

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin



Jahresbericht 1996

Vorbemerkung

Das vergangene Jahr 1996 brachte für das ZIB endlich den lange ersehnten Umzug aus den alten Mieträumen an der Heilbronner Straße in den Neubau an der Takustraße in Berlin–Dahlem, einem traditionsreichen Wissenschaftsstandort. Unser neues Gebäude liegt inmitten des naturwissenschaftlichen Campus der Freien Universität — zugleich ein Sinnbild für die interdisziplinäre Verflechtung unseres Forschungsgebietes Scientific Computing. Damit sind die Berufungsforderungen des Präsidenten und des Vizepräsidenten, das ZIB auch baulich in die universitäre Landschaft zu integrieren, nunmehr eingelöst.

Schon die ersten Tage am neuen Standort haben die Kontakte zu Kollegen innerhalb der FUB spürbar belebt. Es bleibt zu hoffen, daß auch die anderen uns tragenden Universitäten die verbesserten Chancen in gleicher Weise ergreifen. Sorge bereitet uns naturgemäß in diesem Zusammenhang die derzeitige Krise der Universitäten — ausgelöst nicht nur durch die knappen öffentlichen Kassen, sondern auch durch die mangelnde Einsicht oder Konsequenz breiter Kreise in Politik, Wirtschaft und leider auch Wissenschaft, was die Wichtigkeit von anwendungsorientierter Grundlagenforschung für den Standort Deutschland angeht. In Anbetracht dieser Rahmenbedingungen wissen wir die Fertigstellung unseres Neubaus ganz besonders zu würdigen.

Nicht zuletzt möchten wir an dieser Stelle allen Förderern danken, die sich in schwerer Zeit mit uns gemeinsam für dieses Ziel eingesetzt haben. Wir werden alles daran setzen, weiterhin durch Leistung die Steuergelder zu rechtfertigen, die unsere Arbeit erst ermöglichen.

So übergeben wir also mit einem lachenden und einem weinenden Auge diesen Jahresbericht unseren Freunden, Gönnern und aufmerksamen Beobachtern.

Berlin, im Januar 1997

Prof. Dr. Peter Deuffhard
Präsident

Inhaltsverzeichnis

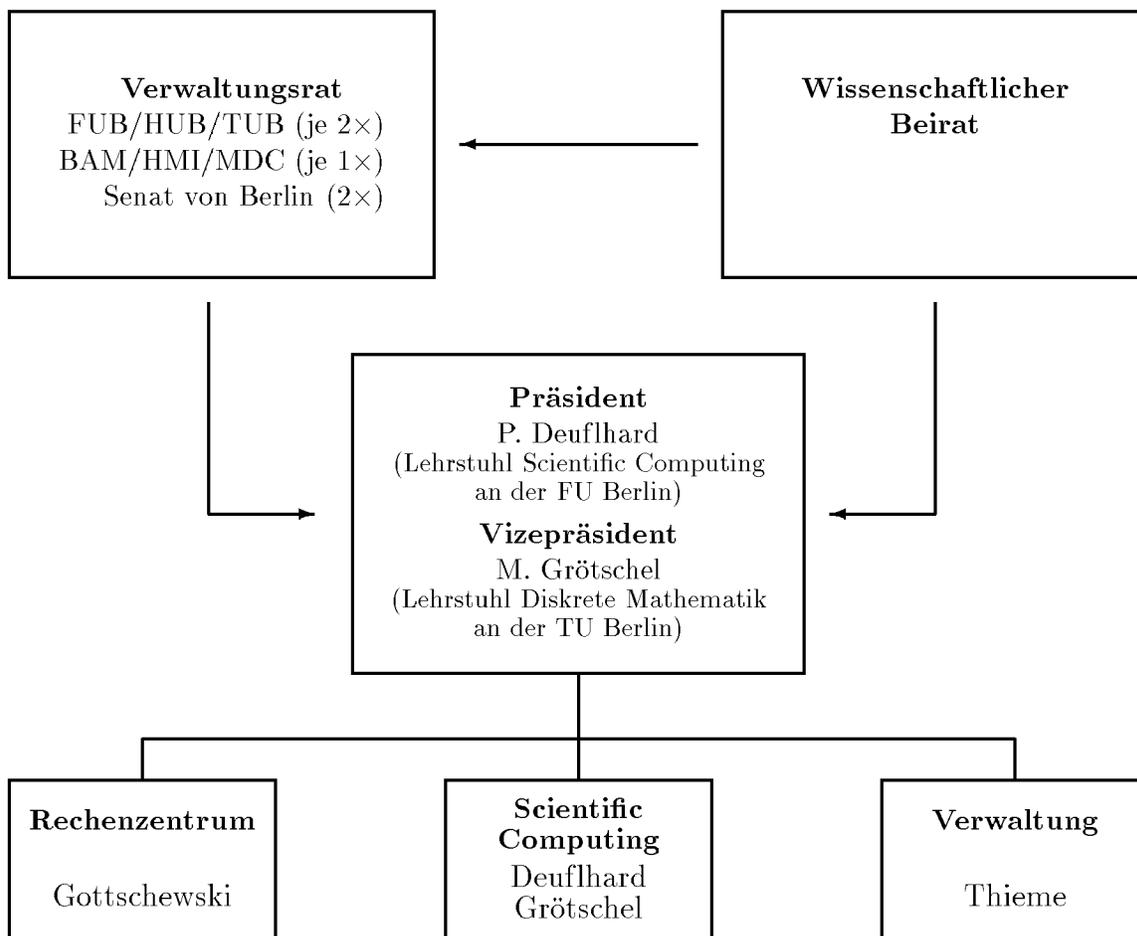
1	Das ZIB – Aufgaben und Ziele	1
2	Forschung und Entwicklung	6
2.1	Überblick	6
2.2	Schwerpunkte	15
2.2.1	Adaptive Multilevel–Methoden	15
2.2.2	Wissenschaftliche Software	20
2.2.3	Chemische Verfahrenstechnik	26
2.2.4	Hochfrequente Elektrotechnik/Integrierte Optik	32
2.2.5	Computergestützte Analyse dynamischer Systeme	36
2.2.6	Moleküldynamik	41
2.2.7	Wissenschaftliche Visualisierung	47
2.2.8	Medizinische Therapieplanung	54
2.2.9	Polyedrische Kombinatorik und Graphentheorie	59
2.2.10	Algorithmen zur Lösung allgemeiner ganzzahliger Programme	64
2.2.11	Zahlentheoretische und geometrische Methoden	71
2.2.12	Transportprobleme mit und ohne Echtzeitanforderungen	77
2.2.13	On- und Off-line Optimierung in Kraftwerkssystemen	82
2.2.14	Telekommunikation	85
2.2.15	Computeralgebra	90
3	Wissenschaftliche Dienstleistungen	93
3.1	Überblick	93
3.2	Schwerpunkte	95
3.2.1	Information und Kommunikation im Wissenschaftsbereich	95
3.2.2	Informationsdienste für die Mathematik im Internet	100
3.2.3	Informationstechnische Werkzeuge für Museen	104
4	Rechenzentrum	105
4.1	Aufgaben und Organisation	105
4.2	Ausbau und Betrieb des Landeshöchstleistungsrechners	105
4.3	Großprojekte und Fachberatung	108
4.4	Software-Ausbau im Berichtszeitraum	115
4.5	Weitere Projekte des Rechenzentrums	119
4.5.1	Berlin Regional Testbed BRTB (Hochgeschwindigkeitsnetz)	119
4.5.2	Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN	122
4.6	Zusammenarbeit mit anderen HPSC-Zentren	126
4.7	Sonstige Dienstleistungen des Rechenzentrums	127
4.7.1	Informationsdienste	127
4.7.2	Planung und Bezug des Neubaus	128

5	Publikationen und Auszeichnungen	130
5.1	Preprints	130
5.2	Technical Reports	148
5.3	Beiträge in Zeitschriften/Tagungsbänden	152
5.4	Monographien	160
5.5	Dissertationen	161
5.6	Diplomarbeiten	162
5.7	Auszeichnungen und Rufe	164
5.8	Herausgabe von Zeitschriften	164
6	Produkte	165
6.1	Symbolische Verfahren (REDUCE, Mathematica, Maple	165
6.2	Code++	167
6.3	CodeLib	167
6.4	GOS — Datenbank für kulturgeschichtliche Daten	169
6.5	SoPlex	169
6.6	HyperPlan	169
6.7	DOC++	170
6.8	Informationsdienste des eLib-Servers	170
7	Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern	171
7.1	Vorträge und Gastaufenthalte	171
7.2	Vorlesungen und Seminare	189
7.3	Mitveranstalter von auswärtigen Tagungen	191
8	Gäste am ZIB	192
8.1	Gastvorträge	192
8.2	Gastaufenthalte	194
8.3	Tagungen und Veranstaltungen des ZIB	196
8.4	Ausstellungen und Softwaredemonstrationen	197
9	Organisatorisches	198
9.1	Organe	198
9.2	Satzung	198
9.3	Wissenschaftlicher Beirat	199
9.4	Mitgliedschaften	199
9.5	ZIB-Fellows	199
9.6	Selbstverwaltung	200
9.7	Wirtschaftliche Situation	200
9.8	Personelle Entwicklung	201
10	Ansprechpartner	202

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 und 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.

