *Efficient Computation of Orthogonal Polynomials in Computer Algebra.* *

Abstract: Orthogonal polynomials determinants, by the use of generating functions, in terms of Rodrigues formulas, by iterating recurrence equations, calculating the polynomial solutions of differential equations, through closed form representations and by other means.

In this article, we give an overview about the efficiency of the above methods in Maple, Mathematica, and REDUCE. As a noncommercial package we include the MuPAD system.

SC 95-43. Olaf Bunke; Bernd Droge; Jörg Polzehl. *Model Selection, Transformations and Variance Estimation in Nonlinear Regression.*

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

Abstract: The results of analyzing experimental data using a parametric model may heavily depend on the chosen model. In this paper we propose procedures for the adequate selection of nonlinear regression models if the intended use of the model is among the following:

1. prediction of future values of the response variable,
2. estimation of the unknown regression function,
3. calibration or
4. estimation of some parameter with a certain meaning in the corresponding field of application.

Moreover, we propose procedures for variance modelling and for selecting an

appropriate nonlinear transformation of the observations which may lead to an improved accuracy. We show how to assess the accuracy of the parameter estimators by a “moment oriented bootstrap procedure”. This procedure may also be used for the construction of confidence, prediction and calibration intervals. Programs written in Splus which realize our strategy for nonlinear regression modelling and parameter estimation are described as well. The performance of the selected model is discussed, and the behaviour of the procedures is illustrated by examples.

SC 95-44. Olaf Bunke; Bernd Droge; Jörg Polzehl. *Splus Tools for Model Selection in Nonlinear Regression*.

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

Abstract: The results of analyzing experimental data using a parametric model may heavily depend on the chosen model. With this paper we describe computational tools in Splus for the adequate selection of nonlinear regression models if the intended use of the model is among the following: 1. estimation of the unknown regression function, 2. prediction of future values of the response variable, 3. calibration or 4. estimation of some parameter with a certain meaning in the corresponding field of application. Moreover, we provide programs for variance modelling and for selecting an appropriate nonlinear transformation of the observations which may lead to an improved accuracy. We describe how the accuracy of the parameter estimators is assessed by a “moment oriented bootstrap procedure”. This procedure is also used for the construction of confidence, prediction and calibration intervals. The use of our tools is illustrated by an example. Help files are given in an appendix.

SC 95-45. Robert E. Bixby; Alexander Martin. *Parallelizing the Dual Simplex Method*. *

Abstract: We study the parallelization of the steepest-edge version of the dual simplex algorithm. Three different parallel implementations are examined, each of which is derived from the CPLEX dual simplex implementation. One alternative uses PVM, one general-purpose System V shared-memory constructs, and one the PowerC extension of C on a Silicon Graphics multi-processor. These versions were tested on different parallel platforms, including heterogeneous workstation clusters, Sun S20-502, Silicon Graphics multi-processors, and an IBM SP2. We report on our computational experience.

5.2 Technical Reports

TR 95-01. M. Grötschel; J. Lügger. *Wissenschaftliche Kommunikation am Wendepunkt – Bibliotheken im Zeitalter globaler elektronischer Netze –*.

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

Zusammenfassung: Durch extrem steigende Preise für traditionelle wissenschaftliche Zeitschriften bei gleichzeitiger Stagnation der Bibliotheksextats an den Hochschulen und bei weltweit weiterhin anwachsenden Forschungsleistungen ist die adäquate Versorgung der Wissenschaften mit relevanter Literatur gefährdet. Dokumentenliefersysteme werden vielerorts als Lösung dieser "Bibliothekskrise" propagiert. Dieser Weg ist für den derzeitigen Literaturversorgungsmarkt sinnvoll, aber er bietet keine langfristig stabile Lösung. Wenn die Grundversorgung der Bibliotheken weiter schrumpft, wird Dokumentenlieferung in der zur Zeit üblichen bzw. geplanten Form die Kosten nur noch zusätzlich in die Höhe treiben.

Wir plädieren in diesem Aufsatz für einen grundsätzlich neuen Ansatz. Wir sind der Meinung, daß einzig der Übergang auf elektronische Medien eine bezahlbare, umfassende und benutzerfreundliche Versorgung der Wissenschaftler mit Literatur sichern kann. Wir zeigen – unter anderem anhand elektronischer Zeitschriften – wie zum Beispiel durch Kooperation von Bibliotheken mit Fachbereichen und wissenschaftlichen Gesellschaften neue Wege der Informationsversorgung beschritten werden können. Dieser Vorschlag einer neuen Organisation des wissenschaftlichen Publikationswesens erfordert Umdenken in vielen Bereichen. Neue Organisationsformen sind erforderlich, Rechte müssen anders verteilt, Aufgaben auf andere Schultern geladen werden. Die Bibliotheken werden besonders betroffen sein. Aber für sie ist die konsequente Nutzung der sich rasch ausbreitenden Informationstechnik (darunter verstehen wir u. a. globale elektronische Netze, leistungsfähige Rechner, kostengünstige Speichermedien, benutzerfreundliche Such- und Retrieval-Systeme, Entwicklung weltweit akzeptierter Datenformate) eine wirkliche und möglicherweise die einzige Chance, ihrem Auftrag zur umfassenden Versorgung der Wissenschaften mit Literatur zu gesamtwirtschaftlich niedrigen Kosten weiterhin nachzukommen. Außerdem bietet die Bereitstellung und Archivierung wissenschaftlicher Literatur auf elektronischem Wege bedeutende Vorteile gegenüber der traditionellen Dokumentation auf Papier, die im übrigen, falls erwünscht, weiterhin betrieben werden kann.

TR 95-02. H. C. Hege; K. Polthier(eds.). *Visualization and Mathematics - Collected Abstracts.* *

Abstract: International Workshop with support of the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) and Max-Planck-Gesellschaft (MPG) Berlin (Dahlem), Germany, May 30 - June 2, 1995

TR 95-03. Wolfram Koepf (Ed.). *REDUCE Packages on Power Series, Z-Transformation, Residues and Trigonometric Simplification.* *

Abstract: In this report, we present a collection of new REDUCE packages

that recently have been developed. These are the packages **FPS**, **ZTRANS**, **RESIDUE** and **TRIGSIMP** on the following topics:

FPS Calculation of differential equations and formal power series representations, in particular for orthogonal polynomials and special functions of the hypergeometric type.

ZTRANS Calculation of the Z-Transformation and its inverse.

RESIDUE Calculation of residues of meromorphic functions.

TRIGSIMP Simplification of expressions involving trigonometric and hyperbolic functions.

For each of these packages, a description in form of a \LaTeX file is distributed together with the package. These documentations are collected here. In a final chapter, we show how to solve some difficult problems with these packages, and how they usefully can be combined.

TR 95-04. Rudolf Beck; Bodo Erdmann; Rainer Roitzsch. *An Object-Oriented Adaptive Finite Element Code.* *

Abstract: KASKADE 3.0 was developed for the solution of partial differential equations in one, two, or three space dimensions. Its object-oriented implementation concept is based on the programming language C++. Adaptive finite element techniques are employed to provide solution procedures of optimal computational complexity. This implies a posteriori error estimation, local mesh refinement and multilevel preconditioning.

The program was designed both as a platform for further developments of adaptive multilevel codes and as a tool to tackle practical problems. Up to now we have implemented scalar problem types like stationary or transient heat conduction. The latter one is solved with the Rothe method, enabling adaptivity both in space and time. Some nonlinear phenomena like obstacle problems or two-phase Stefan problems are incorporated as well. Extensions to vector-valued functions and complex arithmetic are provided.

We have implemented several iterative solvers for both symmetric and unsymmetric systems together with multiplicative and additive multilevel preconditioners. Systems arising from the nonlinear problems can be solved with lately developed monotone multigrid methods.

TR 95-05. Hubert Busch; Sandra Schulz; Günther Kroß. *Aufbau des Berliner Breitbandnetzes für die Wissenschaft.* *

Abstract: Seit 1991 verfolgt die Berliner Wissenschaft verstärkt das Ziel, ihre Einrichtungen untereinander breitbandig mit Transferraten oberhalb von 34 Mb/s in Glasfasertechnik zu vernetzen. Im ersten Halbjahr 1995 ist es gelungen, die erste Stufe des Berliner Breitbandnetzes für die Wissenschaft (*Berlin Research Area Information Network - BRAIN*) aufzubauen.

Dieser Bericht beschreibt die verschiedenen Phasen der Vernetzung der Wissenschaftseinrichtungen Berlins von den Anfängen im Jahre 1975 über die Planungen zum Breitbandnetz ab 1991 und die Realisierungsschritte durch die erfolgreiche Zusammenarbeit mit dem Landesamt für Informationstechnik Berlin (LIT) insbesondere bei der Verwendung von Glasfaserleitungen des Landes. Weiterhin werden der Aufbau des *Berlin Regional Testbed* in seiner Realisierung einschliesslich seiner Anwendungsprojekte mit Stand Juni 1995 und sodann die Pläne der Berliner Wissenschaftseinrichtungen für die zukünftige breitbandige Vernetzung einer Vielzahl von Standorten als allumfassendes *Berlin Research Area Information Network* dargestellt.

TR 95-06. W. Dalitz; M. Grötschel; J. Lügger; W. Sperber. *Verteiltes Informationssystem für die Mathematik.*

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

Abstract: “Das System ist zerbrochen!”, so lautet das Urteil von Keith Dennis, Professor an der Cornell University und neuer Verantwortlicher für die Mathematical Reviews, über das traditionelle Publikationswesen in der Mathematik. Was sind die Ursachen? Hauptsächlich sind es das starke Wachstum der mathematischen Literatur, die langen Verzögerungen von der Erstellung bis zum Erscheinen einer Arbeit, die hohen Ablehnungsraten bei mathematischen Journalen aufgrund beschränkter Seitenzahlen (und nicht wegen mangelnder Qualität) sowie drastisch steigende Preise für Zeitschriften und Bücher bei gleichzeitiger Reduktion der Bibliotheksetats.

TR 95-07. W. Dalitz; M. Grötschel; J. Lügger; W. Sperber. *Distributed Information System for Mathematics.*

Abstract: “The system is broken” is how Keith Dennis, professor at Cornell University and the new editor-in-chief of the Mathematical Reviews characterizes the traditional ways and means of publication in mathematics. What are the reasons? The main reasons are the extreme growth in the mathematical literature, the long delays between preparation and publication of an article, the high number of rejected papers due to page limitations (not lack of quality) as well as drastic price increases for journals and books with library budgets being reduced at the same time.

TR 95-08. M. Grötschel, J. Lügger und U. Zimmermann. *Wissenschaftliche Information am Wendepunkt? Zwänge, Krisen und Chancen aus Sicht der Mathematik.*

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

TR 95-09. Joachim Lügger. *Design-Überlegungen für ein Verteiltes Informationssystem für die Mathematik in Deutschland.* *

Abstract: Dieser Artikel beschreibt die ersten Schritte auf dem Wege zu einem Verteilten Informationssystem für die Mathematik, das von der

“Deutschen Mathematiker-Vereinigung” (DMV) vorbereitet wird. Die Darstellung erfolgt aus zwei unterschiedlichen Perspektiven.

Der erste Teil soll vor allem Lesern, die an der Motivation des Vorhabens und den organisatorischen Rahmenbedingungen interessiert sind, einen Zugang zu den zugrundeliegenden technischen Ideen bieten. Er skizziert zunächst die wissenschaftliche Zielsetzung des geplanten Vorhabens. Dann diskutiert er das Verteilte Informationssystem als Kombination aus einem elektronischen Nachrichtensystem (auf der Basis von E-mail), einem globalen Hypertextsystem (das die Informationsangebote der Partner des Projekts miteinander vernetzt) und einer verteilten, objektorientierten Datenbank (mit Interfaces zu den bereits genannten Komponenten). Dieser Teil schliesst mit einer knappen Betrachtung der Verhältnisse (auch der Chancen, Kosten einzusparen), die beim Übergang von traditionellen zu elektronischen Publikationsformen zu erwarten sind. Er führt insbesondere neue Möglichkeiten an, das geplante System auch für Zwecke des “Zentralblatt für Mathematik” einzusetzen.

Der zweite Teil richtet sich an den eher technisch interessierten Leser. Er diskutiert einen ersten Vorschlag zur Strukturierung der bei den Partnern verteilt vorliegenden Informationsangebote – vorwiegend aus Nutzersicht, d.h. möglichst unabhängig von den Idiosynkrasien der heute im Internet gegebenen Informationssysteme. Er enthält die technischen Kerngedanken zur Realisierung einer homogenen Informationsinfrastruktur bei den Partnern, die ein verteiltes und gleichzeitig hierarchisches Retrieval in den Informationsangeboten der Mathematik in Deutschland ermöglichen soll. Dieser Teil benennt erste Chancen zur Implementierung innerhalb der Hyper-G- und, als Fernziel, auch der WWW-Welt. Er zeigt aber, neben den neuen Möglichkeiten, auch Risiken und Grenzen der Machbarkeit mit heutigen Mitteln auf.

Die gesamte Darstellung orientiert sich an den Inhalten der bereits an anderer Stelle ausführlich vorgestellten Teilaufgaben und Teilprojekte und leitet daraus sowohl die vorgeschlagene Informationsstruktur als auch die technischen Mittel ab. Die wissenschaftlichen Inhalte und organisatorischen Ziele des Verteilten Informationssystems wurden in einer breiten (auch elektronisch geführten) Diskussion im Kreise der potentiellen Partner des Projekts ermittelt, insbesondere der Fachinformationsbeauftragten der Mathematik. Eine Anlage stellt eine vergleichende Betrachtung der Kosten auf, die einem mathematischen Fachbereich oder Forschungsinstitut bei der Weitergabe seiner wissenschaftlichen Reports auf Papier bzw. auf elektronischem Wege entstehen.

TR 95-10. Martin Grötschel; Joachim Lügger. *Aufbau elektronischer Informations- und Kommunikationsstrukturen.*

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

Abstract: Die vorliegende Arbeit ist die (z.T. wesentlich) erweiterte Fassung eines Vortrages auf dem Deutschen Dokumentartag im September 1995 an der Fachhochschule Potsdam. Unser Ziel ist eine Bestandsaufnahme der gegenwärtigen Entwicklungen auf dem Gebiet der elektronischen Information und Kommunikation. Wir diskutieren Chancen und Risiken, beleuchten gesellschaftliche Rahmenbedingungen - vor allem im Vergleich mit den Vereinigten Staaten von Amerika - und skizzieren Aufgaben im Bereich von Forschung, Staat und Wirtschaft, die unserer Meinung nach noch zu bewältigen sind.

Wir führen insbesondere in Gebiete ein, die vermutlich in naher Zukunft die Landschaft des Dokumentierens und Archivierens wesentlich verändern werden. Wir benutzen dabei häufig Beispiele und Modellvorstellungen aus der Mathematik, unserem eigenen Fachgebiet, die u.a. zeigen, wie Elemente des Informierens, Dokumentierens und Archivierens durch die neuen Technologien der elektronischen Datenverarbeitung und Kommunikation ineinander fließen. Mehr Leistung kann mit geringeren Kosten erzielt werden. Wir schliessen mit einer Auflistung von neuen Perspektiven und Möglichkeiten zum Handeln in diesem Bereich.