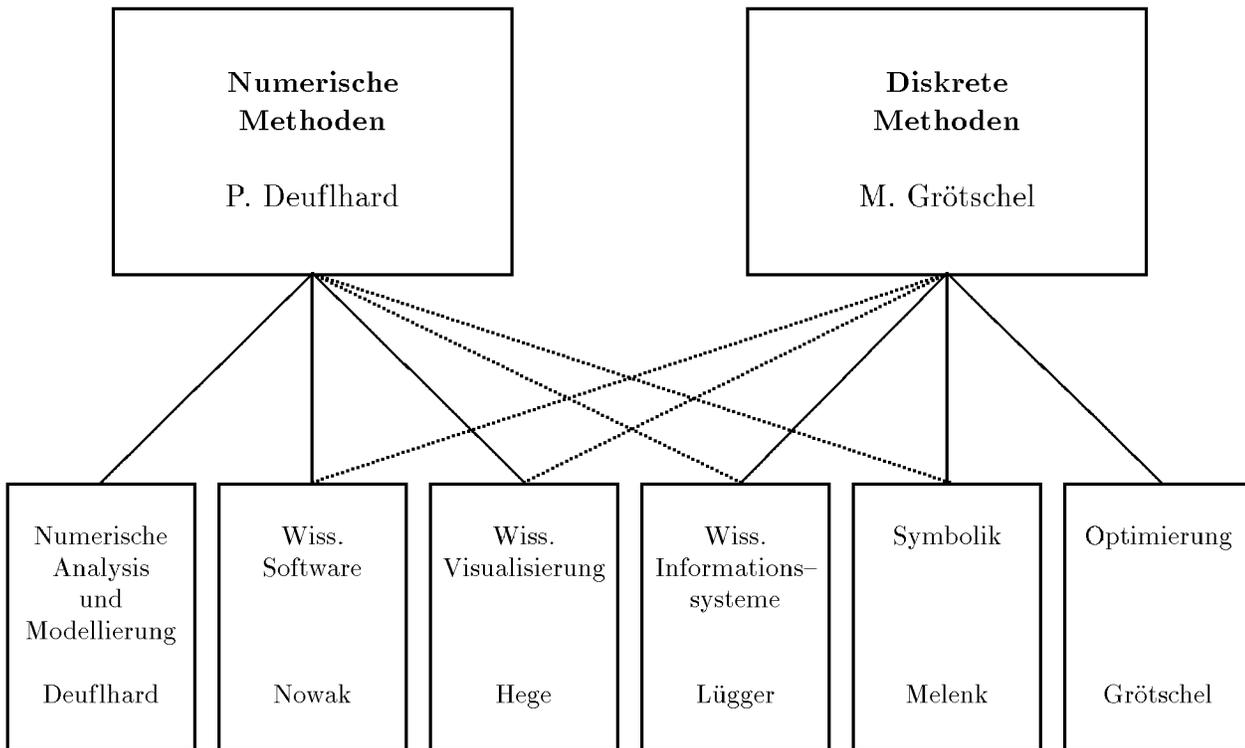
Anwendungsbezogene Forschung, Kooperationen

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, Medizin, öffentlicher Nahverkehr, Chemie-, Elektro- und Computerindustrie, Maschinen- und Fahrzeugbau. Das ZIB ist für die Durchführung weiterer wissenschaftlicher Projekte offen.

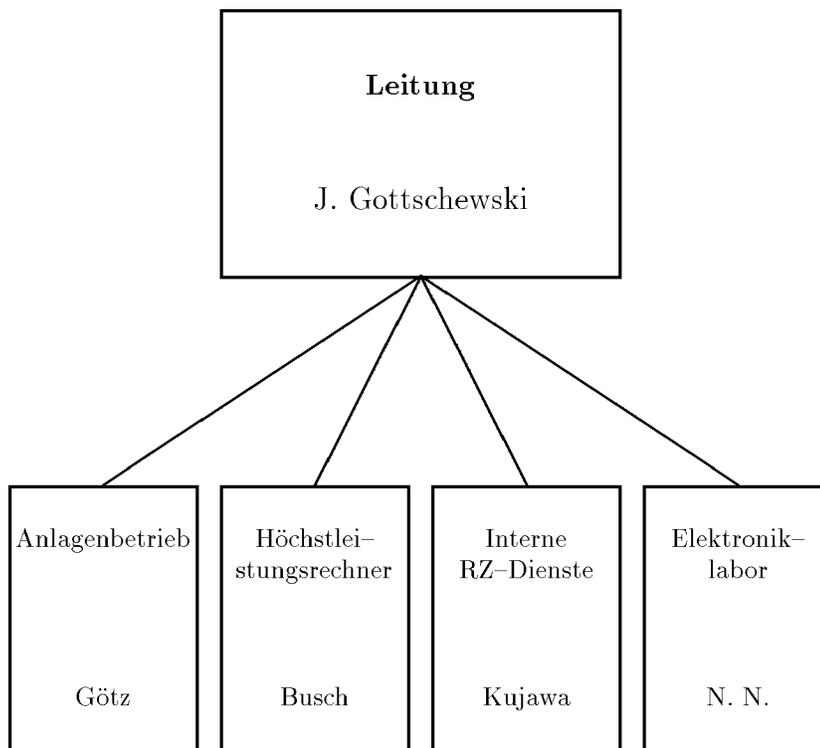
Supercomputing als Dienstleistung

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.

Bereich Scientific Computing



Bereich Rechenzentrum



Bereich Numerische Methoden

Abteilung Numerische Analysis und Modellierung. Aufgabe ist die Forschung im Bereich der algorithmisch orientierten Numerischen Mathematik mit Schwerpunkt nichtlineare Modelle, insbesondere Differentialgleichungsmodelle. Mit Blick auf rechenintensive technologische Fragestellungen ist eine sorgfältige Abstimmung von mathematischem Modell und numerischer Realisierung unumgänglich. Ziel ist die Konstruktion von effizienten und verlässlichen Algorithmen zur Simulation, Identifikation und Optimierung bei komplexen technologischen Problemen. Derzeit behandelte Hauptanwendungsgebiete sind Moleküldynamik, hochfrequente Elektrotechnik unter Einschluß der integrierten Optik sowie chemische Verfahrenstechnik.

Abteilung Wissenschaftliche Software. Aufgabe ist die Weiterentwicklung von am ZIB entstandenen numerischen Algorithmen und Forschungscores. Hauptziel sind Effizienz und Anwenderfreundlichkeit der entwickelten Software. Die Abteilung betreut die public domain Programmbibliothek CodeLib und berät deren Nutzer. Darüber hinaus werden spezielle Fortentwicklungen für Zwecke der Kooperation mit Industrie und Forschung in Natur- und Ingenieurwissenschaften maßgeschneidert.

Abteilung Wissenschaftliche Visualisierung. Aufgabe ist die Entwicklung und Implementierung von neuen Visualisierungstechniken unter Nutzung von leistungsfähigen Algorithmen der Computergrafik und Numerik. Ziel ist die Unterstützung von wissenschaftlichen Anwendern. Derzeit im Vordergrund stehen Anwendungsbereiche aus der Medizin und Biotechnologie.

Bereich Diskrete Methoden

Abteilung Optimierung. Der Schwerpunkt der Forschung liegt im Bereich *Algorithmische Diskrete Mathematik*. Dabei steht die Untersuchung praxisrelevanter, schwieriger (“NP-schwerer”) kombinatorischer Optimierungsprobleme im Vordergrund. Ziel ist die mathematische Analyse der hier auftretenden Modelle und – darauf aufbauend – die Entwicklung und Implementierung effizienter Verfahren zu ihrer Lösung. 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 Statistik getreten, die die Forschung in dem Bereich der diskreten Optimierung ergänzen.

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.

Abteilung Wissenschaftliche Informationssysteme. 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. Die Abteilung beteiligt sich intensiv an der Diskussion und Einführung von Internet–orientierten Technologien der Information und Kommunikation im Wissenschaftsbereich. Als Dienstleistung für die Mathematik wird ein Projekt “Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math–Net)” vorbereitet.

2 Forschung und Entwicklung

2.1 Überblick

Zur Orientierung innerhalb der Fülle von Projekten soll hier vorab ein Überblick über die Schwerpunkte unserer Arbeit im Berichtszeitraum gegeben werden. Typisch für das Gebiet Scientific Computing ist eine enge Verflechtung zwischen theoretisch angelegten Grundlagenprojekten, in denen neue Methoden bereitgestellt werden, und auf die Praxis ausgerichteten Anwendungsprojekten. Im nachfolgenden Kapitel 2.2 werden die verschiedenen Schwerpunkte der Forschung und Entwicklung zusammen mit wenigen herausgehobenen Einzelprojekten aufgeführt. Hier sollen zunächst die wichtigsten Aktivitäten im Berichtszeitraum und die über das Jahr hinausreichenden Perspektiven dargestellt werden.

Der Bereich **Numerische Methoden** umfaßt die Abteilungen *Numerische Analysis und Modellierung*, *Wissenschaftliche Software* und *Wissenschaftliche Visualisierung* – und deckt somit die wesentlichen Aspekte ab, die bei der numerischen Simulation von natur- und ingenieurwissenschaftlichen Problemen eine Rolle spielen. Im Berichtszeitraum wurden die methodischen Schwerpunkte

- Adaptive Multilevel–Methoden
- Computergestützte Analyse dynamischer Systeme
- Wissenschaftliche Software
- Wissenschaftliche Visualisierung

aus den vorigen Jahren mit leicht veränderten Zielsetzungen und vielen neuen Ideen weitergeführt. Aus dem Blickwinkel der Anwendungen lagen die Schwerpunkte der Arbeit in den Gebieten

- Chemie- und Verfahrenstechnik
- Moleküldynamik
- Hochfrequente Elektrotechnik/Integrierte Optik
- Medizinische Therapieplanung.

Diese vernetzten Schwerpunkte sollen nun im einzelnen unter Einbeziehung der Drittmittelaktivitäten dargestellt werden.

Adaptive Multilevel–Methoden: In diesem seit vielen Jahren laufenden Schwerpunkt wurden neue adaptive Mehrgittermethoden, im wesentlichen für weitere Klassen von partiellen Differentialgleichungen (PDG) entworfen, implementiert und theoretisch analysiert. Hervorzuheben ist der neue Algorithmus für nicht-selbstadjungierte Eigenwertaufgaben, der auf einer Schur–Zerlegung für lineare

Operatoren basiert. Er wird bereits erfolgreich eingesetzt bei Problemen der Integrierten Optik und in der Moleküldynamik (siehe die gleichnamigen Schwerpunkte). Das Projekt wird derzeit vom BMBF gefördert, ein Nachfolge-Antrag ist gestellt. Des weiteren wurde eine neue Klasse von globalen Newton-Multilevel-Methoden für nichtlineare elliptische partielle Differentialgleichungen theoretisch hergeleitet und praktisch innerhalb der KASKADE-Toolbox implementiert. Die neue Theorie ist wesentlich einfacher als bisherige Theorien zum gleichen Thema und gestattet die direkte Umsetzung in eine effiziente Dämpfungsstrategie sowie die zugehörige Genauigkeitssteuerung für Diskretisierungsfehler und Iterationsfehler. Erweiterungen in die nichtlineare Optimierung (shape optimization) sind in Vorbereitung. Ein Teilaspekt dieser Arbeiten wird im kommenden Jahr im Rahmen eines Graduiertenkollegs gemeinsam mit Medizinerinnen der HUB gefördert werden. Ein neuentwickelter Maxwell-Löser wird innerhalb des Sonderforschungsbereiches 273 (siehe Schwerpunkt Medizinische Therapieplanung) gefördert und hat zudem einen wichtigen Beitrag in einer Kooperation mit Siemens geliefert (siehe Schwerpunkt Hochfrequente Elektrotechnik).

Wissenschaftliche Software: Nach vielen Jahren sorgfältiger Entwicklungsarbeit konnte in 1996 eine erste Version des Programms KARDOS-3D zur adaptiven Rothe-Methode fertiggestellt werden (mit Bezügen zu den Schwerpunkten Adaptive Multilevel-Methoden sowie Chemische Verfahrenstechnik). Dieses Programm gestattet die Behandlung von nichtlinearen parabolischen Systemen partieller Differentialgleichungen bei komplexer dreidimensionaler Raumgeometrie. Allein durch Perfektionierung der Datenstrukturen konnte eine Beschleunigung um eine Größenordnung erzielt werden. Bereits jetzt bestehen Kooperationen zu BASF sowie an die RWTH Aachen und die Universität Stuttgart, die im folgenden Jahr ausgebaut werden sollen. Die alternativen Programme zu Liniemethoden (PDEX1) für räumlich eindimensionale PDG-Systeme wurden im Berichtszeitraum parallelisiert, wobei auch algorithmisch neue Ideen einfließen. Erste Rechnungen im Rahmen eines von der VW-Stiftung geförderten Projektes zur Aerosolbildung waren auf Anhieb erfolgreich. (Leider läuft der übergeordnete Schwerpunkt Verfahrenstechnik der VW-Stiftung überraschend aus, so daß die bereits vorbereiteten Verlängerungsanträge hinfällig geworden sind.) Zwei Projekte zur Parallelisierung von komplexen adaptiven Algorithmen werden durch Drittmittel der Fa. CRAY gefördert.

Chemische Verfahrenstechnik: Die Tätigkeit im vergangenen Jahr konzentrierte sich auf die algorithmische Entwicklung für Probleme der chemischen Verbrennung. Dieses Projekt wurde gemeinsam mit U. Maas durchgeführt, der zum Jahresende auf einen Lehrstuhl für Verbrennungsschemie an die Universität Stuttgart gewechselt ist. Die bereits im Vorjahr vorgeschlagene dynamische Dimensionsreduktion für gewöhnliche Differentialgleichungen wurde in Anfängen auf die partiellen Differentialgleichungen für reaktive Strömungen übertragen. Diese Arbei-

ten wurden im Rahmen eines DFG–Schwerpunktprogrammes gefördert. Darüber hinaus wurden die beiden wichtigsten Programmpakete für diese Problemklasse, PDEX1 und KARDOS, in den Flammencode von Maas integriert, was die Basis für eine ins Auge gefaßte künftige Kooperation unter Einschluß von Industriepartnern darstellen wird. Weitere Projekte dieses Schwerpunktes werden durch die VW–Stiftung sowie durch die Fa. CRAY gefördert.

Hochfrequente Elektrotechnik/Integrierte Optik: Wichtigster Fortschritt in diesem Teilgebiet unserer Aktivitäten war ein neuartiges adaptives Multilevelverfahren für die Berechnung elektromagnetischer Felder, das auf speziell geeigneten finiten 3–D Elementen, sog. Whitney–Elementen, basiert. Durch ein geeignetes Splitting der Felder in Wirbel– und Quellenanteile konnte asymptotische Mehrgitterkonvergenz unabhängig von der Gitterfeinheit erzielt werden. Diese Arbeit wurde im Rahmen des SFB Hyperthermie gefördert. Der bereits weiter oben erwähnte neue Mehrgitteralgorithmus für nicht–selbstadjungierte Eigenwertaufgaben erwies sich als äußerst effizient bei der Berechnung verlustbehafteter Komponenten eines optischen Chips, mit dem das Heinrich–Hertz–Institut in Berlin weltweit technologisch führend ist. Diese Kooperation, die auch noch Siemens einschließt, wurde durch das BMBF gefördert. Anträge beim BMBF im Rahmen des Förderprogramms Photonik führten trotz fachlich hervorragender Begutachtung und industrieller Unterstützung (Siemens) leider nicht zum Ziel, weil im BMBF nach Ablauf der Begutachtung nahezu keine der ursprünglich vorgesehenen Mittel mehr für dieses Programm vorhanden waren. Für die bereits früher vorgeschlagenen diskreten transparenten Randbedingungen wurde zunächst in 1D eine einfachere Herleitung gefunden, die eine leichtere Übertragung in 2D zu versprechen scheint. Gemeinsam mit der TELEKOM wurden Anträge auf Förderung durch die Technologiestiftung Berlin gestellt, die sich auf die Auslotung der technologischen Möglichkeiten zukünftiger optischer Netze beziehen. Optische Netze werden in der Zukunft bei dem erwarteten enorm steigenden Bedarf an Übertragungskapazität eine entscheidende technologische und wirtschaftliche Rolle im Bereich Informations- und Kommunikationstechnik spielen. Mathematisch sind hierbei Algorithmen von Bedeutung, die im Schwerpunkt Moleküldynamik entwickelt und untersucht werden (nichtlineare Schrödingergleichungen).

Computergestützte Analyse dynamischer Systeme: Im Berichtszeitraum wurde die Kooperation mit dem ZIB–Fellow M. Dellnitz über adaptive Unterteilungsalgorithmen fortgeführt. Während im vorigen Jahr die Berechnung relativ globaler Attraktoren durch Multilevel–Zellenabbildung im Vordergrund stand, war dieses Jahr die Berechnung invarianter Maße sowie fastinvarianter Mengen für hyperbolische Systeme im Blickpunkt des Interesses. Auf diese Weise kann die wesentliche Dynamik eines Systems erfaßt werden, ohne direkte Simulation einzelner Trajektorien. Dieses Projekt wird im Rahmen eines DFG–Schwerpunktprogrammes gefördert. Die Übertragung dieses Grundprinzips in das Gebiet des Molecular

Modelling ist im Schwerpunkt Moleküldynamik ausführlich dargestellt. Um die Ausnutzung anderer Strukturen geht es in der äquivarianten Dynamik, wo Symmetrie das Lösungsverhalten dominiert. Im Berichtszeitraum wurde ein weiterer Beitrag zur Automatisierung der Theorie der äquivarianten dynamischen Systeme geleistet. Die Verzweigungsgleichungen werden nicht nur für endliche Gruppen, sondern erstmals auch für kontinuierliche Gruppen algorithmisch aufgestellt. Für diese Fragestellungen wurde ein MAPLE-Programm entwickelt.