TR 95-11. Rudolf Beck; Bodo Erdmann; Rainer Roitzsch. *KASKADE User's Guide*.

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

Abstract: KASKADE 3.x was developed for the solution of partial differential equations in one, two, or three space dimensions. Its object-oriented implementation concept is based on the programming language C++. Adaptive finite element techniques are employed to provide solution procedures of optimal computational complexity. This implies a posteriori error estimation, local mesh refinement and multilevel preconditioning. The program was designed both as a platform for further developments of adaptive multilevel codes and as a tool to tackle practical problems. Up to now we have implemented scalar problem types like stationary or transient heat conduction. The latter one is solved with the Rothe method, enabling adaptivity both in space and time. Some nonlinear phenomena like obstacle problems or two-phase Stefan problems are incorporated as well. Extensions to vector-valued functions and complex arithmetic are provided. This report helps to work with KASKADE. Especially we

- study a set of examples,
- explain how to define a user's problem and
- introduce a graphical user interface.

We are extending this guide continuously. The latest version is available by network.

TR 95-12. Peter Deuffhard; Jürgen Gottschewski. *Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin. Struktur, wissenschaftliches Konzept und Einbettung in die Region.* *

Zusammenfassung: Die Arbeit beschreibt Konzept, Struktur und Ausstattung des ZIB. Übergeordnetes *Ziel* des ZIB ist die Beschleunigung des *Know-how Transfers* aus der mathematischen Grundlagenforschung über die Entwicklung von Algorithmen und Software bis hin zur tatsächlichen Nutzung in der Industrie. In der Tat ist Computational Mathematics inzwischen zu einer der wichtigsten *Schlüsseltechnologien* geworden, die nicht zuletzt im Zusammenhang mit der Standort-Diskussion eine wichtige Rolle spielt und vermehrt spielen wird. Dazu müssen Methodenentwicklung und Rechenzentrum auf höchstem Niveau sowie interdisziplinäre Forschung möglichst vereint in einer Institution mit enger Anbindung an ein universitäres Umfeld realisiert sein. Das Konrad-Zuse-Zentrum hat die wesentlichen Voraussetzungen als SC-Zentrum bereits geschaffen; ein Ausbau zum HPSC-Zentrum wäre eine natürliche Entwicklung – falls die Politik diese Chance rechtzeitig begreift!

TR 95-13. Frank Schmidt. *Simultaneous Computation of the Lowest Eigenvalues and Eigenvectors of the Helmholtz Equation.* *

Zusammenfassung: This report collects a number of proposals to determine the lowest eigensolutions of the scalar Helmholtz equation. The basic routine of all discussed algorithms is the standard Rayleigh quotient minimization process. The minimization is performed in a direct multilevel manner, and a subspace iteration is used to determine simultaneously a couple of eigensolutions. As smoother the nonlinear Gauß-Seidel, the nonlinear conjugate gradient method and a preconditioned version of this method are compared with respect to their efficiency. The numerical examples are based on realistic 1D and 2D models of integrated optics components.

TR 95-14. G.W. Zumbusch. *Simultaneous h-p Adaptation in Multilevel Finite Elements.*

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

5.3 Beiträge in Zeitschriften/Tagungsbänden

1. A. Abdel-Aziz Abdel-Hamid, N. Ascheuer, M. Grötschel, H. Schorer: *Simulation und Optimierung einer PC-Fertigung unter Echtzeitbedingungen*. In: A. Bachem, M. Jünger und R. Schrader (Hrsg.), *Mathematik in der Praxis – Fallstudien aus Industrie, Wirtschaft, Naturwissenschaften und Medizin*. Springer Verlag, 261–277 (1995)
2. K. Akemi, Ph. de Forcrand, M. Fujisaki, T. Hashimoto, H.C. Hege, et al.: *Quantum chromodynamics simulations on a non-dedicated highly parallel*

- computer. Comp. Phys. Comm. **90** 201–214 (1995)
3. D. Alevras, M. Rijal: *The convex hull of a linear congruence relation in zero–one variables*. ZOR – Mathematical Methods of Operations Research, **41/1** (1995)
 4. A. Ali Khan, M. Göckeler, R. Horsley, P.E.L. Rakow, G. Schierholz, H. Stüben: *Spectroscopy and Renormalization Group Flow of a Lattice Nambu–Jona-Lasinio Model*. Phys. Rev. **D51** 3751–3780 (1995)
 5. U. Ascher, H. Chin, L. Petzold, S. Reich: *Stabilization of constrained mechanical systems with DAEs and invariant manifolds*. Mech. Struct. & Mach. **23**, 135–157 (1995)
 6. F. Behrendt, O. Deutschmann, U. Maas, J. Warnatz: *Simulation and Sensitivity Analysis on the Heterogeneous Oxidation of Methane on a Platinum Foil*. J. Vac. Sci Technol. A **13** (3) (1995)
 7. W. Dalitz, M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber: *Verteiltes Informationssystem für die Mathematik — Kurzfassung eines Projektplans der DMV*. DMV–Mitteilungen, **1** 52–54 (1995)
 8. M. Dellnitz, M. Golubitsky, A. Hohmann, I. Stewart: *Spirals in Scalar Reaction–Diffusion Equations*. J. Bif. Chaos, **5** (6) 1487–1501 (1995)
 9. M. Dellnitz, A. Hohmann: *A Subdivision Algorithm for the Computation of Unstable Manifolds and Global Attractors*. Numerische Mathematik, to appear (1996)
 10. M. Dellnitz, M. Field, M. Golubitsky, A. Hohmann, J. Ma: *Cycling Chaos*. IEEE Circuits and Systems, **42** (10), 821–823 (1995)
 11. M. Dellnitz, A. Hohmann: *The Computation of Unstable Manifolds Using Subdivision and Continuation*. Progress in Nonlinear Differential Equations and Their Applications, Vol. 19, Birkhäuser Verlag Basel (1996)
 12. D. Dentcheva, W. Römisch, R. Schultz: *Strong convexity and directional derivatives of marginal values in two–stage stochastic programming*. In: Stochastic Programming – Numerical Techniques and Engineering Applications, No. 423 in Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems, 8–21, Springer–Verlag Heidelberg (1995)
 13. P. Deuffhard, U. Nowak, J. Weyer: *Prognoserechnungen zur AIDS–Ausbreitung in der Bundesrepublik Deutschland*. In: A. Bachem, M. Jünger, R. Schrader (Hrsg.): Mathematik in der Praxis. Springer–Verlag, pp. 361–376 (1995)

14. P. Deuffhard, J. Lang, U. Nowak: *Adaptive Algorithms in Dynamical Process Simulation*. Tagungsband ECMI (1995)
15. P. Deuffhard, M. Wulkow: *Simulationsverfahren für die Polymerchemie*. Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, Preprint SC 94-22 (1994). In: A. Bachem, M. Jünger, R. Schrader (Hrsg.): *Mathematik in der Praxis*, Springer-Verlag, pp. 117-136 (1995)
16. P. Deuffhard: *Computational Mathematics as Key Technology*. In: A. Sydow (ed.), "Systems Analysis Modelling Simulation (SAMS)". Invited paper, Proc. IMACS Symposium on Systems Analysis and Simulation, Berlin, 26-30 June 1995, Gordon and Breach Science Publishers SA, Vol. 18-19, pp. 19-26 (1995)
17. K. Gatermann: *Testing for S_n -Symmetry with a Recursive Detective*. ZIB-Berlin, Preprint SC 95-12 (1995) In: H.W. Broer, S.A. von Gils, I. Hoveijn, F. Takens (Eds.), *Nonlinear Dynamical Systems and Chaos*, p. 61-78, Birkhäuser, Basel, Boston, Berlin (1996)
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* (1995)
19. J. Gellermann, P. Wust, A. Wiener, D. Stalling, H. Stahl, R. Felix: *Optimization Strategies in Hyperthermia Planning Compared with those Used in Radiotherapy Planning*. Proc. CAR'95 Computer Assisted Radiology, 9th International Symposium and Exhibition, Berlin, June 21-24, 1083-1087 (1995)
20. M. Göckeler, R. Horsley, V. Linke, P.E.L. Rakow, G. Schierholz, H. Stüben: *Probing the Continuum Limit in Non-Compact QED: New Results on Large Lattices*. Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **42**, 660-662 (1995)
21. R. Götz: *Schnelle Algorithmen, schnelle Rechner, hohe Datenvolumen*. STK-Zeitschrift "notes" (1995)
22. M. Grötschel: *Neues zum Thema IuK und Kooperationsvereinbarung zwischen der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV), der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG), der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) und der Gesellschaft für Informatik (GI) zur elektronischen Information und Kommunikation*. DMV-Mitteilungen **3** 6-11 (1995)
23. M. Grötschel, C. L. Monma, M. Stoer: *Design of Survivable Networks*. In: M.O. Ball (ed.) *Network Models*. Handbooks in Operations Research

- and Management Science, Volume 7, North-Holland, Amsterdam 617–672 (1995)
24. M. Grötschel, C. Monma, M. Stoer: *Polyhedral and Computational Investigations for Designing Communication Networks with High Survivability Requirements*. Operations Research, Vol. 43, No. 6, 1012–1024 (1995)
 25. M. Grötschel, J. Lügger: *Die Zukunft wissenschaftlicher Kommunikation aus Sicht der Mathematik*. Spektrum der Wissenschaft, 39–43 (1995)
 26. M. Grötschel, J. Lügger: *Aufbau elektronischer Informations- und Kommunikationsstrukturen*. Newsletter der Gesellschaft für Mathematik, “Ökonomie und Operations Research”, Heft 3/4, 24–66 (1995)
 27. M. Grötschel, J. Lügger: *Wissenschaftliche Kommunikation am Wendepunkt – Bibliotheken im Zeitalter globaler elektronischer Netze*. Zeitschrift für Bibliothekswesen und Bibliographie, 42. Jahrgang, Heft 3 (1995)
 28. M. Grötschel, J. Lügger: *Neue Produkte für die digitale Bibliothek: die Rolle der Wissenschaften*. Erscheint in: Die unendliche Bibliothek, Verlag Harrassowitz (1996)
 29. M. Grötschel, J. Lügger, U. Zimmermann: *Wissenschaftliche Information am Wendepunkt? Zwänge, Krisen und Chancen aus Sicht der Mathematik*. Kurzfassung. Proc. VCH Bibliothekartreffen, Verlag Chemie, Weinheim (1995)
 30. M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel: *Routing in grid graphs by cutting planes*. ZOR – Mathematical Methods of Operations Research, 43. Jahrgang, Heft 3, 255–275 (1995)
 31. M. Grötschel, C. D. Godsil, D. J. A. Welsh: *Combinatorics in Statistical Physics*. Chapter 37, 1925–1954, in: Handbook of Combinatorics, Volume II, 1995, North-Holland, Hrsg.: R. Graham, M. Grötschel, L. Lovász
 32. M. Grötschel, L. Lovász: *Combinatorial Optimization*. Chapter 28, 1541–1597, in: Handbook of Combinatorics, Volume II, 1995, North-Holland, Hrsg.: R. Graham, M. Grötschel, L. Lovász
 33. N. Gröwe, W. Römisch, R. Schultz: *A simple recourse model for power dispatch under uncertain demand*. Annals of Operations Research **59** (1995)
 34. D. Gruntz, W. Koepf: *Maple package on formal power series*. Maple Technical Newsletter 2 (2), 22–28 (1995)
 35. H.C. Hege, H. Stüben: *Daten “sehen” — Wissenschaftliche Visualisierung im RTB Berlin*. DFN Mitteilungen **38**, 10–12 (1995)

36. T. Heitzmann, J. Wolfrum, U. Maas, J. Warnatz: *Experimental and Modeling Studies on the Ignition of CH, OH – O₂ Mixtures with a CO₂-Laser System*. Z. Phys. Chem. **188**, S. 177 (1995)
37. C. Helmberg: *Cutting aluminium coils with high length variabilities*. Annals of Operations Research **57** (1995)
38. C. Helmberg, S. Poljak, F. Rendl, H. Wolkowicz: *Combining semidefinite and polyhedral relaxations for integer programs*. In: Integer Programming and Combinatorial Optimization, **920** in Lecture Notes in Computer Science, Springer-Verlag Heidelberg, 124–134 (1995)
39. C. Helmberg, F. Rendl: *A spectral approach to bandwidth and separator problems in graphs*. Linear and Multilinear Algebra **39** (1995)
40. A. Hoferichter, V.K. Mitryushkin, M. Müller-Preussker, T. Neuhaus, H. Stüben: *Compact lattice QED with Wilson fermions*. Nucl. Phys. **B434** 358–380 (1995)
41. S. Klinke, J. Polzehl: *Exploratory projection pursuit*. In: Xplore an interactive statistical computing environment, Springer Texts in Computational Statistics, Springer-Verlag New York, 203–226 (1995)
42. W. Koepf: *Algorithmische Bestimmung von Differentialgleichungen*. ZAMM Sonderband zur GAMM-Jahrestagung 1994 in Braunschweig, ZAMM 75 S II, 533–534 (1995)
43. W. Koepf: *Algebraische Darstellung transzendenter Funktionen*. Themen und Anwendungen der Computeralgebra, Computeralgebra-Rundbrief 16, Fachgruppe Computeralgebra der GI-DMV-GAMM, 12–18 (1995)
44. W. Koepf: *REDUCE package for indefinite and definite summation*. SIGSAM Bulletin **29**, 14–30 (1995)
45. W. Koepf: *Was ist 0⁰?* In: Der Mathematikunterricht 41 (4/1995), *Derive-Projekte im Mathematikunterricht*, herausgegeben von Wolfram Koepf, 65–71 (1995)
46. W. Koepf: *Workshop für Fortgeschrittene*. Tagungsband der *Derive Days Düsseldorf*, 19.–21.4.95, herausgegeben von Bärbel Barzel, Landesmedienzentrum Rheinland-Pfalz, Düsseldorf, 191–201 (1995)
47. J. Lang: *Two-dimensional fully adaptive solutions of reaction-diffusion equations*. Applied Numerical Mathematics, **18**, 223–240 (1995)