Moleküldynamik: Die aus der Moleküldynamik kommenden Fragestellungen stellen eine riesige wissenschaftliche Herausforderung dar. Wirklich *effiziente und verlässliche* Algorithmen zur Beantwortung vieler industriell wichtiger Fragen liegen trotz weltweiter Bemühungen qualifizierter Wissenschaftler bisher noch nicht vor. Deshalb geht die Arbeitsgruppe des ZIB diesbezüglich völlig neue Wege. Ein bereits im Vorjahr eingeschlagener Weg führt über Homogenisierungs-Techniken zu neuen Modellgleichungen, die nur noch die mathematisch korrekte Mittelung der schnellsten Zeitskalen enthalten. Für verschiedene Anwendungen konnten im Berichtszeitraum eine Reihe von wichtigen theoretischen Teilergebnissen erzielt werden, die in der Folge zur algorithmischen Umsetzung anstehen. Sie wurden in zahlreichen Publikationen dargelegt. Neu im Berichtszeitraum begonnen wurde eine direkte Modellierung moleküldynamischer Aufenthaltswahrscheinlichkeiten anstelle der traditionellen Modellierung über (chaotische) Trajektorien. Der neue Zugang basiert auf der Berechnung von (wohlkonditionierten) Subtrajektorien innerhalb eines adaptiven Unterteilungsalgorithmus, der von den bisher behandelten hyperbolischen Systemen (siehe Schwerpunkt Dynamische Systeme) auf Hamiltonsche Systeme erweitert wurde. Mathematischer Hintergrund ist die Theorie von Frobenius-Perron ähnlich wie bei Monte-Carlo-Verfahren. Der dominante Eigenwert 1 repräsentiert die invariante Menge, während Eigenwerte in seiner Umgebung fast-invariante Mengen charakterisieren. Insgesamt erhält man so eine Darstellung der wesentlichen Moleküldynamik durch eine Zerlegung in nichtlineare Moden. Die effiziente Berechnung der Eigenmoden des Frobenius-Perron-Operators erfolgt durch unseren neuen adaptiven Mehrgitteralgorithmus (wie im Schwerpunkt Adaptive Multilevel-Methoden erwähnt). Die numerische Berechnung der Subtrajektorien soll durch speziell entwickelte schrittweitengesteuerte symmetrische Integratoren für Hamiltonsche Systeme durchgeführt werden. Weitere Projekte beziehen sich auf die für die chemische Industrie wichtigen Car-Parrinello-Algorithmen sowie auf adaptive Algorithmen für lineare und nichtlineare Schrödingergleichungen. Die Arbeitsgruppe nahm in 1996 aktiv teil am Aufbau des Berliner RNA-Technologie-Netzwerkes BeRNAT unter Federführung von V. Erdmann (Institut für Biochemie, FUB). Dieses Netzwerk soll im kommenden Jahr durch das BMBF, die Industrie sowie das Land Berlin umfangreich gefördert werden (geplant sind drei Stellen für diesen Schwerpunkt). Im Mai 1997 wird am ZIB das *Second International Symposium "Algorithms for Macromolecular Modelling"* stattfinden.

Wissenschaftliche Visualisierung: Neue wissenschaftliche Fragestellungen erfordern oft neue Visualisierungsalgorithmen, die dann in der Folge auch in nicht-wissenschaftliche Bereiche der Multimedien-Gesellschaft wandern. Im Berichtszeitraum stand, wie im Vorjahr, die unmittelbar visuell erfäßbare Darstellung von Vektorfeldern (also ohne Icons) im Mittelpunkt. Der schon im Vorjahr international vielbeachtete schnelle Algorithmus zur Linienintegralfaltung (fastLIC) wurde noch weiter beschleunigt und für die Darstellung von Vektorfeldern auf zweidimensionalen Mannigfaltigkeiten erweitert. Diese Technik läßt sich jedoch nicht direkt in das Dreidimensionale übertragen. Deswegen wurde für die Darstellung dreidimensionaler Vektorfelder ein neuer Zugang entwickelt und effizient implementiert. Dieser neue Algorithmus gestattet selbst filigranartige Vektorfeldstrukturen aus Strömungsmechanik oder Elektrodynamik optisch überzeugend aufzulösen. Die zugehörige Publikation wurde auf der IEEE-Tagung VISUALIZATION '96 in San Francisco vorgetragen und als "Best paper of conference" gewählt. Ein Projekt des Schwerpunktes wird im Rahmen des SFB Hyperthermie gefördert, der 1997 fällige Fortsetzungsantrag ist bereits in Vorbereitung. Ab Frühjahr 1997 soll ein Promotionsstipendium innerhalb eines bereits genehmigten Graduiertenkollegs finanziert werden. Innerhalb von BMBF-Verbundprojekten mit dem DFN werden zwei Mitarbeiterstellen sowie studentische Hilfskräfte finanziert (Informationsdienst Visualisierung, siehe auch Wissenschaftliche Informationsdienste). Im Rahmen des geplanten Berliner RNA-Technologie-Netzwerkes, das 1997 anlaufen soll, kommt der Visualisierung eine wichtige Rolle zu, was sich in einem umfangreichen Teilprojekt zur Biotechnologie niederschlägt (geplant sind drei Stellen für diesen Schwerpunkt). Im BMBF-Verbundprojekt "Standardgehirn" wurde ein Antrag zur hochaufgelösten Geometrie-Rekonstruktion von Nervenzellen gestellt und bereits positiv bewertet (vorgesehener Beginn Frühjahr 1997). Bei einer DFG-Schwerpunkts-Initiative (Large Scale 3D Graphics Computing) gingen Projektvorschläge des ZIB als Teil des geplanten Programms ein. Gemeinsam mit dem Springer-Verlag wird ein europäisches Projekt für ein Multimedia-Autorensystem für die Medizin konzipiert.

Medizinische Therapieplanung: Dieser Schwerpunkt hat sich erst 1996 am ZIB wirklich eigenständig etabliert. Im Rahmen des SFB Hyperthermie wurde ein integriertes Therapieplanungssystem (**HyperPlan**) entwickelt, das derzeit ca. 100.000 Zeilen Code umfaßt. Es bindet numerische Algorithmen (Maxwell-Löser, adaptive Mehrgitterverfahren), Gitteralgorithmen, Visualisierungsalgorithmen und 3D-Interaktionsmöglichkeiten zusammen in einer für Mediziner gedachten Softwareschale. Das Projekt wurde auf der CeBIT '96 in Hannover zur Eröffnung des Breitband-Wissenschaftsnetzes vorgestellt. **HyperPlan** wurde im Berichtszeitraum als Lizenz an die Industrie (Fa. Dr. Sennewald/Medizin-Technik, München) verkauft und wird in Zukunft zusammen mit dem BSD-Applikator, einem Gerät zur Wärmebehandlung von Krebspatienten, international eingesetzt werden. Die Erfahrungen bei der Entwicklung von **HyperPlan** gehen ein in die Entwicklung

von Therapieplanungssystemen für weitere medizinische Bereiche. Interesse aus der Mikrochirurgie wurde bereits signalisiert. Gemeinsam mit der TU München (K.-H. Hoffmann) wurde ein BMBF-Verbundprojekt zur Simulation von Geburtsvorgängen beantragt, bei dem das ZIB die Visualisierung zu vertreten hat. Ab 1997 läuft das Graduiertenkolleg "Temperaturabhängige Effekte in Therapie und Diagnostik" an (Sprecher: R. Felix, HUB), in dem Simulation und Visualisierung von Seiten des ZIB als Themen zu behandeln sind. Für Sommer 1997 ist ein Workshop *Scientific Computing in der Medizin* gemeinsam mit W. Schlegel (DKFZ Heidelberg) und A. Louis (Saarbrücken) in Vorbereitung.

Der Bereich **Diskrete Methoden** besteht aus den Abteilungen *Optimierung*, *Wissenschaftliche Informationssysteme* und *Symbolik*. In Fortsetzung der Entwicklung der Vorjahre hat der Bereich Diskrete Methoden das Spektrum seiner Forschungsaktivitäten auf neue Gebiete aus Theorie und Praxis ausdehnen können. Drittmittel des Senats von Berlin, des DAAD, der DFG, des BMBF sowie von mehreren industriellen Partnern förderten die Weiterführung und Neuaufnahme von Forschungsprojekten, die von der Grundlagenforschung in den Bereichen Polyedertheorie, Konvexgeometrie und Geometrie der Zahlen über methodische Forschung in den Bereichen der linearen, nichtlinearen, ganzzahligen und stochastischen Optimierung bis hin zu Anwendungsprojekten aus den Bereichen Telekommunikation, Kraftwerkssysteme und Transportwesen reichen. Die inhaltlichen Schwerpunkte, die der Bereich Diskrete Methoden im Berichtszeitraum setzte, lassen sich den folgenden Themen zuordnen:

- Polyedrische Kombinatorik und Graphentheorie
- Algorithmen zur Lösung allgemein linearer und gemischt-ganzzahliger Optimierungsprobleme
- Zahlentheoretische und geometrische Methoden
- Transportprobleme mit und ohne Echtzeitanforderungen
- On- und Offline-Optimierung in Kraftwerkssystemen
- Telekommunikation
- Computeralgebra
- Information und Kommunikation im Wissenschaftsbereich
- Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)
- Informationstechnische Werkzeuge für Museen.

Die ersten sieben Schwerpunkte werden im folgenden überblicksartig dargestellt, die Beschreibung der drei letzten Schwerpunkte sind im Kapitel 3 zu finden.

Polyedrische Kombinatorik und Graphentheorie: Verfahren, welche auf polyedrischen und graphentheoretischen Methoden beruhen, gehören heutzutage zu den effizienten Algorithmen zur Behandlung diskreter Optimierungsprobleme. Im Berichtszeitraum führten Mitarbeiter des Bereichs Untersuchungen zu Unterteilungen endlicher Punktfigurationen und Seitenflächen von Polyedern durch, die sich im Zusammenhang mit folgenden Fragestellungen ergeben: Dekomposition von Matrizen, Partitionierung von Graphen, Rucksack- und Rundreiseprobleme. Es ist zu erwarten, daß von diesen zunächst theoretischen Untersuchungen neue Impulse für die Lösung allgemein linearer und gemischt-ganzzahliger Optimierungsprobleme ausgehen werden. Vielversprechend scheint uns ebenfalls das Studium des Stabile-Mengen-Problems an der Schnittstelle zwischen Graphentheorie, ganzzahliger Optimierung und Komplexitätstheorie. Hier wurde neben Arbeiten am Stabile-Mengen-Polyeder die Charakterisierung der Klasse der perfekten Graphen vorangetrieben.

Unterstützt wurden die Projekte dieses Schwerpunktes durch Mittel der DFG (Graduiertenkolleg "Algorithmische Diskrete Mathematik", Leibniz-Preis 1995).

Algorithmen zur Lösung allgemein linearer und gemischt-ganzzahliger Optimierungsprobleme: Dieser Schwerpunkt umfaßt die methodischen Forschungsprojekte zu den Themen lineare, nichtlineare, ganzzahlige und stochastische ganzzahlige Optimierung. Im Bereich der linearen-ganzzahligen Programmierung konzentrierten sich die Aktivitäten auf die Entwicklung und Implementierung eines Verfahrens, welches auf massiv parallelen Rechnern zum Einsatz kommt. Erfahrungen konnten bei der Parallelisierung der LU-Zerlegung dünn besetzter Matrizen und der Parallelisierung der Pricing-Routinen für den dualen Simplex-Algorithmus gewonnen werden. Zum Teil beachtliche Erfolge bei ganzzahligen Programmen ergaben sich durch die Integration neuer Schnittebenen für Rucksackprobleme und die Fertigstellung eines Präprozessors. Weitere Verbesserungen bei der Lösung ganzzahliger und stochastisch ganzzahliger Programme wurden durch verschiedene Dekompositionsmethoden erzielt. Spezielles Interesse galt dabei den Fragen, ob eine allgemeine Matrix Blockstruktur aufweist, bzw. wie Blockstruktur methodisch nutzbar gemacht werden kann. Im Bereich der nichtlinearen Ansätze zur Behandlung diskreter Probleme führte die Weiterentwicklung der semidefiniten Programmierung und der Eigenwertoptimierung zu guten Resultaten bei der Approximation und Relaxation quadratischer 0/1-Probleme.

Zahlentheoretische und geometrische Methoden: Ganzzahlige Optimierung ist eng verbunden mit Fragestellungen aus den Gebieten Geometrie der Zahlen, Algebra, Zahlentheorie und Konvexgeometrie. In diesem durch Mittel der DFG unterstützten Grundlagenprojekt werden neue Resultate und Verfahren für die ganzzahlige Optimierung mit Hilfe der oben angeführten mathematischen Disziplinen abgeleitet bzw. entwickelt. Besonderes Interesse galt im Berichtszeitraum den Projekten Algorithmische Fragestellungen aus der Geometrie der Zahlen, Mi-

nimale Erzeugendensysteme und Testmengen und der Packung und Überdeckung konvexer Körper. Aus praktischer Sicht vielversprechend erscheinen uns die Verbindungen zu Testmengen ganzzahliger Programme, mit deren Hilfe exakte primale Optimierungsverfahren für diskrete Probleme konzipiert werden können. Die in diesem Projekt erzielten Ergebnisse bilden einen ersten Schritt in diese Richtung.

Transportprobleme mit und ohne Echtzeitanforderungen: Optimierungsprobleme in komplexen realen Transportsystemen erfordern in immer stärkerem Maße den Einsatz mathematischer und nicht nur ingenieurwissenschaftlicher Methoden. Wir verfolgen das Ziel, komplexe Transportprobleme zu modellieren, zu simulieren und mathematische Verfahren zu ihrer Lösung zu entwickeln. Dabei unterscheiden wir zwei Problemklassen: Aufgaben bei denen zum Entscheidungszeitpunkt sämtliche Daten vorliegen und Aufgaben, bei denen unvorhersehbare Änderungen der Daten zur ständigen Reoptimierung in Echtzeit zwingen. Projekte zur Busumlaufplanung im Öffentlichen Personen-Nahverkehr (ÖPNV) und zur Fahrzeugeinsatzplanung im Behindertentransport zählen zur ersten und ein Projekt zur Echtzeitsteuerung automatischer Transportsysteme im Bereich der flexiblen Fertigung zur zweiten der genannten Problemklassen. Mathematische Grundlagen betreffen dabei LP- und Lagrange-Techniken in Multi-Commodity-Flow-Modellen, Set-Partitioning-Ansätze und On-line Varianten des Asymmetrischen-Travelling-Salesman-Problems.

Die Projekte dieses Themenkreises werden von der DFG, dem BMBF und der Berliner Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur gefördert. Das Vorhaben "Dienstplanung im ÖPNV" befindet sich gegenwärtig in der Begutachtung durch das BMBF. Kooperationen bestehen mit den Firmen HanseCom GmbH (Hamburg), IVU GmbH (Berlin), Herlitz AG (Berlin) und dem Berliner Zentrallausschuß für Soziale Aufgaben e.V.

On- und Offline-Optimierung in Kraftwerkssystemen: Aufgrund des komplexen Zusammenwirkens wirtschaftlicher, technischer und ökologischer Faktoren bieten Kraftwerkssysteme vielfältige Ansatzpunkte für den Einsatz mathematischer Optimierungsmethoden. Gemeinsam mit dem Industriepartner VEAG Vereinigte Energiewerke AG Berlin arbeiten wir an praxistauglichen Modellen, Algorithmen und Implementierungen zur Festlegung brennstoffkostenminimaler Fahrpläne von Kraftwerkssystemen. Die Modelle unterscheiden sich nach der Länge der zugrundeliegenden Planungshorizonte und der zu Planungsbeginn vorliegenden Information über wirtschaftliche und technische Randbedingungen. Große gemischt-ganzzahlige lineare Programme mit vielfältiger interner Verkopplung sind dabei von besonderer Bedeutung. Algorithmen zur Lösung dieser Probleme nutzen Resultate aus methodischen Forschungsprojekten des ZIB, wie z.B. zur Dekomposition strukturierter gemischt-ganzzahliger LPs.

Die Projekte dieses Themenkreises werden von der DFG, dem BMBF und der

Berliner Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur (bis 9/96) gefördert. Das Vorhaben “Langfristige Einsatzplanung in Kraftwerkssystemen” befindet sich gegenwärtig in der Begutachtung durch das BMBF. Weitere Aktivitäten betreffen die Mitwirkung an der Ausarbeitung des Vortrages für einen Sonderforschungsbereich “Optimierung komplexer Energieversorgungssysteme” am Institut für Energietechnik der TU Berlin. Hier werden Beiträge zur Optimierung in Energiesystemen unter den veränderten Bedingungen eines deregulierten europäischen Strommarktes angestrebt.

Telekommunikation: Nach geeigneter mathematischer Modellierung lassen sich Fragen der möglichst effektiven Nutzung von Leitungskapazitäten in der Telekommunikation mit Methoden der ganzzahligen Optimierung und der Bedienungstheorie behandeln. Am ZIB bearbeitete Projekte betreffen die Netzwerkdimensionierung, die Frequenzplanung im Mobilfunk und die Dimensionierung von ACD (Automatic Cell Distribution)–Systemen. Dabei kommen primale Heuristiken, Schnittebenenverfahren sowie Approximationen relevanter Wahrscheinlichkeiten und Momente in Bediensystemen zum Einsatz.

Die Projekte zur Telekommunikation werden vom BMBF und der Berliner Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur (bis 10/96) sowie von den industriellen Kooperationspartnern FTZ der Deutschen Telekom AG (Darmstadt), Siemens AG (München), E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf) gefördert.