48. J. Lang, J. Fröhlich: *Selfadaptive Finite Element Computation of Combustion Processes*. In: R.W. Lewis, P. Durbetaki (eds.), *Numerical Methods in Thermal Problems*, Pinderidge Press, Swansea, **9**, 761–769 (1995)
49. J. Lang, A. Walter: *An Adaptive Discontinuous Finite Element Method for the Transport Equation*. *Journal of Computational Physics*, **117**, 28–34 (1995)
50. B. Leimkuhler, S. Reich, R.D. Skeel: *Integration methods for molecular dynamics*. In: *IMA Volumes in Mathematics and its Applications*, Vol. **82**, J.P. Mesirov, K. Schulten, De Witt Sumners (eds.), Springer Verlag, 161–186 (1995)
51. Ch. Lubich, U. Nowak, U. Pöhle, Ch. Engstler: *Numerical Integration of Constrained Mechanical Systems Using MEXX*. *Mech. Struct. & Mach.*, **23** (4) pp. 473–495 (1995)
52. J. Lügger: *On Changing Patterns of Mathematical Communication — Breakdowns in Traditional Publication*. Proc. EUNIS’95 Congress “Trends in Academic Information Systems in Europe”, Universität Düsseldorf 31–54 (1995)
53. U. Maas: *Coupling of Chemical Reaction with Flow and Molecular Transport*. *Applications of Mathematics* **40** (3) S. 249 (1995)
54. J. Nadobny, P. Wust, M. Seebass, P. Deuffhard, R. Felix: *The use of the volume–surface integral equation method (VSIE) for antenna problems*. Proceedings of the COST244 meeting on Reference Models for Bioelectromagnetic Test of Mobile Communication Systems, Roma, 17–19, November 1994 , pp 67–74 (1995)
55. J. Nadobny, P. Wust, M. Seebass, P. Deuffhard, R. Felix: *The VSIE method in comparison to the FDTD method for realistic problems in heterogeneous biological bodies*. Proceedings of the Progress in Electromagnetics Research Symposium, 24–28 July 1995, Seattle, Washington USA, p. 689 (1995)
56. M. Nau, A. Wölfert, U. Maas, J. Warnatz: *PDF–Simulation turbulenter Flammen unter Verwendung automatisch reduzierter Reaktionsmechanismen*. 17. Deutscher Flammentag, Hamburg, VDI–Berichte 1193, S. 203 (1995)
57. J. Polzehl: *Regression–based short term prediction of electrical load for a power system*. In: *ASA 1994 Proceedings of the Section on Physical and Engineering Sciences*, 285–290, Alexandria, VA, USA (1995)

58. J. Polzehl: *Projection pursuit discriminant analysis*. Computational Statistics & Data Analysis **20/2** (1995)
59. S. Reich: *On the local qualitative behavior of DAEs*. Circ., Syst., Sig. Process **14**, 427–443, (1995)
60. S. Reich: *Smoothed Dynamics of highly oscillatory Hamiltonian systems*. Physica D **89**, 28–42 (1995)
61. R. Roitzsch, B. Erdmann, J. Lang, R. Beck: *KASKADE — ein Baukasten zur Programmierung von adaptiven Finite-Elemente-Methoden*. Proceedings Parallele Lösung großer Gleichungssysteme, Technische Universität Chemnitz–Zwickau (1995)
62. R. Schultz: *Strong convexity in stochastic programs with complete recourse*. Journal of Computational and Applied Mathematics **56** 1–2 (1994)
63. R. Schultz: *On structure and stability in stochastic programs with random technology matrix and complete integer recourse*. Mathematical Programming **70/1** (1995)
64. A. Schulz, R. Weismantel, G. Ziegler: *0/1 integer programming: optimization and augmentation are equivalent*. In: Algorithms–ESA95, Lecture Notes in Computer Science, **979** 473–483 Springer–Verlag New York (1995)
65. D. Stalling, H.C. Hege: *Design and Implementation of a Hyperthermia Planning System*. In: B. Arnolds, H. Müller, T. Tolxdorff, D. Saupe (eds.): Proceedings zum Workshop “Digitale Bilderverarbeitung in der Medizin”, März 1995, Freiburg/Breisgau, 11 p. (1995)
66. D. Stalling, H.C. Hege: *Fast and Resolution Independent Line Integral Convolution*. Proceedings of SIGGRAPH’95, Los Angeles, CA, USA, August 1995, 6–11), in: “Computer Graphics”, Annual Conference Series, ACM SIGGRAPH, 249–256 (1995)
67. D. Stalling, H.C. Hege, T. Höllerer: *Visualization and 3D–Interaction of Hyperthermia Treatment Planning*. Proc. CAR’95 Computer Assisted Radiology, 9th International Symposium and Exhibition, Berlin, June 21–24, 1216–1222 (1995)
68. H. Stüben: *The Cray T3D as a Production Machine at Konrad-Zuse-Zentrum Berlin*. Proceedings, HPCN Europe 1995, Lecture Notes in Computer Science 919, Springer, 347–350 (1995)
69. B. Sturmfels, R. Weismantel, G. Ziegler: *Gröbner bases of lattices, corner polyhedra and integer programming*. Beiträge zur Geometrie und Algebra **36** (1995)

70. J. Verschelde, K. Gatermann: *Symmetric Newton Polytopes for Solving Sparse Polynomial Systems*. Adv. Appl. Math. 16, No. 1, p. 95-127 (1995)
71. A. Wölfert, U. Maas, J. Warnatz: *PDF-Simulation of Turbulent Channel Flow Including Near-Wall Sublayer Using a Generalized Langevin Model*. 17. Universität Heidelberg, Preprintreihe des SFB 359, 95-33 (1995)
72. P. Wust, M. Seebass, J. Nadobny, R. Felix: *Electromagnetic deep heating technology*. In: M.H. Seegenschmiedt, P. Fessenden, C.C. Vernon (Hrsg.) Medical Radiology, Volume "Principles and Practice of Thermoradiotherapy and Thermochemotherapy". Springer-Verlag, pp. 219-251 (1995)

5.4 Monographien

W. Dalitz, G. Heyer

Hyper-G, das Internet-Informationssystem der 2. Generation

dpunkt, Heidelberg (1995), ISBN 3-920993-14-4

Hyper-G, das Informationssystem der 2. Generation im Internet, macht Schluß mit dem "Lost-in-Hyperspace"-Syndrom im World-Wide-Web. Es bietet neue Orientierungsmöglichkeiten sowohl für Anbieter als auch für Leser von Informationen im Internet:

- eine hierarchische Strukturierung des Informationsangebotes,
- eine integrierte Datenbank zur Suche,
- ein hypermediales System, das Hyperlinks nicht nur in Texten, sondern in allen Arten von Dokumenten (Texte, Bilder, Videos, ...) erlaubt

Dieses Buch beschreibt ausführlich und anschaulich,

- wie Sie mit den Hyper-G-Clients Harmony und Amadeus Hyper-G-Server und andere Informationssysteme browsen können,
- wie Sie auch mit WWW-Clients wie Mosaic und Netscape die Vorteile von Hyper-G nutzen können
- und wie Sie mit Hyper-G Ihr eigenes hypermediales Informationsangebot aufbauen können.

P. Deuffhard, A. Hohmann:

Numerical Analysis. A First Course in Scientific Computation

Translator: F.A. Potra and F. Schulz

Walter de Gruyter, Berlin, New York (1995), ISBN 3-11-013882-4

The complexity barrier for solvable computational problems is nowadays pushed at equal rates by the rapid development of both computers and algorithms, hardware and software. This textbook on Numerical Analysis is a first introduction to the fundamentals of efficient algorithms. The selection of topics and the presentation of the material has been made with a strict view to the needs of Computational Science. Important concepts of modern numerical analysis are illustrated with the simplest type of problem to which they are applicable. The main aim of the book is the development of algorithmic thinking and intuition.

The book addresses students of mathematics and the natural sciences, as well as applied mathematicians and computational scientists in academia and industry. Required prerequisites are a basic knowledge of undergraduate Linear Algebra and Calculus.

R. Graham, M. Grötschel, L. Lovász (Hrsg.):

Handbook of Combinatorics.

North-Holland, Amsterdam, Volume I, pp. 1-1018 (1995), ISBN 0-444-82346-8

R. Graham, M. Grötschel, L. Lovász (Hrsg.):

Handbook of Combinatorics.

North-Holland, Amsterdam, Volume II, pp. 1019-2198 (1995), ISBN 0-444-82351-4

Das Handbuch "Handbook of Combinatorics" enthält Übersichtsartikel aus vergleichenden Gebieten der Diskreten Mathematik, Graphentheorie, Kombinatorik, Kombinatorischen Optimierung und Polyedrischen Kombinatorik, der Spieltheorie und Komplexitätstheorie.

5.5 Habilitationen

Ralf Kornhuber, WIAS (früher Abt. Numerik):

Adaptive Monotone Multigrid Methods for Variational Problems

Freie Universität Berlin (1995)

Robert Weismantel (Abt. Kombinatorische Optimierung):

Knapsack Problems, Test Sets and Polyhedra

Technische Universität Berlin (1995)

5.6 Dissertationen

Freie Universität Berlin

Gerhard Zumbusch (Abt. Numerik): *Simultaneous h - p Adaptation in Multilevel Finite Element Methods*

Betreuer (FU Berlin und ZIB): Prof. Dr. P. Deuffhard

Technische Universität Berlin

Norbert Ascheuer (Abt. Kombinatorische Optimierung): *Hamiltonian Path Problems in the On-Line Optimization of Flexible Manufacturing Systems*

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

Humboldt-Universität zu Berlin

Nicole Gröwe (Abt. Kombinatorische Optimierung): *Numerical Solution and Asymptotic Analysis of Stochastic Programs*

Betreuer: Prof. Dr. Römisch

5.7 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

Christine Deittert (Abt. Numerik): *Klimamodellierung — Grundstrukturen und Techniken aus der Sicht der Mathematik*

Betreuer (FU Berlin und ZIB): Prof. Dr. P. Deuffhard

Jörg Heroth (Abt. Numerik): *Adaptive Dimensionsreduktion chemischer Reaktionssysteme*

Betreuer (FU Berlin und ZIB): Prof. Dr. P. Deuffhard

Martin Schemann (Abt. Numerik): *Eine adaptive Rothe-Methode für die zweidimensionale Wellengleichung*

Betreuer (FU Berlin und ZIB): Prof. Dr. P. Deuffhard

Martin Weiser (Abt. Numerik): *Newton-artige Iterationsverfahren zur Minimierung strikt konvexer Funktionale*

Betreuer (FU Berlin und ZIB): Prof. Dr. P. Deuffhard

Technische Universität Berlin

Monica Ahuna (Abt. Kombinatorische Optimierung): *Hilbert-Basen und ganzzahlige Programme in zwei Variablen*

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

Claudia Betz-Haubold (Abt. Kombinatorische Optimierung): *Schnittebenen für Rucksackprobleme*

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

Olaf Galler (Abt. Kombinatorische Optimierung): *Packen von Wegen unter topologischen Nebenbedingungen*

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

Dirk Herzog (Abt. Kombinatorische Optimierung): *Optimierungsprobleme in Kostenplanungs- und Kontrollsystemen am Beispiel der Top-Down-Rechnung in INZPLA*

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

Thorsten Koch (Abt. Kombinatorische Optimierung): *Ein Branch&Cut-Verfahren zur Lösung des gewichteten Steinerbaumproblems in Graphen*

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

Thomas Neustupny (Abt. Kombinatorische Optimierung): *Generierung oktilinearer Layoutstrukturen für CMOS-Komplexgatter*

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

Christian Oliva-Seidel (Abt. Kombinatorische Optimierung): *Fahrzeugumlaufplanung durch Dantzig-Wolfe-Dekomposition: Implementierung eines parallelen Verfahrens*

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

Regina Urbaniak (Abt. Kombinatorische Optimierung): *Gröbner-Basen in der ganzzahligen Optimierung*

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

Dana Wengrzik (Abt. Kombinatorische Optimierung): *Schnittebenenverfahren für Blockdesign-Probleme*

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

5.8 Auszeichnungen und Rufe

P. Deuffhard Ruf auf den Lehrstuhl für “Technisch–Wissenschaftliches Hochleistungsrechnen” an der RWTH Aachen, verbunden mit dem Aufbau eines interdisziplinären Kompetenzzentrums

M. Grötschel Gottfried Wilhelm Leibniz–Preis 1995 der Deutschen Forschungsgemeinschaft

Wahl zum ordentlichen Mitglied der Berlin–Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften

R. Kornhuber (WIAS, vormals ZIB) Ruf auf eine C3–Professur am Mathematischen Institut der Universität Stuttgart

G.M. Ziegler (vormals ZIB) Annahme des Rufes auf eine C3–Professur am Fachbereich Mathematik der TU Berlin zum 01.01.1995

5.9 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

- Newsletter of the *SIAM Activity Group on Orthogonal Polynomials and Special Functions*

6 Produkte

6.1 Symbolische Verfahren (REDUCE, Mathematica, Maple)

A REDUCE

Das ZIB vertreibt den LISP Dialekt Portable Standard LISP (PSL) in der (neuen) Version 4.2 und das darauf aufbauende Programmsystem REDUCE für symbolische Mathematik (Anthony C. Hearn et al.). Im Jahre 1995 wurde die Version 3.6 weltweit für zahlreiche Rechnersysteme freigegeben. 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, S. Kameny)

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)

INEQ Lösen linearer Ungleichungssysteme (H. Melenk)

LINALG Diverse Funktionen aus der linearen Algebra (M. Rebeck)

MSOLVE Lösen modularer Gleichungen und Systeme (H. Melenk)

NCPOLY Nichtkommutative Polynome (H. Melenk, J. Apel)

NORMFORM Normalformen von Matrizen (M. Rebeck, T. Moulders)

NUMERIC Numerische (approximative) Algorithmen (H. Melenk)

REACTEQN Chemische Reaktionssysteme (H. Melenk)

RDEBUG Debug im Algebraischen Mode (H. Melenk)

RESIDUE Berechnung von Residuen (W. Koepf)
SPECFN Spezielle Funktionen (W. Neun, C. Cannam et al.)
SYMMETRY Blockdiagonalformen symmetrischer Matrizen (K. Gatermann)
TAYLOR Multivariate abgebrochene Taylorreihen (R. Schöpf)
TRIGSIMP Simplifikation von trigonometrischen Ausdrücken (W. Koepf, H. Melenk, A. Bernig)
ZEILBERG symbolische Summation (W. Koepf, G. Stölting)
ZTRANS Z-Transformation und inverse Z-Transformatio (W. Koepf, L. Temme)

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

B Mathematica

PowerSeries

W. Koepf: *Ein Mathematica Package für die Behandlung von Differentialgleichungen, Rekursionsgleichungen und symbolischen Potenzreihen.* Das Package ist über WWW in `ftp://ftp.zib-berlin/pub/PowerSeries` und ferner in der Datenbank MathSource unter der Nummer 0207-379 erhältlich.

SpecialFunctions

W. Koepf: *Ein Mathematica Package für die Behandlung orthogonaler Polynome und holonomer spezieller Funktionen.* Das Package ist über WWW in `ftp://ftp.zib-berlin/pub/UserHome/Koepf/SpecialFunctions` erhältlich.

C 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 über WWW in `ftp://ftp.zib-berlin/pub/summation` erhältlich.

6.2 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++.

6.3 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.

A Große nichtsymmetrische lineare Gleichungssysteme

GBIT1 Iterative Sekanten-Methode basierend auf "Good Broyden updates" mit passender optimaler Schrittlängenbestimmung (mnemotechnisch für: Good Broyden ITeration)

B 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 Affinivariant Newton Techniques)

C 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

D 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

E Partielle Differentialgleichungen

KASKADE 2.1 FEM–Baukasten für adaptive Multilevel–Verfahren auf beliebigen Gebieten (2D, 3D), Programmiersprache C.

Anwendungen: stationäre, skalare, lineare elliptische Probleme (ellkask); parabolische Gleichungslöser (Kastio)

KASKADE 3.0 FEM–Baukasten für adaptive Multilevel–Verfahren auf beliebigen Gebieten (1D, 2D, 3D), Programmiersprache C++.

Anwendungen: stationäre und transiente Wärmeleitung, nichtlineare Probleme wie Hindernisprobleme, Poröse–Medien–Gleichungen, Phasenübergänge

F 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.

6.4 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. Weitere Hinweise sind in Kapitel 3 zu finden.