Computeralgebra: In der Abteilung “Symbolik” wird Software für eine Vielzahl von Computeralgebrasystemen erstellt. Dabei werden sowohl Algorithmen aus der wissenschaftlichen Literatur als auch Algorithmen, die Ergebnis eigener Forschung sind, verwendet. Die Software ist zumeist als public domain Software oder gegen eine geringe Lizenzgebühr erhältlich. Ein Schwerpunkt ist die Weiterentwicklung von REDUCE, einer symbolischen Formelmanipulationssprache mit Zielproblemen am Rande des derzeit Rechenbaren. Die Pflege von REDUCE geschieht seit vielen Jahren in enger Abstimmung mit A. C. Hearn von der RAND Corporation. Neue Veröffentlichungen im Berichtszeitraum betrafen insbesondere Orthogonalpolynome. Die Entwicklungsarbeiten hatten ihren Schwerpunkt in der parallelen Computeralgebra sowie der Verwendung des World Wide Web für die Darstellung und Verbreitung der Resultate. Für die nächste Version von REDUCE eröffnet das WWW die Möglichkeit, das Computeralgebrasystem weltweit auf einem einheitlichen Stand zu halten. Neue Implementierungen von Algorithmen oder Fehlerkorrekturen können dann automatisch von den Benutzern abgerufen werden.

2.2 Schwerpunkte

2.2.1 Adaptive Multilevel–Methoden

In diesem seit vielen Jahren laufenden Schwerpunkt stand im Berichtszeitraum die Entwicklung neuer adaptiver Multilevel–FE–Methoden für erweiterte Klassen von partiellen Differentialgleichungen im Vordergrund, insbesondere nicht–selbstadjungierte sowie nichtlineare Probleme.

Nicht–selbstadjungierte Eigenwertprobleme

Bearbeitet von: T. Friese, F. Schmidt, P. Deuffhard

Förderung: BMBF–Projekt “Anwendungsorientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik”

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

Die Berechnung weniger, separierter Eigenwerte und korrespondierender Eigenvektoren nicht–selbstadjungierter linearer Operatoren ist ein in den Natur- und Ingenieurwissenschaften häufig auftretendes Problem: diese Aufgabe ergibt sich z.B. in der *Integrierten Optik* bei der Simulation verlustbehafteter Komponenten, in der *Moleküldynamik* bei der direkten Berechnung statistischer Eigenschaften (siehe Schwerpunkt Moleküldynamik).

Das in [5] vorgestellte nichtlineare Mehrgitter–Verfahren für die Eigenwertberechnung *selbstadjungierter* Operatoren konnte im Berichtszeitraum auf den *nicht–selbstadjungierten* Fall erweitert werden. Wesentliche Idee ist der Übergang zur *Schur–Zerlegung* des linearen Operators. Analog den Eigenvektoren selbstadjungierter Operatoren bilden die Schurvektoren im nicht–selbstadjungierten Fall unter bestimmten Voraussetzungen eine Orthonormalbasis des zugrundeliegenden Hilbertraumes. Der entwickelte Algorithmus wird den Mittelpunkt der Arbeit [6] bilden. Neben einer ausführlichen Beschreibung der nichtlinearen Mehrgitter–Methode werden dort auch gerechnete Beispiele aus den Gebieten Integrierte Optik und Moleküldynamik dargestellt.

Modellproblem: Zu lösen sei das Eigenwertproblem

$$-\Delta u(x, y) + f(x, y) u(x, y) = \lambda u(x, y)$$

auf dem zweidimensionalen Gebiet $\Omega = (-5, 5) \times (-5, 5)$ mit dem komplexen Potential

$$f(x, y) = x^2 + 2ixy + y^2$$

und Neumann–Randbedingung, wobei die 3 Eigenwerte mit kleinstem Realteil simultan mit einer Unterraum–Iteration bestimmt werden sollen. Die Starttriangulierung \mathcal{T}_0 mit 25 Knoten ist in Abbildung 1 links, die nach 8 adaptiven

Verfeinerungsschritten erreichte Endtriangulierung \mathcal{T}_8 mit 10369 Knoten ist in Abbildung 1 rechts dargestellt.

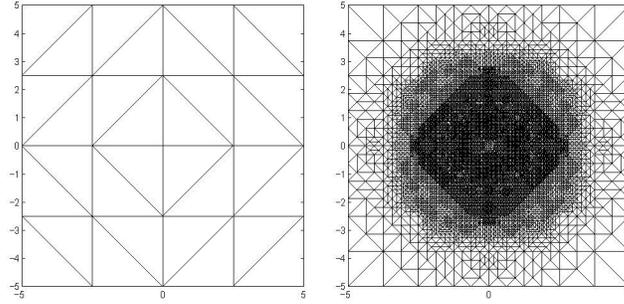


Abbildung 1: Start- und Endtriangulierung zur Berechnung des Unterraumes.

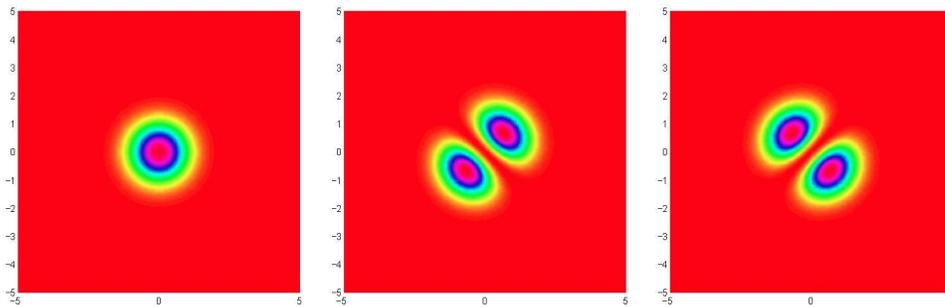


Abbildung 2: Betragsquadrate der komplexen Schurfunktionen u_1 und $u_{2/3}$.

Pro diskretem Level waren asymptotisch 3 V-Zyklen mit jeweils 3 Vor- und Nachglättungen auszuführen, um die diskreten Probleme auf eine relative Genauigkeit von 10^{-5} zu lösen. Die CPU-Zeit für die gesamte Rechnung unter MATLAB betrug 18 Minuten auf einer Workstation SUN SPARC 4 (zum Vergleich: für das selbstadjungierte Problem 10 Minuten). Die Eigenwerte ergaben sich zu $\lambda_1 \doteq 2.1983$ und $\lambda_{2/3} \doteq 4.3970 \pm 0.9107i$. Die Betragsquadrate der zugehörigen komplexen Schurfunktionen sind in Abbildung 2 dargestellt.

Inexakte Newton–Multilevel–FEM für nichtlineare elliptische partielle Differentialgleichungen

Bearbeitet von: P. Deuffhard, M. Weiser

Kooperationspartner: R. Kornhuber (Universität Stuttgart), ZIB–Fellow

Die Lösung nichtlinearer elliptischer Differentialgleichungen erscheint im Finite-Elemente-Kontext als Minimierung konvexer Funktionale. Die Minimierung dieser Funktionale durch das Newtonverfahren für die Gradientenabbildung führt auf die Formulierung einer affin-konjugierten Theorie inexakter Newtonverfahren, wobei die für affin-invariante Newtonverfahren typischen Lipschitzbedingungen hier nun in der Energienorm formuliert werden.

Besondere Aufmerksamkeit verlangt dabei die Genauigkeitsanpassung zwischen innerer und äußerer Iteration. Im Berichtszeitraum stand neben dem lokalen [4] das globale Newton–Galerkin–Verfahren [3] im Blickpunkt. Die bisher bestehende Theorie konnte deutlich vereinfacht und daraus eine adaptive Dämpfungsstrategie hergeleitet werden.

Mit einfachen Komplexitätsmodellen konnte gezeigt werden, daß für adaptive FEM-Diskretisierungen als innerer Iteration der *lineare* Konvergenzmodus optimal ist, wohingegen für endlichdimensionale Probleme mit PCG-Verfahren als innerer Iteration der *quadratische* Konvergenzmodus optimal ist.

Es wurde eine effiziente Integration des gedämpften Newton–Galerkin–Verfahrens in die KASKADE–Toolbox vorgenommen.

Newton-Verfahren sind nur auf hinreichend glatte Probleme direkt anwendbar.

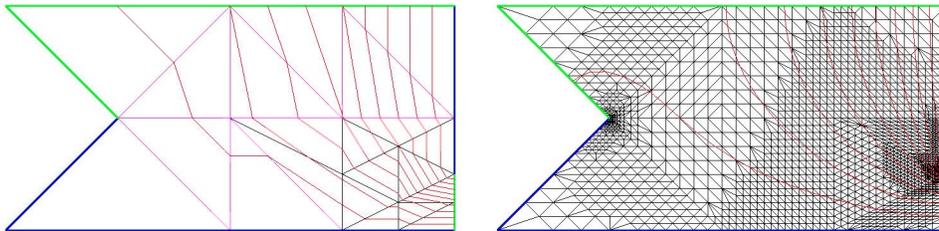


Abbildung 3: u^0 und u^3 berechnet im linearen Konvergenzmodus ($d = 2$). Dirichlet–Randbedingungen: schwarze Linien, Neumann–Randbedingungen: graue Linien. Verfeinerungstiefen $j = 1, 14$.

Während eines Gastaufenthalts am ZIB wurde von R. Kornhuber ein global konvergentes, nichtlineares Mehrgitterverfahren für *stückweise* glatte Probleme entwickelt, analysiert und an Modellproblemen erprobt [7]. Die Kombination mit inexakten Newton–Techniken ist Gegenstand zukünftiger Zusammenarbeit.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Lösen von nichtlinearen Evolutionsproblemen in 3D. (J. Lang)

Nach der erfolgreichen Entwicklung und Anwendung von adaptiven Multilevel–Verfahren zur Lösung von nichtlinearen Evolutionsproblemen in einer und zwei Raumdimensionen wurden erhöhte Anstrengungen unternommen, um die algorithmischen Konzepte auf 3D zu übertragen, insbesondere wurde ein spezieller asymptotisch exakter Fehlerschätzer konstruiert (s. Schwerpunkt Wissenschaftliche Software).

Eine adaptive Lagrange-Galerkin-Methode für Probleme der Hydrodynamik. (A. Schmidt)

Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung einer adaptiven Multilevel-FE-Methode

zur Lösung der instationären Navier-Stokes-Gleichungen für inkompressible Fluide. Es wurde ein adaptives Lagrange-Galerkin-Verfahren auf der Basis von konformen wie auch von nichtkonformen finiten Elementen realisiert.

Eine adaptive Rothe–Methode für die Wellengleichung. (M. Schemann, F. A. Bornemann)

In diesem Projekt wird die schon bei (nichtlinearen) parabolischen partiellen Differentialgleichungen erfolgreiche adaptive Rothe-Methode nun für einen *hyperbolischen* Modellfall, die zweidimensionale Wellengleichung, untersucht. Im Rahmen einer Diplomarbeit, die auf der Studentenkonferenz der Mathematik ‘96 in Jena als Auszeichnung einen Tagungsaufenthalt am Mathematischen Forschungsinstitut Oberwolfach erhielt, wurden die mathematischen Details der Rothe–Methode für die Wellengleichung ausgearbeitet sowie eine erste Implementierung in KASKADE vorgenommen.

Beispielrechnungen zeigen, daß sich bei stark lokalisierten Phänomenen oder bei Beugung in den Schattenbereich der geometrischen Optik adaptive Raumgitter bezahlt machen und die Rothe–Methode ein effizientes Werkzeug zu ihrer Berechnung darstellt. Aus prinzipiellen Gründen bleibt im 2D-Fall dieser Vorteil auf eine Anfangsphase beschränkt: ein scharfes Signal breitet sich stets auf das gesamte Rechengebiet aus, was zu uniformen Triangulierungen führt. Im 3D-Fall ist durch das „Huygenssche Prinzip in der starken Formulierung“ allerdings zu erwarten, daß anfangs scharf lokalisierte Phänomene im Innern ihres Ausbreitungskegels Schattenbereiche erzeugen, welche durch adaptive Methoden effizient aufgelöst werden können. Theorie und Beispiele sind in [9] publiziert.

Berechnung hochfrequenter elektromagnetischer Felder. (R. Beck, P. Deuffhard)

Dieses Projekt zielt auf die Erweiterung der adaptiven Multilevel-FE-Methoden zur Lösung der zeit-harmonischen Maxwell’schen Gleichungen in inhomogenen Medien. Es wurde ein mit speziellen Projektionsverfahren kombinierter Mehrgitter-Algorithmus mit optimaler Konvergenzrate unabhängig von der Verfeinerungstiefe entwickelt (s. Schwerpunkt Hochfrequente Elektrotechnik).

Publikationen

1. F. A. Bornemann and P. Deuffhard. The cascadic multigrid method for elliptic problems. *Numer. Math.*, Springer Verlag, 75: 135–152, (1996).
2. F. A. Bornemann and P. Deuffhard. Cascadic multigrid methods. In Z. Shi R. Glowinski, J. Périaux and O. Widlund, editors, *Domain Decomposition Methods in Sciences and Engineering*. John Wiley & Sons, Chichester, New York, (1996).

3. P. Deuffhard and M. Weiser. Global inexact Newton multilevel FEM for non-linear elliptic problems. ZIB Preprint, SC 96–33
4. P. Deuffhard and M. Weiser. Local inexact Newton multilevel FEM for non-linear elliptic problems. ZIB Preprint, SC 96–29
5. P. Deuffhard, T. Friese, F. Schmidt, R. März, H.–P. Nolting. Effiziente Eigenmodenberechnung für den Entwurf integriert–optischer Chips. In: K.H. Hoffmann, W. Jäger, T. Lohmann, H. Schunck, editors, *Mathematik–Schlüsseltechnologie für die Zukunft*, pages 267–280. Springer–Verlag Berlin Heidelberg New York, (1996)
6. T. Friese. Eine nichtlineare Mehrgitter–Methode für das Eigenwertproblem linearer, nicht–selbstadjungierter Operatoren. Vorarbeiten zur Dissertation, voraussichtlicher Abschluß: Frühjahr 1997.
7. R. Kornhuber. On robust multigrid methods for piecewise smooth variational problems. ZIB Preprint, SC 96–38
8. J. Lang. Adaptive FEM for reaction–diffusion equations. ZIB Preprint, SC 96–28, *submitted to Appl. Numer. Math.*, (1996)
9. M. Schemann and F. A. Bornemann. Adaptive Rothe’s method for the wave equation. ZIB Preprint, SC 96–39

2.2.2 Wissenschaftliche Software

Übergreifendes Ziel des Schwerpunktes ist die Pflege und Weiterentwicklung von numerischer Software, die am ZIB aus Forschungscodes hervorgegangen ist und weiterhin hervorgeht. Dies bezieht sich auf Verbesserungen in der Implementierung, die Entwicklung von Varianten für parallele Rechnerarchitekturen, die Modifikation und Weiterentwicklung von Algorithmen. Aber auch eher nichtnumerische Aspekte wie Portabilität, Benutzerfreundlichkeit, einfache Bedienung und geeignete Darstellung sowohl der problemrelevanten Größen als auch des algorithmischen Ablaufs spielen eine wichtige Rolle. Hinzu kommt als wichtige Aufgabe die zugehörige qualifizierte Beratung von Anwendern.

Innerhalb der Programmsammlung CodeLib werden die Basisvarianten der folgenden Verfahren als Public Domain Software angeboten:

- Affin-invariante Newton-Verfahren für nichtlineare Gleichungssysteme (NLEQ1, NLEQ1S, ...)
- Extrapolationsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen und differentiell-algebraische Systeme (EULSIM, LIMEX,...)
- Adaptive Linienmethoden für nichtlineare Systeme von parabolischen Differentialgleichungen in einer Raumdimension (PDEX1M, ...)
- Adaptive Multilevel Finite Element Verfahren für elliptische und parabolische Differentialgleichungen in einer, zwei oder drei Raumdimensionen (KARDOS-1D, KASTIO2, KASKADE, ...)

Spezielle Varianten und Erweiterungen werden dagegen nur nach Rücksprache oder bei einer entsprechenden Übereinkunft, typischerweise im Rahmen einer Kooperation, zur Verfügung gestellt.

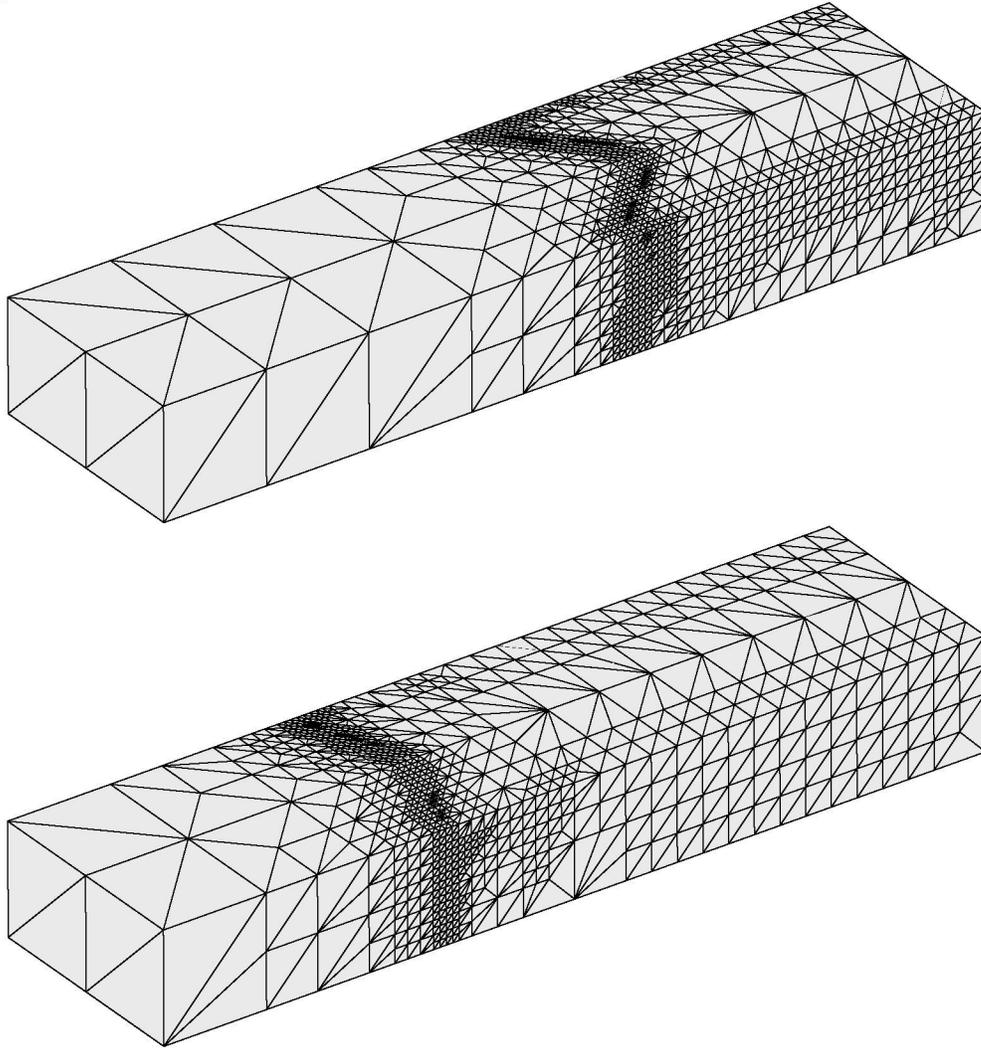
Adaptive Rothe-Methode für parabolische Systeme in drei Raumdimensionen (KARDOS-3D)