7 Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB–Mitarbeitern

7.1 Vorträge und Gastaufenthalte

D. Alevras

23.03.95 *Capacity Expansion of Survivable Telecommunication Networks for Cellular Phones.* Stern School of Business, New York University, NY, USA

20.06.95 *DISCNET.* E-plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf

14.09.95 *Experience with a mixed-integer programming model for the dimensioning of survivable telecommunication networks.* Symposium über Operations Research (SOR'95), Passau

13.11.95 *Dimensionierung von Mobilfunknetzen.* Graduiertenkollegvorlesung, Berlin

14.12.95 *Modelle zur Dimensionierung und zum Routen in Mobilfunknetzen.* E-plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf

N. Ascheuer

19.05.95 *Order picking in an automatic warehouse: Solving on-line asymmetric TSP's.* PROSEM '95, Molde, Norwegen

14.09.95 *Order picking in an automatic warehouse: Solving on-line asymmetric TSP's.* SOR '95, Passau

31.10.95 *Order picking in an automatic warehouse: Solving on-line asymmetric TSP's.* INFORMS 1995, New Orleans, USA

W. Baumann

31.05.95 *Towards Interactive Distributed Simulation and Visualization.* Vis-Math Workshop, Harnack-Haus, Berlin

28.11.95 *Computational Fluid Dynamics (CFD) — Modellierung und Berechnung von Strömungsvorgängen mit chemischen Reaktionen.* Institutskolloquium, Humboldt-Universität zu Berlin

R. Beck

08.12.95 *Adaptive Whitney-Finite-Elemente-Methoden zur Lösung der Maxwell-Gleichungen.* Siemens AG, Abteilung ZFE, Erlangen

11.12.95 *Finite-Elemente-Simulation elektromagnetischer Felder: Lösungsverfahren mit Vektor-Basen und adaptiver Gitterverfeinerung.* TH Darmstadt, Fachbereich 18 für elektrische Nachrichtentechnik, Darmstadt

R. Borndörfer

13.09.95 *Optimization of Set Partitioning Problems Arising in Dial-a-Ride Systems.* Symposium über Operations Research 1995, Passau

21.11.95 *Optimization of Set Partitioning Problems Arising in Dial-a-Ride Systems.* Siemens Workshop Angewandte Diskrete Optimierung, Pommersfelden

F. Bornemann

28.03.95 *On the error of cascadic iterations.* Multiscale Methods in Numerical Analysis, WIAS, Berlin

04.05.95 *On the error of cascadic iterations.* Multilevel Methods and Applications, Oberwolfach

13.05.95 *Probleme beim digitalen Telefon.* Berliner Tag der Mathematik, FU Berlin

07.09.95 *Standardmehrgitter und kaskadisches Mehrgitter — ein Vergleich.* RWTH Aachen

18.09.95 *Mittlere Dynamik nichtlinearer hochoszillatorischer Hamiltonscher Systeme: Der Grenzfall.* DMV-Jahrestagung, Ulm

09.10.95 *Different Models for Quantum-Classical Molecular Dynamics.* Joint German-Polish Workshop on Computational Physics, ZIB, Berlin

07.12.95 *Die Mathematik der menschlichen Stimme: Probleme beim digitalen Telefon.* URANIA, Berlin

M. Brandt

09.01.95 *Mittlere Verweilzeiten in einem Processor-sharing Modell mit mehreren Warteschlangen.* Martin-Luther-Universität Halle

16.01.95 *Approximationen für die Verteilungsfunktion der Summe von identisch verteilten stochastisch unabhängigen Zufallsgrößen.* Martin-Luther-Universität Halle

22.09.95 *Asymptotic developments of the superposition of packet arrival streams in ATM networks.* DMV-Jahrestagung 1995, Ulm

H. Busch

- 01.03.95** *BRAIN (Berlin Research Area Information Network)*. Das Berliner Breitbandnetz für die Wissenschaft – was ist geplant? Das BRTB (Berlin Regional Testbed) – was existiert? Treffen der Berliner Arbeitsgruppe Netzwerke (BAN), Hahn–Meitner–Institut, Berlin
- 06.03.95** *Der Einsatz des CRAY T3D als Produktionsrechner am ZIB*. Sitzung des Arbeitskreises Supercomputing im ZKI, Gesamthochschule Kassel
- 27.04.95** *Der Einsatz des CRAY T3D als Produktionsrechner am ZIB*. Sitzung des Arbeitskreises UNICOS, EDS Deutschland GmbH, Rüsselsheim
- 28.06.95** *BRTB– 1. Stufe des Berliner Breitbandnetzes für die deutsche Wissenschaft*. Veranstaltung, Humboldt–Universität zu Berlin

W. Dalitz

- 08.03.95** *Strukturüberlegungen für das verteilte Informationssystem der Mathematik*. Gemeinsamer Workshop “Neue Wege der wissenschaftlichen Information und Kommunikation” der Fachgesellschaften DMV, DPG, GDCh und GI in der TU Berlin
- 29.03.95** *Neue Perspektiven eines verteilten Informationssystems für die Mathematik*. ZUMA SoftStat'95 — 8. Konferenz über die wissenschaftliche Anwendung von Statistik–Software, Universität Heidelberg
- 07.05.95** *Das Math–Net — ein verteiltes Informationssystem für die Mathematik*. Workshop Software Engineering im Scientific Computing, Universität Hamburg 6.–8.5.1995
- 12.05.95** *Ein verteiltes Informationssystem für die Mathematik*. Linux/Internet Kongress, Berlin 11.–12.5.1995
- 13.05.95** *In 7 Sekunden um die Welt*. Berliner Tag der Mathematik, FB Mathematik und Informatik, FU Berlin
- 22.11.95** *Informations– und Retrievalsysteme im Internet am Beispiel der Mathematik*. AGB–Seminar, Konrad–Zuse–Zentrum Berlin

P. Deuffhard

- 31.01.95** *Adaptive Galerkin–Methoden für dynamische Systeme*. Vortrag, Kolloquium, Fachbereich Mathematik und Informatik, Universität Bremen

- 06.02.95** *Adaptivität versus Parallelität bei Multi-Level-Methoden für partielle Differentialgleichungen.* Vortrag, Interuniversitäres Kolloquium über Parallelverarbeitung in technisch-naturwissenschaftlichen Anwendungen, Wissenschaftszentrum Bonn
- 01.03.95** *Dynamische Dimensionsreduktion für Probleme der Verbrennungsschemie.* Vortrag, Workshop “Scientific Computing in der Chemischen Verfahrenstechnik”, Universität Hamburg
- 23.03.95** *Konrad-Zuse-Zentrum Berlin: Scientific Concept and Selected Projects.* Vortrag, Siemens, Princeton, USA
- 24.03.95** Gastaufenthalt, NEC, Princeton, USA
- 24.03.95** *Adaptive Galerkin Methods for Dynamical Systems.* Seminarvortrag, University of Princeton, USA
- 27.03.95** *Adaptive Multilevel Finite Element Methods for Partial Differential Equations.* Vortrag, University of Minnesota, USA
- 30.03.95** Gastaufenthalt, RAND Corporation, Santa Monica, USA
- 01.04.95** *ODEs are not OLDIEs — Current Views & Activities.* Invited talk, International Conference on Scientific Computation and Differential Equations (SciCADE'95), Stanford, USA California.
- 03.04.95** *Adaptive Multilevel Finite Element Methods for Partial Differential Equations.* Vortrag, Rice University, Houston Texas, USA
- 05.04.95** *Discrete Galerkin Methods for Macromolecular Reaction Kinetics.* Vortrag, University of Houston, Texas, USA
- 02.05.95** *Cascadic Conjugate Gradient Methods for Elliptic PDEs.* Vortrag, Conference on Multilevel Methods and Applications, Oberwolfach
- 13.05.95** *Irrgärten und Irrflüge. Vermeidbare und unvermeidbare Rechenfehler auf dem Computer.* Öffentlicher Vortrag, Berliner Tag der Mathematik, Freie Universität Berlin
- 16.05.95** *Cascadic Multigrid Methods.* Invited talk, 8th International Conference on Domain Decomposition Methods (DDM8), Beijing, China
- 08.06.95** *Adaptive Galerkin-Methoden für makromolekulare Reaktionskinetik und turbulente reaktive Strömungen.* Kolloquium, Institut für Physikalische Chemie, Universität Göttingen

- 18.06.95** *Adaptive Discrete Galerkin Methods in Macromolecular Reaction Kinetics*. Vortrag, DFG Workshop “Dynamics of Microstructures: Analysis and Efficient Simulation”, Hannover
- 28.06.95** *Computational Mathematics as Key Technology*. Invited talk, 5th International IMACS-Symposium on Systems Analysis and Simulation (IMACS-SAS’95), Berlin
- 16.08.95** *Adaptive Multilevel Finite Element Methods in Technology and Medicine*. Invited talk, 4th International Conference on Advanced Numerical Analysis, Moscow, Russia
- 13.09.95** *Das Konrad-Zuse-Zentrum Berlin — Struktur, wissenschaftliches Konzept und Einbettung in die Region*. Eingeladener Vortrag, Statustagung des BMBF “HPSC 1995”, Stand und Perspektiven des Parallelen Höchstleistungsrechnens und seiner Anwendungen, KFA Jülich
- 19.09.95** *Irrgärten und Irrflüge. Vermeidbare und unvermeidbare Rechenfehler auf dem Computer*. Vortrag vor Schülern des Hans-und-Sophie-Scholl-Gymnasiums, Ulm
- 06.10.95** *Irrgärten und Irrflüge. Vermeidbare und unvermeidbare Rechenfehler auf dem Computer*. Vortrag, Hochbegabtenseminar für Schüler des Landes Sachsen-Anhalt, Fachbereich Mathematik und Informatik, Technische Universität Halle
- 06.10.95** *Mathematische Methoden der dynamischen Prozeßsimulation*. Kolloquium, Fachbereich Mathematik und Informatik, Technische Universität Halle
- 25.09.95** *Schnelle Algorithmen, schnelle Rechner — ein dynamisches Wechselspiel*. Vortrag anlässlich der Einweihung des IBM-Parallelrechners SP-2, Brandenburgische Technische Universität Cottbus
- 27.10.95** *Adaptive Multilevelmethoden für Eigenwertprobleme der Integrierten Optik*. Vortrag, Statusseminar der anwendungsorientierten Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik des BMBF, München
- 13.11.95** *Hyperthermie: adaptive Multilevel-Methoden und Visualisierung in der Krebsbehandlung*. Eingeladener Vortrag, Tagung Forschungsverbund NRW “Numerische Simulation und Visualisierung”, Fachbereich Mathematik, Universität Dortmund
- 08.12.95** *Adaptive Newton-Methoden und Affin-Invarianzen bei nichtlinearen Problemen*. Vortrag, Siemens, Erlangen

A. Eisenblätter

21.09.95 *On some Polynomial-Time Bounded Operators in Structural Complexity Theory.* DMV–Studentenkonferenz, Ulm

B. Erdmann

07.06.95 *Entwicklung und Pflege der FEM–Code–Familie KASKADE.* Tagung “Software Engineering im Scientific Computing”, Universität Hamburg

J. Fröhlich

03.03.95 *Eine adaptive Galerkinmethode zur Diskretisierung der Wahrscheinlichkeitsdichte in turbulenten reaktiven Strömungen.* Scientific Computing in der Chemischen Verfahrenstechnik, Hamburg

05.07.95 *A Galerkin Method for the PDF Closure in Turbulent Reactive Flows.* 3rd International Conference on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM), Hamburg

K. Gatermann

22.05.95 *Symbolic computations in the treatment of dynamical systems.* SIAM Conference on Applications of Dynamical Systems, Snowbird, Utah, USA

20.06.95 *Automatic classification of bifurcation problems.* Workshop NLDS, Amsterdam, Niederlande, 19.–22.06.95

28.06.95 *Automatic classification of normal forms.* Oberwolfach, Bifurkation und Symmetrie, 25.06–01.07.95

20.10.95 *Recursive Detectives.* Workshop on Dynamics and Symmetry, Cambridge, Great Britain, 30.10.–03.11.95

13.12.95 *Invariants and Recursive Equivariants.* Dynamical Systems Conference, Groningen, Niederlande, 11.–15.12.95

R. Götz

27.04.95 *Data Migration Facility – Migration der DMF 2.1.4 nach DMF 2.2.4 bei Einsatz der neuen MSP.* Sitzung des Arbeitskreise UNICOS, EDS Deutschland GmbH, Rüsselsheim

26./27.10.95 *DMF 2.2, STK–Cray–Anbindung über SunOs.* Sitzung des Arbeitskreises UNICOS, RHRK Universität Kaiserslautern

11.11.95 *Nearline mit Cray.* Jahrestagung STK–Benutzerkonferenz

J. Gottschewski

21.09.95 *Museen im Internet*. EDV-Tage in Theuern

24.10.95 *Museen im Internet — Perspektiven*. Workshop Museumsdokumentation, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin

M. Grammel

30.03.95 *Entwicklung eines parallelen objektorientierten Branch&Cut-Frameworks zur Lösung großer kombinatorischer Optimierungsprobleme*. Forschungskolloquium Software-Technik II, FB Informatik, TU Berlin

M. Grötschel

09.03.95 “*Das Konzept des Verteilten Informationssystems der Mathematik*”, Gemeinsamer Workshop der DMV, der DPG, der GDCh und der GI “*Neue Wege der Wissenschaftlichen Information und Kommunikation*”, Technische Universität Berlin, 08.–10.03.95 Berlin

15.03.95 “*Mathematische Methoden bei der Fertigungssteuerung*”, Berliner Arbeitsgemeinschaft für Vereinfachung und Gruppenarbeit, Falkensee

19.03.95 “*Alcuin’s River Crossing Problems, Integer Programming, and Modern Routing Problems*”, Colloquium Carolus Magnus, RWTH Aachen, 19.–24.03.95 Aachen

23.03.95 “*Echtzeitoptimierung komplexer Transportsysteme*”, Antragskolloquium für das DFG-Schwerpunktprogramm “*Echtzeitoptimierung großer Systeme*”, 23.–24.03.95 Bonn

08.05.95 “*In 294.358 km um die Welt: Routenplanung mit Mathematik*”, Vortragsreihe “*Mathematik für alle*”, ETH Zürich, Zürich, Schweiz

09.05.95 “*Combinatorial Optimization in Manufacturing*”, Operations Research-Colloquium der ETH Zürich, Zürich, Schweiz

10.05.95 “*Stabile Mengen in Graphen und ihre Anwendungen*”, 6. Schweizer Tag über Mathematik und Unterricht der SMG, Luzern, Schweiz

13.05.95 “*In 294.358 km um die Welt: Reiserouten für Rastlose*”, Tag der Mathematik, Fachbereich Mathematik der Freien Universität Berlin, Berlin

- 17.05.95** *“Behinderten-Transport in Berlin: Ein Fall für die Kombinatorische Optimierung”*,
Studientag der Technischen Universität Berlin, Berlin
- 27.05.95** *“Zukunft der wissenschaftlichen Information und Kommunikation”*,
Plenarversammlung der Konferenz der Mathematischen Fachbereiche in
Deutschland, Berlin
- 02.06.95** *“Stabile Mengen und Computational Convexity”*,
Festveranstaltung zur Eröffnung des Graduiertenkollegs “Mathematische
Optimierung”, Universität Trier
- 19.06.95** *“Zu den Perspektiven für elektronische Information und Kommunika-
tion in den Fachbereichen und Forschungsinstituten”*,
Abschluß-Workshop des DMV-Projektes Fachinformation, Universität Os-
nabrück, Osnabrück
- 27.06.95** *“Vehicle Routing in Public Transportation Systems”*,
Kolloquium “Trends in Computer Science 1995”, Max-Planck-Institut für
Informatik, Saarbrücken
- 21.09.95** *“In 294.358 km um die Welt: Reiserouten für Rastlose”*,
Kepler-Gymnasium, Ulm
- 26.09.95** *“Aufbau elektronischer Informations- und Kommunikationsstrukturen”*,
Deutscher Dokumentartag, 24.–26.09.95 Potsdam
- 11.10.95** *“Zum Aufbau moderner Informations- und Kommunikationsstruktu-
ren”*,
Workshop “Bibliothek der Zukunft”, Humboldt-Universität zu Berlin, Ber-
lin
- 24.10.95** *“Den Kohl heile rüberbringen . . . Mathematische Methoden der Trans-
portoptimierung”*,
Universität Duisburg, Duisburg
- 25.10.1995** *“Busumlaufplanung im öffentlichen Nahverkehr”*,
Statusseminar des BMBF-Verbundprogramms “Anwendungsorientierte Ver-
bundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik”, 25.–27.10.95 München
- 16.11.1995** *“Neue Produkte für die digitale Bibliothek: die Rolle der Wissen-
schaften”*,
Symposium “Die unendliche Bibliothek – Digitale Information in Wissen-
schaft, Verlag und Bibliothek”, ausgerichtet von: Die Deutsche Bibliothek,
Bundesvereinigung Deutscher Bibliotheksverbände, Verleger-Ausschuß des
Börsenvereins des Deutschen Buchhandels, 16.–17.11.95 Bonn

- 20.11.1995** “*Optimierungsprobleme in der Telekommunikation*”,
Graduiertenkolleg “Algorithmische Diskrete Mathematik”, Konrad-Zuse-
Zentrum, Berlin
- 21.11.1995** “*Hilfe für Odysseus: Optimierung von Reiserouten*”,
Universität Bielefeld, Bielefeld
- 27.11.1995** “*Ausfallsichere und kostengünstige Festnetze für den Mobilfunk*”,
E-Plus, Düsseldorf

N. Gröwe

- 08.06.95** *A Functional CLT for Estimated Simple Recourse Programs*. IVth
International Conference on Parametric Optimization and Related Topics,
Enschede, Niederlande
- 29.06.95** *A Functional CLT for Estimated Simple Recourse Programs*. VIIth
International Conference on Stochastic Programming, Naharya, Israel

H.C. Hege

- 21.03.95** Vorstellung des Projektes: *Netzverteilte, wissenschaftliche Visualisierung* im Berliner RTB, RTB-Arbeitskreis “Visualisierung und Simulation”, DFN-Berlin
- 23.03.95** *Simulation und Visualisierung in der Hyperthermieplanung*. Kolloquium “Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen”, WIAS, Berlin
- 31.03.95** *Visualisierung und 3D-Interaktion in der Hyperthermieplanung*. Kolloquium des Sfb 273 “Hyperthermie: Methodik und Klinik”, Universitätsklinikum Rudolf Virchow, Berlin
- 02.06.95** *Resolution Independent Vector Field Visualization*. Int. Workshop on Visualization and Mathematics, May/June, Harnack-Haus, Berlin
- 27.06.95** *HyperPlan: Support of Medical Treatment Planning*. ZIB-Tour for participants of the 5th Int. IMACS-Symposium on System Analysis and Simulation (IMACS-SAS’95)
- 28.06.95** *Wissenschaftliche Visualisierung*. Feier anlässlich der Inbetriebnahme der ersten Stufe des Berliner Breitbandnetzes für die Wissenschaft, Humboldt-Universität zu Berlin
- 05.10.95** *Computergrafik und Visualisierung am ZIB*. Workshop Visualisierung – im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms “Dynamische Systeme”, Emmendinger Hütte, Feldberg, Schwarzwald

- 07.11.95** *Using CRAY T3D in Distributed Visualization.* Workshop “Scalable Parallel Computing on CRAY Systems”, Berlin
- 21.11.95** *Rechnerunterstützte Therapieplanung in der Hyperthermie.* Kolloquium Medizinische Information, Klinikum Benjamin Franklin der Freien Universität Berlin
- 05.12.95** Vorstellung des DFN–Arbeitskreises: *Visualisierung und Simulation.* DFN–HDN Symposium, Johannesstift Berlin
- 14.12.95** *Wissenschaftliche Visualisierung.* Wissenschaftliches Kolloquium, Fachbereich Informatik, Universität Rostock

C. Helmberg

- 13.09.95** *A Cutting Stock Problem with Positioning Constraints in Steel Industry.* SOR’95, Passau

G. Heyer

- 20.06.95** *Der IMU–Server am ZIB.* Abschließender Workshop des DMV–Projektes “Fachinformation”, Universität Osnabrück
- 21.06.95** *Distributes Information System for Mathematics.* DLR Kolloquium “Wege zur Elektronischen Bibliothek”, Köln–Porz
- 27.06.95** *Strukturüberlegungen für das verteilte Informationssystem der Mathematik.* Workshop “Informationsstrukturen für Lehre und Forschung” des ZKI–Vereins, Witten
- 19.10.95** *Hyper–G: An Internet Information System of the 2nd Generation.* Member’s Forum of the European Software Initiative, Bilbao, Spanien

A. Hohmann

- 23.02.95** *Code++ — a Class Library for Ordinary Differential Equations.* Dupont, Experimental Station, Delaware, USA
- 03.03.95** *Spirals in Scalar Reaction–Diffusion Equations.* Scientific Computing Seminar, University of Houston, Texas, USA
- 28.03.95** *An Object Oriented Approach to ODE Codes.* SciCADE Conference, Stanford University, USA
- 06.04.95** *A Subdivision Algorithm for the Computation of Unstable Manifolds and Global Attractors.* Nonlinear Dynamics Seminar, University of Houston, Texas, USA

13.07.95 *Ein Unterteilungsalgorithmus zur Langzeitanalyse dynamischer Systeme.* DFG Schwerpunkt-Tagung "Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme", Parkhotel Bad Windsheim

24.11.95 *Vector Factories — a Concept for Generic Numerical Algorithms.* Mathematisches Institut der Universität Bayreuth

05.12.95 *Vector Factories — a Concept for Generic Numerical Algorithms.* Mathematisches Institut der Universität Dresden

T. Höllerer

02.06.95 *Volume Rendering on Irregular Grids.* International Workshop on Visualization and Mathematics, Mai/Juni, Harnack-Haus Berlin

W. Koepf

26.01.95 *Wie identifiziert man transzendente Funktionen?* Freie Universität Berlin

20.02.95 *Das Identifikationsproblem für transzendente Funktionen.* Universität Erlangen

01.03.95 *Summation.* ETH Zürich, Schweiz

19.04.95 *DERIVE für Fortgeschrittene.* Workshop, DERIVE Days Düsseldorf

13.05.95 *Beherrschen Computer Mathematik?* Präsentation, Tag der Mathematik, Freie Universität Berlin

21.09.95 *Algorithmische Summation in Maple.* DMV-Tagung 1995, Ulm

22.09.95 *DERIVE im Mathematikunterricht.* DMV-Tagung 1995, Ulm

J. Lang

02.03.95 *Numerische Lösung von Reaktions-Diffusions-Gleichungen.* Workshop Scientific Computing in der Chemischen Verfahrenstechnik, Hamburg

07.06.95 *Numerische Lösung von Reaktions-Diffusions-Gleichungen.* Institut für Chemische Verfahrenstechnik, Stuttgart

17.07.95 *Selfadaptive Finite Element Computation of Combustion Problems.* 9th International Conference on Numerical Methods in Thermal Problems, Atlanta/Georgia, USA

A. Loebel

- 21.01.95** *Fahrzeugumlaufplanung im ÖPNV*. Seminar der Forschungsgruppe “Numerik der Optimierung”, TU Dresden
- 13.09.95** *New Advances in Optimizing Real World Multiple Depot Vehicle Scheduling Problems in Public Mass Transit*. Operations Research '95, Passau
- 21.11.95** *Große Multicommodity Flow Probleme in der Fahrzeugumlaufplanung im ÖPNV*. Siemens Workshop “Angewandte Diskrete Optimierung”, Pommersfelden

J. Lügger

- 20.01.95** *Anforderungen an das Verteilte Informationssystem aus Sicht der Mathematik und Strukturüberlegungen für das Verteilte Informationssystem der Mathematik*. Hyper-G Tutorial, Universität Karlsruhe
- 02.03.95** *Neue Konzepte der Informationsversorgung mathematischer Arbeitsgruppen im Rahmen eines verteilten Informationssystems für die Mathematik*. Workshop “Scientific Computing in der Chemischen Verfahrenstechnik”, TU Hamburg-Harburg, 1.–3.3.1995
- 08.03.95** *Anforderungen an das Verteilte Informationssystem aus Sicht der Mathematik*. Gemeinsamer Workshop “Neue Wege der wissenschaftlichen Information und Kommunikation” der Fachgesellschaften DMV, DPG, GDCh und GI in der TU Berlin
- 01.06.95** *Neue Wege der Informationsversorgung im Rahmen des verteilten Informationssystems für die Mathematik*. Weierstraß-Institut Berlin
- 08.06.95** *Auf dem Wege zu einem verteilten Informationssystem für die Mathematik und erste Schritte mit Hyper-G*. 9. DFN-Fachtagung “Hochgeschwindigkeitsnetze und Internet”, Bad Honnef 7.–8.6.1995
- 06.12.95** *Verteilung und Austausch mathematischer Information in Internet und Konzepte der Distribution mathematischer Software*. Seminar des Instituts für Statistik und Ökonometrie, SFB 373 “Quantifikation und Simulation ökonomischer Prozesse”, Humboldt-Universität zu Berlin

U. Maas

- 20.06.95** *Mathematische Modellierung chemisch reagierender Strömungen*. Fachbereich Chemietechnik, Universität Dortmund
- 06.07.95** *Mathematische Modellierung chemisch reagierender Strömungen*. Gesprächskreis Rhein-Neckar, Physikalisches Institut, Universität Heidelberg

- 10.07.95** *Reduced kinetics*. BRITE–EURAM Workshop on advanced methods for modelling of practical combustion systems including NO_x formation, Rota, Spanien 10.–12.7.95
- 28.07.95** *Simplifying chemical kinetics using intrinsic low-dimensional manifolds*. International symposium on gas phase chemical reaction systems: Experiments and models 100 years after Max Bodenstein, Wissenschaftsforum Heidelberg, 25.–28.7.95
- 30.08.95** *Generation of reduced reaction mechanisms for hydrocarbon combustion using intrinsic low-dimensional manifolds*. EUROMECH–Kolloquium on statistical properties of turbulent gaseous flames, Delft, Niederlande, 30.8.–1.9.95
- 20.09.95** *Mathematische Modellierung laminarer und turbulenter Verbrennungsprozesse*. BMW–Rolls Royce, Dahlewitz
- 12.10.95** *Combustion modelling: Modern developments*. Joint meeting of the French and German sections of the combustion institute, Mulhouse, Frankreich, 11.–13.10.95
- 27.10.95** *Mathematische Modellierung reaktiver Strömungen*. Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen, Universität Heidelberg
- 06.11.95** *Mathematische Modellierung technischer Verbrennungssysteme*. Fakultät für Energietechnik, Universität Stuttgart
- 22.11.95** *Simplifying chemical kinetics Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space*. Workshop on reduction of PDEs: Qualitative analysis and numerical methods, Tübingen, 19.–22.11.95
- 01.12.95** *Mathematische Modellierung technischer Verbrennungssysteme*. Universität Erlangen
- 18.12.95** *Mathematische Modellierung reaktiver Strömungen unter Verwendung detaillierter und vereinfachter Reaktionsmechanismen*. ERCOFTAC–Seminar, Institut für Technische Mechanik, RWTH Aachen

G. Maierhöfer

- 16.02.95** *Einführung in AFS und DCE/DFS*. Workshop AFS und DCE/DFS, ZIB–Berlin
- 08.06.95** *Einsatz des AFS am ZIB: gegenwärtiger Stand und Konzepte*. Deutsche AFS/DCE User Group Tagung, Darmstadt

16.06.95 *Moderne Datenhaltungskonzepte.* Workshop Planung des Serverkonzeptes im Neubau, ZIB–Berlin

28.06.95 *Einheitliche Datenumgebung auf heterogenen Rechnersystemen.* Veranstaltung, Humboldt–Universität zu Berlin

A. Martin

19.01.95 *Packen von Steinerbäumen: Ein Schmittebenenansatz zum Verdrahtungsproblem.* Humboldt–Universität zu Berlin

03.03.95 *A Polyhedral Approach to the Routing Problem in VLSI–Design.* Workshop “Größe Diskrete Systeme”, Oberwolfach

14.09.95 *Routing through Virtual Paths in ATM Networks.* Symposium on Operations Research SOR’95, Passau

18.09.95 *Optimum Path Packing on Wheels: The Noncrossing Case.* DMV–Jahrestagung 1995, Ulm

03.10.95 *Routing through Virtual Paths in ATM Networks.* Universität São Paulo, Brasilien

20.11.95 *Routing in ATM Netzwerken.* Graduiertenkolleg, Berlin

H. Melenk

24.01.95 *Automatische symbolische Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme.* Universität Passau

02.02.95 *Generierung numerischer Programme mit Computeralgebra.* DLR Göttingen

P. Müller

16.02.95 *Definition von Namensräumen.* Workshop AFS und DCE/DFS, ZIB–Berlin

J. Nadobny

28.07.95 *The VSIE method in comparison to the FDTD method for realistic problems in heterogeneous biological bodies.* Progress in Electromagnetics Research Symposium, 24–28 July 1995, Seattle, Washington USA

W. Neun

- 18.05.95** *REDUCE on a massively parallel computer.* IMACS-ACA, UNM, Albuquerque, USA
- 13.07.95** *Vorstellung von Reduce 3.6.* ISSAC 95, Concordia University, Montreal, Canada
- 05.09.95** *REDUCE requirements for OpenMATH.* OpenMATH Workshop Copenhagen, Dänemark
- 13.11.95** *Parallel version of REDUCE on the Convex SPP.* Workshop bei Cyfronet, Krakau, Polen

U. Nowak

- 08.02.95** *Adaptive Linienmethoden für nichtlineare parabolische Systeme in einer Raumdimension.* WIAS-Seminar, Berlin
- 02.03.95** *PDEX1M — ein Programmpaket zur Lösung von parabolischen Systemen in einer Raumdimension.* Workshop “Scientific Computing in der chemischen Verfahrenstechnik”, Hamburg
- 30.03.95** *PDEX1M — A Software Package for the Numerical Simulation of Nonlinear Parabolic Systems in One Space Dimension.* SciCADE95-Conference, Stanford, USA
- 12.05.95** *PDEX1M — ein Programmpaket zur Lösung von parabolischen Systemen in einer Raumdimension.* Seminar des Instituts für Verfahrenstechnik AMVT, Graz, Österreich
- 01.06.95** *A Fully Adaptive MOL-Treatment of Parabolic 1D Problems with Extrapolation Techniques.* Workshop “Method of lines for time-dependent problems”, Lexington, USA
- 07.06.95** *Ein GUI für die numerische Software-Bibliothek CodeLib.* Workshop “Software Engineering im Scientific Computing”, Hamburg

J. Polzehl

- 16.08.95** *Selection of models and confidence intervals in heteroscedastic nonlinear regression.* 1995 Joint Statistical Meetings, American Statistical Association, International Biometric Society, Institute of Mathematical Statistics, Orlando, USA

24.08.95 *Model Selection, Transformations and Variance Estimation in Nonlinear Regression.* University of Minnesota, School of Statistics, St. Paul, USA

11.11.95 *Projection Pursuit basierte Diskriminanzanalyse.* Workshop Statistische Methoden der Klassifikation, Heidelberg

S. Reich

16.03.95 *Symplectic integrators on manifolds: backward error analysis and order conditions.* Universität Genf, Forschungsaufenthalt bei G. Wanner und E. Hairer

30.03.95 *Hamiltonian systems containing a strong potential.* SciCADE'95, Stanford, USA

20.06.95 *Torsion dynamics of macromolecules and enhanced sampling of phase space.* Universität Tübingen

03.07.95 *A free energy approach to the torsion dynamics of macromolecules.* ICIAM'95, Hamburg

14.09.95 *Advanced time-stepping in molecular dynamics.* Status-Seminar des BMBF, HPSC'95, Jülich

27.09.95 *Symplectic integration of constrained Hamiltonian systems with application to molecular dynamics simulations.* UBC, Vancouver, Kanada

11.10.95 *Symplectic Integration of Hamiltonian systems: Constrained and Lie-Poisson systems.* University of Maryland, College Park, USA

12.10.95 *Modified constraints in molecular dynamics.* National Institute of Health, Bethesda, USA

19.10.95 *Time-stepping in molecular dynamics.* Kansas State University, Lawrence, USA

09.11.95 *Enhanced sampling in MD through torsion dynamics and modified potential energy functions.* Joint German-Polish Workshop on Modelling, Visualization and Simulation of Biomolecules, Berlin

23.11.95 *Smoothed molecular dynamics and flexible constraints.* ETH Zürich, Schweiz

R. Roitzsch

07.06.95 *Erstellung einer graphischen Benutzeroberfläche für die numerische Software der CodeLib.* Tagung “Software Engineering im Scientific Computing”, Universität Hamburg

C. Saro

24.10.95 *Was sind Netzwerke und wozu können sie im Museum dienen?* Tagung “Netzwerke — via Datenautobahn in die Museumszukunft”, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin

Ch. Schütte

15.03.95 *Smoothed Molecular Dynamics for Thermally Embedded Systems.* Scientific Computing Seminar, University of Houston, USA

30.03.95 *Nonlinear Smoothing for Highly Oscillatory ODEs.* International Conference on Scientific Computing and Differential Equations, SciCADE 95, Stanford, USA

20.06.95 *Average Dynamics of Highly Oscillatory ODEs.* DFG-Workshop “Dynamics of Microstructures”, Hannover

09.10.95 *Recent Molecular Dynamics Activities at the ZIB.* Joint German-Polish Workshop on Computational Physics, ZIB, Berlin

R. Schultz

23.01.95 *Growth Rates in Stochastic Programming.* International Institute for Applied Systems Analysis (IIASA) Laxenburg, Österreich

04.04.95 *On some Deterministic and Stochastic Programs in Power Industry.* Conference on Applied Mathematical Programming and Modelling 1995 (APMOD95), Brunel University, West London, England

12.04.95 *Preprocessing in Stochastic Programming via Fourier-Motzkin Elimination.* Minisymposium on Stochastic Programming, Universität Groningen, Niederlande

09.05.95 *Solving Integer Linear Programs by Gröbner Bases Methods.* Mathematisches Institut, Universität Kopenhagen, Dänemark

11.05.95 *Some Remarks on Two-Stage Stochastic Programming.* Mathematisches Institut, Universität Kopenhagen, Dänemark

- 31.05.95** *Starke Konvexität in allgemeinen zweistufigen linearen stochastischen Programmen.* Humboldt–Universität zu Berlin, Institut für Mathematik
- 16.06.95** *Discontinuous Optimization Problems in Stochastic Integer Programming.* Workshop "Nonsmooth and Discontinuous Optimization and Applications", International Institute for Applied Systems Analysis (IIASA) Laxenburg, Österreich
- 27.06.95** *Strong Convexity in Two-Stage Linear Stochastic Programs with Partially Random Right-Hand Side.* 7th International Conference on Stochastic Programming, Nahariya, Israel
- 03.07.95** *An Algorithm for Linear Stochastic Programs with Integer Recourse.* International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 95), Hamburg
- 26.10.95** *Optimale Blockauswahl bei der Kraftwerkseinsatzplanung.* Statusseminar der anwendungsorientierten Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik des BMBF, München, Posterbeitrag, Koautoren: D. Dentcheva, A. Möller, W. Römisch (alle Humboldt–Universität zu Berlin), P. Reeh, G. Schwarzbach, J. Thomas (alle Vereinigte Energiewerke AG Berlin)
- 27.11.95** *Unit Commitment Involving Pumped Storage Plants.* International Institute for Applied Systems Analysis (IIASA) Laxenburg, Österreich
- 12.12.95** *Preprocessing in Two-Stage Stochastic Programs via Fourier - Motzkin Elimination.* Norwegian Institute of Technology Trondheim, Department of Managerial Economics and Operations Research, Norwegen
- 14.12.95** *Computational Approaches to Stochastic Programming.* Royal Institute of Technology Stockholm, Department of Mathematics, Schweden
- 15.12.95** *On Optimal Dispatch of Electric Power.* Royal Institute of Technology Stockholm, Department of Mathematics, Schweden
- 20.12.95** *Mixed-Integer Linear Programs for Unit Commitment in Electricity Production.* Graduiertenkolleg "Wissenschaftliches Rechnen", Zentrum für Paralleles Rechnen, Institut für Informatik, Universität zu Köln

M. Seebass

- 08.09.95** *Algorithmen zur Hyperthermieplanung.* Kolloquium zum Sfb 273 "Hyperthermie: Methodik und Klinik", Virchow–Klinikum der HUB, Berlin

W. Sperber

- 08.03.95** *Zum Stand des DMV-Projekts "Fachinformation" und Ergebnisse der Umfrage zur elektronischen Information und Kommunikation in der Mathematik.* Gemeinsamer Workshop "Neue Wege der wissenschaftlichen Information und Kommunikation" der Fachgesellschaften DMV, DPG, GDCh und GI in der TU Berlin
- 19.06.95** *Die Konzeption für den Abschlußbericht.* Abschließender Workshop des DMV-Projekts "Fachinformation", Universität Osnabrück
- 07.11.95** *On Changing Patterns of Mathematical Communication — Break-downs in Traditional Publication.* EUNIS'95 Congress "Trends in Academic Information Systems in Europe", Universität Düsseldorf

D. Stalling

- 10.03.95** *Design and Implementation of a Hyperthermia Planning System.* Workshop "Digitale Bilderverarbeitung in der Medizin", Freiburg, Breisgau, 9./10. März 1995
- 01.06.95** *Supporting Numerical Simulations in Medical Treatment Planning.* Int. Workshop "Visualization and Mathematics", Harnack-Haus, Berlin, Mai/Juni 1995
- 24.06.95** *Visualization and 3D-Interaction for Hyperthermia Treatment Planning.* CAR'95 Computer Assisted Radiology, Berlin
- 10.08.95** *Fast and Resolution Independent Line Integral Convolution.* SIGGRAPH'95, Los Angeles, CA, USA
- 10.11.95** *Visualization of Vector Fields in Computational Chemistry.* Joint German-Polish Workshop on Modelling, Visualization and Simulation of Biomolecules, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, 9./10. November 1995

Th. Steinke

- 17.01.95** *Interaktive Simulationen in der Chemie (UniChem).* Schülerinnen und Schüler des Konrad-Zuse-Gymnasiums, Hoyerswerder zu Gast im ZIB
- 14.02.95** *Interaktive Simulationen in der Chemie (UniChem).* Fach- und Führungskräfte aus Entwicklungsländern der Carl Duisberg-Gesellschaft e.V. Köln, im ZIB
- 07.05.95** *UniChem-Applications at ZIB: Possibilities and Limitations.* UniChem Advisory Board Meeting, Grenoble, Frankreich

03.11.95 *UniChem 3.0: Status Report*. UniChem Advisory Board Meeting, Eagan, USA

H. Stüben

04.05.95 *The Cray T3D as a Production Machine at Konrad-Zuse-Zentrum Berlin*. The International Conference and Exhibition on High Performance Computing and Networking, HPCN Europe 1995, Milan, Italy, 3–5 May, 1995

08.11.95 *QED on the CRAY T3D*. Skalierbare Parallelverarbeitung auf Cray Systemen, Workshop, ESTREL Residence & Congress Hotel, Berlin, 6.–8. November 1995

R. Urbaniak

14.09.95 *A Variant of the Buchberger Algorithm for Integer Programming*. Symposium über Operations Research, Passau

R. Weismantel

09.01.95 *Ein neuer Buchberger-Algorithmus zur ganzzahligen Optimierung*. Vorlesung im Graduiertenkolleg “Algorithmische Diskrete Mathematik”, ZIB–Berlin

10.01.95 *Eine Variante des Buchberger-Algorithmus für Rucksackprobleme*. Kolloquium, Universität Passau

08.02.95 *Optimization and augmentation are equivalent*. Oberwolfach–Tagung “Algebraic and Geometric Combinatorics”, Oberwolfach

03.03.95 *Primal methods for integer programming*. Oberwolfach–Tagung “Large Discrete Systems”, Oberwolfach

14.09.95 *Test sets in integer programming*. Symposium on Operations Research, Passau

18.09.95 *Primal methods for integer programs*. Jahrestagung der DMV, Ulm

22.11.95 *Testmengen in der ganzzahligen Optimierung*. Technische Universität Berlin

11.12.95 *Test sets in combinatorial optimization*. Kolloquium, Grenoble, Frankreich

R. Wessály

17.03.95 *Capacity Expansion of Survivable Telecommunication Networks for Cellular Phones.* 3rd International Conference on Telecommunication Systems 1995, Nashville, USA

20.06.95 *DISCNET.* E-plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf

13.11.95 *Dimensionierung von Mobilfunknetzen.* Graduiertenkollegvorlesung, Berlin

21.11.95 *Dimensionierung von Mobilfunknetzen.* Siemens Workshop: Angewandte Diskrete Optimierung, Pommersfelden

14.12.95 *Modelle zur Dimensionierung und zum Routen in Mobilfunknetzen.* E-plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf

R. Wunderling

19.12.95 *Parallelizing the Simplex Algorithm.* ZIB-Berlin

G. Zumbusch

19.09.95 *Adaptive h-p Finite Elements for Linear Elasticity.* ENUMATH-Tagung, Paris, 18.-22.09.95

7.2 Vorlesungen und Seminare

P. Deuffhard, Ch. Schütte: FU Berlin

SS 95 Numerische Mathematik und Molekülphysik I (Integrierte Veranstaltung)

P. Deuffhard, B. Fiedler, S. Reich: FU Berlin

SS 95 Analysis und Numerik dynamischer Systeme (Seminar)

B. Fiedler (FU Berlin), K. Schneider (WIAS), K. Gatermann (ZIB/FU Berlin): ZIB

WS 95/96 Nichtlineare Dynamik (gemeinsames Oberseminar der FU, des WIAS und des ZIB)

K. Gatermann: FU Berlin

SS 95 Einführung in Computeralgebra Systeme (2-wöchiger Blockkurs)

WS 95/96 Algorithmen der Computeralgebra (Vorlesung mit Übung)

M. Grötschel: TU Berlin

SS 95 Schnitte und Metriken (Vorlesung)

SS 95 Approximative Algorithmen in der kombinatorischen Optimierung (Seminar)

WS 95/96 Kombinatorische Optimierung (Vorlesung)

WS 95/96 Routen- und Fahrzeugeinsatzprobleme (Seminar)

W. Koepf: FU Berlin

SS 95 Algorithmische Summation (Vorlesung)

U. Maas: Universität Stuttgart

WS 95/96 Numerische Behandlung von Verbrennungsprozessen (Vorlesung)

A. Martin: TU Berlin

WS 95/96 Mehrgüter-Fluß-Probleme (Vorlesung)

Ch. Schütte, S. Reich: FU Berlin

WS 95/96 Numerische Mathematik und Molekülphysik II (Seminar)

R. Schultz: HU Berlin

WS 95/96 Innere-Punkt-Methoden in der konvexen Optimierung (Vorlesung)

R. Weismantel: TU Berlin

SS 95 Rucksackprobleme (Vorlesung)

WS 95/96 Computerorientierte Mathematik (Vorlesung)

7.3 Mitveranstalter von auswärtigen Tagungen

Dalitz, Heyer, Sperber

19.–20.01.95 Hyper-G Tutorial, FB Informatik, Universität Karlsruhe

07.–08.03.95 Hyper-G Tutorial, FB Mathematik und Informatik, FU Berlin

Wegen der großen Nachfrage nach dem ersten Hyper-G Tutorial der FU Berlin im Dezember 1994, entschloß sich die Abteilung Software-Information, zwei weitere Tutorials für die Fachinformationsbeauftragten der Mathematik und andere Interessenten durchzuführen. Diese Tutorials umfaßten den Aufbau von Informationsangeboten mit dem Hypertextsystem Hyper-G und Konzepte zur Strukturierung und Verteilung von Informationen. Das ZIB organisierte die Tutorials in Zusammenarbeit mit dem FB Informatik der Universität Karlsruhe beziehungsweise mit dem FB Mathematik und Informatik der FU Berlin. Das zweite Tutorial fand zusammen mit dem gemeinsamen Workshop “Neue Wege der wissenschaftlichen Information und Kommunikation” der Fachgesellschaften DMV, DPG, GDCh und GI am FB Mathematik der TU Berlin statt. Wie bei dem ersten Workshop begrüßten die jeweils ca. 25 Teilnehmer die konzeptuellen Vorteile von Hyper-G, wie die integrierte Suchfunktionalität, die Orientierungshilfen und die konsistente Verwaltung der Dokumente und Hyperlinks in einer Datenbank. Leider war Hyper-G, trotz einiger Verbesserungen seit dem ersten Tutorial, technisch noch nicht ausgereift. Einige wünschenswerte Funktionen waren noch nicht realisiert oder arbeiteten nicht richtig, so daß die Bedienung teilweise noch umständlich war.

P. Deuffhard

16.–20.05.95 “8th International Conference on Domain Decomposition Methods”, Beijing, China.

Member of the Scientific Committee

19.–21.06.95 DFG-Workshop “Dynamics of Microstructures: Analysis and Efficient Simulation”, Hannover.

Veranstalter: Gemeinsam mit Gero Friesecke und Stefan Müller (Universität Freiburg)

26.–30.06.95 5th International IMACS-Symposium on Systems Analysis and Simulation, IMACS-SAS '95, Berlin.

Member of the International Program Committee

M. Grötschel

26.02.–04.03.95 Oberwolfach-Tagung “Große diskrete Systeme”, Mathematisches Forschungszentrum Oberwolfach, Oberwolfach

08.–10.03.95 Gemeinsamer Workshop der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV), der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG), der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) und der Gesellschaft für Informatik (GI) “Neue Wege der Wissenschaftlichen Information und Kommunikation”, Technische Universität Berlin

Zu Beginn des Jahres 1995 vereinbarten die vier wissenschaftlichen Fachgesellschaften Deutsche Physikalische Gesellschaft (DPG), Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh), Gesellschaft für Informatik (GI) und DMV eine Zusammenarbeit auf dem Gebiet der elektronischen Information und Kommunikation. Zu den konkret vereinbarten Maßnahmen zählte u.a. die Durchführung von jährlichen gemeinsamen Workshops. Das ZIB organisierte den ersten Workshop dieser Art, der vom 8.–10.3.95 mit über 200 Teilnehmern am FB Mathematik der TU Berlin stattfand. Repräsentanten der Fachgesellschaften stellten zunächst ihre Konzepte und Ansätze für die Informationssysteme der Zukunft vor. Sie definierten aus ihrer spezifischen Sicht Anforderungsprofile an die Informationssysteme und entwickelten Vorschläge für den Aufbau der neuen Informationsstrukturen. Die Fachgesellschaften stimmten darin überein, daß sich die Informationssysteme stärker als bisher an den Interessen der Nutzer, also der Wissenschaftler, orientieren müssen und daß das Medium elektronische Information alle Möglichkeiten für eine effiziente und umfassende Informationsversorgung bietet. Der Zugang zu den Informationen soll frei zugänglich sein.

Neben den Repräsentanten der vier Fachgesellschaften kamen namhafte Vertreter elektronischer Information aus den Wissenschaften zu Wort, u.a. N. Calkin, der Mitherausgeber der im Internet frei zugänglichen Zeitschrift “The Electronic Journal of Combinatorics” ist, oder H. Maurer (TU Graz), der federführend an der Entwicklung des Internet-Informationssystems Hyper-G arbeitet. Repräsentanten der Bibliotheken wie A. Okerson (Association of Research Libraries in den USA) und K.W. Neubauer (Universität Bielefeld) berichteten über die Überlegungen der Bibliotheken zu ihrer Rolle und ihrem Beitrag in der künftigen elektronischen Informationsversorgung in den Wissenschaften. Der Leiter des Referats “Fachinformation” des BMBF, J.M. Czermak, stellte die Pläne der Bundesregierung vor. Mit A. de Kemp (Springer-Verlag) und H. Roosendaal (Elsevier Science) sowie G.F. Schultheiss (FIZ Karlsruhe) hatten auch die “traditionellen” Informationsanbieter Gelegenheit, ihre Konzepte vorzustellen.

Der erste gemeinsame Workshop hat dazu beigetragen, die Diskussion in den Wissenschaften über die zukünftige elektronische Informationsbereit-

stellung zu intensivieren und die Notwendigkeit einer fächerübergreifenden Kooperation zu verdeutlichen.

Die Vorträge des Workshops stehen unter der URL

<http://elib.zib-berlin.de/math.events.work.iuk>

zur Verfügung.

19.–20.06.95 Abschluß-Workshop des DMV-Projektes Fachinformation, Universität Osnabrück, Osnabrück.

Der Workshop bildete den Abschluß des DMV-Projektes “Fachinformation”. Schwerpunkt war die kritische Auswertung des Projektes:

- Was hat das Projekt in den Fachbereichen bewegt?
- Wie ist der Stand der Integration elektronischer Information und Kommunikation in den Fachbereichen?
- Wie sind die Perspektiven für die elektronische Information und Kommunikation in der Mathematik?

Sechs Fachinformationsbeauftragte stellten in ausführlichen Beiträgen den erreichten Stand, die Ergebnisse sowie Ansätze für die Weiterführung der Arbeiten auf dem Gebiet der elektronischen Information und Kommunikation in ihren Fachbereichen vor. Der Projektträger Fachinformation (PTF) und die DMV-Projektleitung nahmen eine generelle Aus- und Bewertung des Projektverlaufes vor. Die Fachbereiche, der PTF und die Projektleitung werteten das Projekt und den Projektverlauf einheitlich als großen Erfolg und wichtigen Meilenstein auf dem Weg zu einem tragfähigen elektronischen Informationssystem in der Mathematik.

Die Vorträge verschiedener Fachgruppen der DMV über den Einsatz elektronischer Tools zur Kommunikation und Information sowie die Beiträge über den Aufbau der Server der *International Mathematical Union* am ZIB und der *European Mathematical Society* am FIZ Karlsruhe zeigten, daß das Medium elektronische Information inzwischen in wachsendem Maße und zu vielfältigen Zwecken in der Mathematik verwendet wird.

Die abschließende Diskussion über den Antrag der DMV zur Förderung des Aufbaus eines verteilten Informationssystems für die Mathematik zeigte die Bereitschaft aller Fachbereiche, sich hieran aktiv und engagiert zu beteiligen.

Die Vorträge des Workshops stehen unter der URL

<http://www.mathematik.uni-osnabrueck.de/workshop/workshop.html>

zur Verfügung.

Busch, Ullmann (DFN)

28.06.95 BRTB–Veranstaltung HU Berlin, Schwerpunkte: Inbetriebnahme der ersten Stufe des Berliner Breitbandnetzes für die Wissenschaft (Berlin Regional Testbed – BRTB), Entwicklung von Datenautobahnen für die deutsche Wissenschaft, wissenschaftliche Visualisierung, vom BRTB zum BRAIN (Berlin Research Area Information Network)

Frese, Kehl, Stolle, Stüben

06.–09.03.95 Einführungskursus Cray T3D, TU Berlin

Frese, Stolle, Stüben

27.–30.03.95 Einführungskursus Cray T3D, Rechenzentrum der Universität Kiel

19.–21.06.95 Einführungskursus Cray T3D, Rechenzentrum der Universität Hannover

7.4 Ausstellungen und externe Vorführungen

08.–15.03.95 Ausstellungstand auf dem Forschungsmarkt

Berlin '95 bei der CeBIT 95

Numerische Software–Entwicklung: U. Nowak, R. Roitzsch, B. Erdmann, U. Pöhle

Exponat: CodeLib–Programme mit graphischer Benutzerschnittstelle

Symbolik: H. Melenk, W. Neun

Exponat: REDUCE

Visualisierung und Paralleles Rechnen: Projekt BRTB–Visual (am Stand des DFN)

01.06.95 Kinoveranstaltung “Cyber Math”, Kant–Kino, H.–C. Hege zusammen mit K. Polthier (TU Berlin)

20.06.95 *Wissenschaftliche Visualisierung*. Sendung: Fortschritte in Forschung und Technik, Talk mit P. Deuffhard, H.–C. Hege, R. Thiem und K. Polthier (TU Berlin), Fernsehen aus Berlin (FAB)

28.06.95 *Software–Demonstration* des Projektes BRTB–Visual, anlässlich der Feier der Inbetriebnahme der ersten Stufe des Berliner Breitbandnetzes für die Wissenschaft, Humboldt–Universität zu Berlin

8 Gäste am ZIB

8.1 Gastvorträge

09.01.95 Prof. Dr. Heinrich Müller (Universität Dortmund)

Deformation und Überblendung von Rasterdaten

09.01.95 E. Becker (Universität Dortmund)

Algorithmen in der reell-algebraischen Geometrie

12.01.95 E.K. Lee (Columbia University und ZIB)

Parallelism in Mixed Integer Programming

17.01.95 Dr. Sahari Zlatev (National Environmental Research Institut, Dänemark)

Computer Treatment of Large Air Pollution Models

25.01.95 Dr. Ulrich Detert, Dr. Wolfgang Nagel (Forschungszentrum Jülich)

PARvis: Eine x-basierte Umgebung zur Performance-Visualisierung von parallelen Programmen

TOP2: Ein Software-Tool für die Portierung großer Anwendungen auf Parallelrechnern mit verteiltem Speicher

25.01.95 C. Helmberg (TU Graz, Österreich)

Semidefinite Programme und Ganzzahlige Optimierung

25.01.95 F. Rendl (TU Graz, Österreich)

Ein Algorithmus zur Lösung großer Trust-Region Probleme

26.01.95 Prof. Dr. Bogdan Lesyng (Universität Warschau, Polen)

Molecular Modelling Methods: Basic Approaches and Challenging Problems

26.01.95 Prof. Dr. Marek Niezgodka (Universität Warschau, Polen)

Mathematical Models for the Dynamics of Diffusive Phase Transitions

26.01.95 Dr. Krzysztof Nowinski (Universität Warschau, Polen)

Advanced Visualization Techniques for Chemistry and Molecular Modelling

- 06.02.95** Prof. Dr. Hans-Peter Seidel (Universität Erlangen)
Splines in der Graphischen Datenverarbeitung
- 07.02.95** Prof. Dr. Ludwig Arnold (FB Mathematik und Informatik, Universität Bremen)
Die multiplikativen Ergodensätze für dynamische Systeme
- 14.02.95** Dr. Helmut Grubmüller (Institut für Medizinische Optik, Theoretische Biophysik, Ludwig-Maximilians-Universität München)
Conformational Dynamics of a Simplified Protein Model
- 14.02.95** Prof. Dr. K.W. Morton (Oxford University Computing Laboratory, Great Britain)
Numerical Treatment of Hyperbolic Systems
- 14.02.95** Prof. Dr. Robert D. Skeel (University of Illinois at Urbana-Champaign, USA)
The Real Error of Symplectic Integrators
- 16.02.95** Axel Clauberg (RZ der Universität zu Köln)
MR-AFS auf Workstations und AFS und DCE/DFS an der Universität Köln
- 16.02.95** Dr. Dieter Mack (RZ der Universität Stuttgart)
Konzepte für den Einsatz des AFS und DCE/DFS am RUS
- 16.02.95** Dr. Hartmut Reuter (IPP Garching)
Was ist Multiple Resident AFS? Erfahrungen am IPP Garching
- 20.02.95** Dr. Joseph M. Oberhuber (Deutsches Klimazentrum GmbH, Hamburg)
Parallelisierung eines Ozean-Modells auf dem Parallelrechner CRAY T3D
- 28.02.95** Dr. Jens Gustedt (FB Mathematik, TU Berlin)
Effiziente Methoden der Bildsegmentierung
- 07.03.95** Dr. Sebastian Noelle (Institut für Angewandte Mathematik, Universität Bonn)

Entropieungleichungen und Fehlerabschätzungen für finite Volumenverfahren auf irregulären Gittern

07.03.95 A. Feldmann (Carnegie Mellon University, Pittsburgh, USA)
On call admission algorithms for high-speed networks

13.03.95 N. Calkin (Georgia Institute of Technology, Atlanta, USA)
Random Birthdays, Random Vectors, and Random Walks

18.04.95 Dr. Tilo Lump (INRIA, Frankreich)
Numerische Simulation von kompressiblen Scherschichten höherer Ordnung vom Typ ENO

08.05.95 Dipl.-Inf. Pavel Mayer (ART + COM, Forschungs- und Entwicklungszentrum für Rechnergestütztes Gestalten und Darstellen e.V., Berlin)
Geschichte und Zukunft interaktiver Illusionen auf dem Computer

23.05.95 Dr. Michael Wulkow (CiT GmbH, Rastede)
Adaptive h-p-Methoden für global-verknüpfte Populationsgleichungen

29.05.95 Prof. Dr. Frits Post (Delft University of Technology, Niederlande)
Visualization of Flow Data: Some Recent Research Results

31.05.95 Dr. Eberhard Bänsch (Institut für Angewandte Mathematik, Universität Freiburg)
Numerische Behandlung von Navier-Stokes Gleichungen

07.06.95 J.-L. Goffin (McGill University, Montreal, Kanada)
Using the Primal Dual Infeasible Newton Method in the Analytic Center Method for Problems Defined by Deep Cutting Planes

14.06.95 Prof. Dr. Peter Rentrop (Fachbereich Mathematik, TH Darmstadt)
Neuronale Netze aus Sicht der Numerischen Mathematik

14.06.95 M.W. Padberg (New York University, USA)
Facets and rank of integer polyhedra

- 15.06.95** Tamara Munzner (The Geometry Center, University of Minnesota, USA)
Integrating 3D Visualization with the World Wide Web
- 15.06.95** A. Wagler (Leipzig)
Über wing-perfekte Graphen
- 15.06.95** Prof. Dr. Benedict Leimkuhler (Department of Mathematics, The University of Kansas, USA)
Adaptive Verlet Method
- 23.06.95** Prof. Dr.-Ing. Thomas Weiland (Elektrische Nachrichtentechnik, TH Darmstadt)
Die Gitter-Maxwell-Gleichungen
- 13.07.95** Dr. Peter Bastian (Universität Stuttgart)
Parallele adaptive Mehrgitterverfahren
- 20.07.95** C.E. Ferreira (Universidade de São Paulo, Brasilien)
Rearrangement of DNA fragments
- 29.08.95** R. Sarkissian (Université de Genève, Schweiz)
Optimal joint syntheses of base and spare telecommunication networks
- 11.09.95** S.G. Bartels (TU Berlin)
A Second Look at Yamnitsky's and Levin's Simplex Method
- 17.10.95** Prof. Dr. Vadim V. Strygin (Voronezh St. University, Rußland)
Higher order approximations for boundary value problems of singularly perturbed systems
- 17.10.95** Dipl.-Math. Christian Leis (FU Berlin)
Hopf-Verzweigung in Systemen mit sphärischer Symmetrie: Invariante Tori und verbindende Orbits

- 30.10.95** Dr. Martin Rumpf (Institut für Angewandte Mathematik Universität Freiburg)
Konzepte zur graphischen Analyse von Daten aus modernen numerischen Methoden
- 09.11.95** Dr. P. Balá (ICM, Universität Warschau, Polen)
Investigations of the tunnelling phenomena in superlattices and biomolecules using quantum dynamics
- 09.11.95** Prof. Lucjan Pielá (ICM, Universität Warschau, Polen)
Recent developments in the global optimization problem in chemistry
- 09.11.95** Dr. Holger Wallmeier (Hoechst AG, Frankfurt)
MEGADYN, a computer code for molecular dynamics simulation of large molecular systems
- 10.11.95** Dr. Frank Cordes (Institut für Kristallographie, FU Berlin)
Initial state of an enzyme reaction: complex formation and protonation states of RNase T1
- 10.11.95** Prof. Josef St. Kwiatkowski (Physikalisches Institut, Nikolaus–Copernicus Universität, Torun, Polen)
Structure of IR spectra of DNA bases: experiment and theory
- 10.11.95** Dr. Krzysztof Nowinski (ICM, Warsaw University, Polen)
Integrated visual computing
- 10.11.95** Dr. P. Strzelecki (ICM, Universität Warschau, Polen)
Mathematical models of Ginzburg–Landau type and related questions
- 10.11.95** Dipl.–Math. T.D. Suski (ICM, Universität Warschau, Polen)
An insight into diffusive phase separation phenomena using computational techniques
- 14.11.95** M. Skutella (TU Berlin)
Grundlegende Konzepte der Darstellungstheorie endlicher Gruppen vom Lie–Typ

- 21.11.95** Prof. V.V. Shaidurov (Russian Academy of Sciences, Rußland)
Higher-Order Elements in the Cascadic Methods
- 21.11.95** B.M. Winkler (TU Berlin)
Production planning problems in mining
- 24.11.95** G. Woeginger (TU Eindhoven, Niederlande)
Approximability and Nonapproximability Results for Minimizing Total Flow Time on a Single Machine
- 28.11.95** Prof. Dr. Christian Lubich (Universität Tübingen)
Multi-Rate Extrapolation Methods
- 28.11.95** Prof. K. Sakamoto (University of Hiroshima, Japan)
Indefinite dimensional dynamical systems describing an exothermic reaction-diffusion process
- 28.11.95** Dr. Marc Steinbach (IWR, Universität Heidelberg)
Strukturierte Interior Point SQP-Methoden zur Bahnoptimierung
- 30.11.95** C. Berge (Centre National de la Recherche Scientifique Paris, Frankreich)
Perfect graphs and partial colourings
- 04.12.95** Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Straßer (Fakultät für Informatik, Universität Tübingen)
Architekturen für Hochleistungsgraphiksysteme
- 05.12.95** Prof. Dr. K.P. Hadeler (Universität Tübingen)
Reaktionstelegraphensysteme
- 05.12.95** Prof. Patrick Laure (I.N.L.N., Nizza, Frankreich)
Self sustained magnetic flows in spherical symmetry

8.2 Gastaufenthalte

Dr. Dimitris Alevras (Stern School of Business, New York University,
New York, USA)

01.07.94–31.12.95 (Postdoc–Fellowship, Gast des ZIB)

Prof. Dr. Eberhard Becker (Institut für Mathematik, Universität Dortmund)

09.–10.01.95 (Gast des ZIB)

Andreas Bernig (Universität Leipzig)

14.03–31.03.95 (Gast des ZIB)

Dr. Neil J. Calkin (Georgia Institute of Technology, Atlanta, USA)

06.03.95 (Gast des ZIB)

Dr. Anja Feldmann (Carnegie Mellon University, Pittsburgh, USA)

20.–22.02.95 (Gast des ZIB)

Anthony C. Hearn (The RAND Corporation, USA)

24.09.–01.10.95 (Gast des ZIB)

Dr. Christoph Helmberg (Technische Universität Graz, Österreich)

23.–29.01.95 (Gast des ZIB)

Prof. K.–H. Hoffmann (Inst. f. Angewandte Mathematik, TU München)

Dipl.–Inform. Zdzislaw Krol

Dipl.–Math. Ingo Eichenseher

18.10.95 (Gäste des ZIB)

Prof. Dr. Ronald H.W. Hoppe (Universität Augsburg)

22.–24.11.95 (Gast des ZIB)

Dr. Eva Lee (Columbia University, New York, USA)

01.01–07.09.95 (NATO Post–doctoral fellowship)

Prof. Bogdan Lesying (ICM, Warschau)

08.–10.11.95 (Gast des ZIB)

Prof. Dr. Thomas Liebling (Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Schweiz)

29.06.–02.07.95 (Gast des ZIB, Wissenschaftlicher Beirat des ZIB)

Dipl.–Math. L. Marcinkowski (Universität Warschau, Polen)

22.–25.11.95 (Gast des ZIB)

Prof. Dr. A. Meyer (TU Chemnitz–Zwickau)
22.–24.11.95 (Gast des ZIB)

Dr. M. Mróz (Universität Warschau, Polen)
22.–25.11.95 (Gast des ZIB)

Dipl.–Math. N. Neuß (Universität Heidelberg)
22.–24.11.95 (Gast des ZIB)

Prof. Marek Niezgódka (ICM, Warschau, Polen)
08.–10.11.95 (Gast des ZIB)

Dr. Krzysztof S. Nowinski (ICM, Warschau, Polen)
26.–28.01.95 (Gast des ZIB)

Dr. Andreas Oberreuter (Inst. f. Geophysik, Projekt EURAD, Universität zu
Köln)

Volker Winkelmann (Universität zu Köln, Rechenzentrum)

Heiner Geiss (KFA Jülich)

21.03.95 (Gäste des ZIB)

Prof. Dr. Manfred Padberg (New York University, NY, USA)
06.06.–16.06.95 (Gast des ZIB)

Dipl.–Math. M. Pertholdt (Universität Warschau, Polen)
22.–25.11.95 (Gast des ZIB)

Dr. Martin Plewnia (Inst. f. Theoretische Physik, Universität Heidelberg)
12.04.95 (Gast des ZIB)

Dr. Franz Rendl (Technische Universität Graz, Österreich)
23.–29.01.95 (Gast des ZIB)

Prof. Dr. Werner Rheinboldt (University of Pittsburgh, USA)
30.06.–03.07.95 (Gast des ZIB, Wissenschaftlicher Beirat des ZIB)

Dipl.–Ing. Oliver Riedel (Fraunhofer Institut für Arbeitswirtschaft
Dipl.–Ing. Roland Blach und Organisation — IAO)
18.10.95 (Gäste des ZIB)

Dr. Joachim Römelt (Bayer AG, Leverkusen)
30.06.–01.07.95 (Gast des ZIB, Wissenschaftlicher Beirat des ZIB)

Dr. Joachim Römelt (Bayer AG, Leverkusen)
21.–21.12.95 (Gast des ZIB, Wissenschaftlicher Beiratsvorsitzender des ZIB)

Dr. Aravanmuthan Sarangarajan (Cornell University, USA)
15.09.–31.12.95 (Gast des ZIB)

Dr. Robert Sarkassian (Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Schweiz)
01.–30.9.95 (Gast des ZIB)

Dr. S. Sauter (Christian–Albrechts–Universität zu Kiel)
22.–24.11.95 (Gast des ZIB)

Dr. Michel Schaffers (Center for OR and Econometrics,
Université Catholique de Louvain, Louvain–la–Neuve, Belgien)
01.10.94–30.04.95 (Gast des ZIB)

Prof. PhD. Peter Schröder (California Institute of Technology, Pasadena, USA)
06.–07.06.95 (Gast des ZIB)

Prof. Dr. Dieter Schütt (Siemens AG, München)
29.06.–01.07.95 (Gast des ZIB, Wissenschaftlicher Beirat des ZIB)

Prof. Dr. V.V. Shaidurov (Russian Academy of Sciences, Rußland)
30.10.– 25.11.95 (Gast des ZIB)

Dr. Th. Störckuhl (Universität Warschau, Polen)
22.–24.11.95 (Gast des ZIB)

Thomas Sturm (Universität Passau)
06.06.–16.06.95 (Gast des ZIB)

Dr. Dennis Sullivan, (University of Idaho, USA)
03.08–24.08.95 (Gast des Sfb 273 “Hyperthermie: Methodik und Klinik”)

Dr. Rekha Thomas (Cornell University, Ithaca, NY, USA)
01.01.–31.07.95 (Gast des ZIB)

Prof. Dr. G. Wittum (Universität Stuttgart)
22.–23.11.95 (Gast des ZIB)

Thomas Wolf (Queen Mary and Westfield College, London, United Kingdom)
14.08.–25.08.95 (ZIB Fellow)

8.3 Tagungen und Veranstaltungen des ZIB

- 17.01.95** Informationsveranstaltung im ZIB für eine Schülergruppe des Konrad-Zuse-Gymnasiums, Hoyerswerda
- 26.01.95** “Workshop on Molecular Modelling” (gemeinsam mit ICM, Universität Warschau)
Veranstalter: Peter Deuffhard (ZIB), Marek Niezgódka (ICM, Universität Warschau), Christof Schütte (ZIB)
- 16.02.95** Workshop “AFS und DCE/DFS”
Schwerpunkt: Verteilte Datenhaltung auf heterogenen Rechnern
Veranstalter: G. Maierhöfer (ZIB)
- 16.03.95** Informationsveranstaltung im ZIB für eine Schülergruppe der Herder-Oberschule (Gymnasium), Berlin
- 30.05.–03.06.95** “International Workshop on Visualization and Mathematics” (mit Unterstützung der Max-Planck-Gesellschaft und der Deutschen Forschungsgemeinschaft)
Veranstalter: Hans-Christian Hege (ZIB), Konrad Polthier (TU Berlin), Peter Deuffhard (ZIB), Martin Grötschel (ZIB), Ulrich Pinkall (TU Berlin)
- 27.06.95** Informationsveranstaltung im ZIB für eine Teilnehmergruppe des “5th International IMACS-Symposium on System Analysis and Simulation, Berlin
- 28.06.95** Informationsveranstaltung im ZIB für Studierende des Fachbereiches Angewandte Mathematik, Universität Hamburg
- 22.09.95** Tagung des DFN-Arbeitskreises “Visualisierung und Simulation” im Regionalen Rechenzentrum für Niedersachsen, Universität Hannover
Veranstalter: H.C. Hege (ZIB), L. Grüneberg, S. Olbrich (Universität Hannover)
- 23.–25.10.95** Workshop “Museumsdokumentation”
Schwerpunkte: Softwarevergleich, Wann kommt die Datenautobahn, Perspektiven der WWW-Nutzung und Multimediaanwendungen, Informationswirtschaft und Informationsgesellschaft, Planungsverfahren der öffentlichen Hand – Rationalisierung oder Planwirtschaft?
Veranstalter: Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, Bildungsstätte für Museumspersonal Brauweiler

- 06–08.11.95** Workshop “Skalierbare Parallelverarbeitung auf CRAY–Systemen”,
ESTREL Residence & Congress Hotel, Berlin
Veranstalter: Cray Research GmbH, München, Konrad–Zuse–Zentrum Berlin
- 09.–10.11.95** “Joint German–Polish Workshop on Modelling, Visualization and Simulation of Biomolecules”, (gemeinsam mit ICM, Universität Warschau)
Veranstalter: Peter Deuffhard (ZIB), Christian Hege (ZIB), Bogdan Lesyng (ICM, Warschau), Marek Niezgodka (ICM, Universität Warschau), Christof Schütte (ZIB)
- 22.–24.11.95** “German–Polish Workshop: Multilevel Methods in Science and Industry”, (gemeinsam mit ICM, Universität Warschau, WIAS)
Veranstalter: Peter Deuffhard (ZIB), M. Drya (Universität Warschau), Ralf Kornhuber (WIAS)
- monatlich** “Berliner Colloquium für Wissenschaftliche Visualisierung”,
Veranstalter: ZIB in Kooperation mit K. Polthier (Sfb 288, FB Mathematik, TU Berlin)
- WS 95/96** Oberseminar: “Nichtlineare Dynamik”, organisiert von Bernold Fiedler (FU Berlin), Klaus Schneider (WIAS), Karin Gatermann (ZIB/FU Berlin)

9 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.

9.1 Organe

Organe des ZIB sind der Verwaltungsrat und der Präsident.

Der Verwaltungsrat setzte sich im Jahre 1995 ¹ wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Dieter Schumann, TUB, Vorsitzender
- Prof. Dr. Konrad Seppelt, FUB — bis 30.06.95
- Prof. Dr. Günther Kaindl, FUB — ab 12.07.95
- Prof. Dr. Michael Müller-Preußker, HUB — ab 01.02.95
- 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
- Prof. Dr. Jens Reich, Max-Delbrück-Centrum für Molekulare Medizin — ab 01.02.95

Im Jahre 1995 tagte der Verwaltungsrat am 16. Mai 1995.

Präsident des ZIB ist Prof. Dr. Peter Deuffhard.

Als Vizepräsident amtiert Prof. Dr. Martin Grötschel.

¹Durch Gesetzesänderung ist der Verwaltungsrat ab 01. Februar 1995 um Vertreter der Humboldt-Universität zu Berlin und des Max-Delbrück-Centrums für Molekulare Medizin erweitert worden.

9.2 Satzung

Die vom Verwaltungsrat 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.

9.3 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 (verstorben am 18.12.1995)

Der Wissenschaftliche Beirat tagte am 30. Juni/01. Juli 1995.

9.4 Mitgliedschaften

Das ZIB ist Mitglied folgender Organisationen:

1. CRAY User Group
2. DFN
3. DMV
4. ECMI
5. Forum für Zukunftsenergien
6. HGC — Hyper-G-Consortium
7. Konrad-Zuse-Gesellschaft
8. NAG Users Association
9. SIAM

10. VICM 98 e.V.
11. Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung e.V. — ZKI

9.5 ZIB–Fellows

Präsident und Vizepräsident vergeben an wenige ausgewählte Wissenschaftler das Konrad–Zuse–Fellowship, in dessen Rahmen im Jahre 1995 die folgenden Projekte bearbeitet wurden:

- Dr. Michael Dellnitz (Universität Hamburg)
Symbolisch–numerische Methoden für dynamische Systeme
- Prof. Dr. R. Hoppe (TU München)
Numerische Lösung freier Randwertprobleme
Die Mitgliedschaft als ZIB–Fellow endete zum 30.04.1995 aufgrund des Wechsels auf eine C4–Professur am Institut für Mathematik an der Universität Augsburg.
- Dr. Thomas Wolf (University of London)
Symbolische Lösung von Differentialgleichungen und Differentialgleichungssystemen; symbolisches Rechnen in der allgemeinen Relativitätstheorie
- Prof. Dr. Günter Ziegler (TU Berlin)
Algebraische und kombinatorische Aspekte der ganzzahligen Optimierung

9.6 Selbstverwaltung

Der Personalrat setzte sich im Jahre 1995 wie folgt zusammen:

Peter Ertmann – Vorsitzender
 Detlef Bayer
 Klaus–Dietrich Engel – ab 01.04.1995
 Dr. Karin Gatermann – bis 31.03.1995
 Gabriele Kempf
 Dr. Robert Weismantel

Vertrauensmann der Schwerbehinderten ist Wolfgang Maibauer.

9.7 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 1995 auf insgesamt 20.325 TDM; davon entfielen auf den konsumtiven Bereich 12.492 TDM und auf Investitionen 7.833 TDM.

Das Land Berlin leistete einen ausgabewirksamen Zuschuß von 16.919 TDM. Die eigenen Erträge aus Kooperationen und Drittmittelprojekten betrugen im Berichtsjahr 4.183 TDM.

9.8 Personelle Entwicklung

Für die planmäßigen Mitarbeiter (83,5 Stellen, davon 5 Beamten- und 78,5 Angestelltenstellen) waren im Haushaltsplan des Landes Berlin nach Durchschnittssätzen 7.519,1 TDM ausgewiesen.

Unabhängig von ihrer Finanzierung – entwickelte sich die Zahl der Beschäftigten wie folgt:

	31.12.94	31.12.95
Leitung	4	4
Wissenschaftliches Personal	72	72
Datenverarbeitung/Technik	29	28
Verwaltung/Bibliothek	17	15
Studentische Hilfskräfte	32	36
Insgesamt	154	155

10 Ansprechpartner

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

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

Numerik:	Peter J. Deuffhard/ Folkmar A. Bornemann	896 04 – 101 896 04 – 172
Numerische Software- Entwicklung:	Ulrich Nowak	896 04 – 175
Symbolik:	Herbert Melenk	896 04 – 195
Kombinatorische Optimierung:	Martin Grötschel/ Robert Weismantel	896 04 – 210 896 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.