Bearbeitet von: J. Lang, B. Erdmann, R. Roitzsch

Im Mittelpunkt des Projektes stand die Erweiterung des Programmpaketes KARDOS auf Systeme von parabolischen, nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen in drei Raumdimensionen. Dabei konnte auf zahlreiche algorithmische Vorarbeiten und Erfahrungen bei der Simulation von praktisch relevanten, komplexen Prozessen zurückgegriffen werden [3,5]. Ein Großteil der Gitterverwaltung wurde aus dem am ZIB entwickelten Programm KASKADE übernommen. Ein wesentlicher Schritt war die Integration der 3D-Gitterdaten in einen zeitabhängigen Prozeß, denn die Implementierung von Einschrittverfahren für die zeitliche Diskretisierung verlangt zwei unabhängige räumliche Gitter. Um die notwendigen

Suchalgorithmen zu optimieren, müssen spezielle *Datenstrukturen* angelegt werden, die einen schnellen Datenaustausch zwischen diesen Gittern ermöglichen. In 1D- und 2D-Rechnungen ergaben sich allein hierdurch *Beschleunigungsfaktoren bis zu etwa 10*.

Eine wesentliche Erweiterung stellen *Vergrößerungsalgorithmen* für hierarchische 3D-Gitter dar. Diese Technik erlaubt eine adaptive Wahl eines neuen Anfangsgitters, wobei kritische Moden der Lösung am alten Zeitpunkt besser berücksichtigt werden können [4,6]. Dadurch wird der iterative Lösungsprozess deutlich robuster.



Räumliche Diskretisierung für eine wandernde Flammenfront.

Bereits zahlreiche praktische 2D-Simulationsrechnungen haben gezeigt, daß eine asymptotisch exakte und robuste *Fehlerschätzung im Ort* eine wesentliche Voraussetzung für zuverlässige Rechenergebnisse ist. Die bisher realisierten Algo-

rithmen mußten hinsichtlich einer 3D-Vernetzung mittels Tetraeder theoretisch neu durchdacht werden. Der räumliche Diskretisierungsfehler wird nun mit Hilfe lokaler Probleme über eine speziell gewählte Vereinigung von finiten Elementen berechnet.

Die Approximation von Randbedingungen wurde von linear nach nichtlinear erweitert. Damit lassen sich komplizierte *Oberflächeneffekte* simulieren, wie sie etwa in der chemischen Verfahrenstechnik auftreten (siehe Schwerpunkt “Chemische Verfahrenstechnik”).

Als ein erstes Anwendungsproblem wurde die Wärmeleitung im menschlichen Körper mit einem wirklichkeitsnäheren, nichtlinearen Perfusionmodell gerechnet. Es zeigen sich Temperaturunterschiede von 3–5 Grad gegenüber dem linearen Modell (siehe Schwerpunkt “Medizinische Therapieplanung”, SFB 273).

Desweiteren konnten erste Schritte in Richtung der Berechnung von laminaren Flammen unternommen werden. Die obigen Bilder zeigen adaptive räumliche Gitter, wie sie bei der Berechnung einer wandernden Flammenfront in einem Reaktor automatisch entstehen. Sie wurden mit der graphische Entwicklungssoftware GRAPE des Sonderforschungsbereich 256 an der Universität Bonn erzeugt.

Parallele Linienmethode auf Extrapolationsbasis (LIMEXP)

Bearbeitet von: R. Ehrig, U. Nowak, P. Deuffhard

Förderung: CRAY Research, Parallel Linearly-Implicit Extrapolation Methods

Die Simulation komplexer verfahrenstechnischer Prozesse führt zu außerordentlich rechenzeitintensiven numerischen Methoden. Die am ZIB entwickelten Programme EULSIM, LIMEX und PDEX1M, die auf der linear-impliziten Euler-Diskretisierung mit Extrapolation basieren, haben sich bei der Lösung von Problemen aus dem genannten Bereich seit längerem bewährt. Für die Basisdiskretisierung wurde ein skalierbarer paralleler Algorithmus implementiert, der eine wesentliche Erweiterung des Anwendungsspektrums dieser Programmfamilie eröffnet.

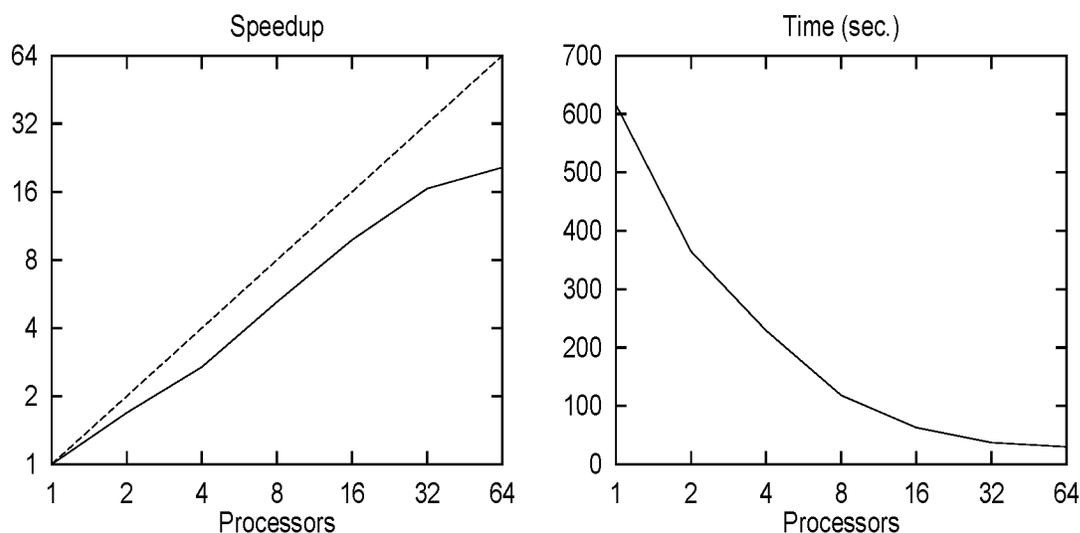
Die Grundlage der Parallelisierung ist eine “physikalisch basierte” Gebietszerlegung, die eine Zerlegung der diskreten Jacobi-Matrix in horizontale Streifen ergibt.

Für die linearen Gleichungssysteme, die den größten Teil der Rechenzeit benötigen, wurde ein spezieller iterativer Solver (mit Vorkonditionierer) entwickelt. Die Aufteilung der Jacobi-Matrix auf die Prozessoren erlaubt eine problemlose Parallelisierung der Matrix-Vektor-Multiplikationen. Diese Struktur nutzt auch der Vorkonditionierer aus, der die Inverse der Matrix durch eine abgebrochene Neumann-Reihe approximiert. Die Anwendung des Präkonditionierers erfordert dann im wesentlichen nur eine weitere Matrix-Vektor-Multiplikation. Konvergenz und Stabilität dieser Methode werden durch Definition einer überlappenden Gebietszerlegung wesentlich verbessert. Der gewählte Vorkonditionierer erlaubt, die

Anwendung des iterativen Algorithmus auf den Bereich der Grenzen der Gebietszerlegung zu beschränken und erst danach die Lösung für das Innere der Gebiete zu berechnen. Dies führt zu einer drastischen Verringerung der für den iterativen Löser benötigten Gleitkommaoperationen. Zusätzlich wurden verschiedene Möglichkeiten der Wiederverwendung der Krylov-Räume realisiert.

Die Implementierung des Verfahrens basiert auf den shared-memory-Kommunikationsroutinen der Fa. Cray und ergibt ein sehr effektives und skalierbares paralleles Programm [2]. Für das noch relativ kleine Problem der Simulation der Abgasreinigung in einem Autokatalysator (11 PDE's) erhält man mit 32 Prozessoren bereits einen Speedup von etwa 18.

Derzeit wird das Verfahren in Zusammenarbeit mit dem Institut für Technische Thermodynamik der Universität Karlsruhe in das Programmsystem SENECA zur Simulation der Aerosolbildung in Abgaswaschanlagen implementiert. Die besondere Problematik ist hierbei die große Zahl von bis zu 100 PDE's, die an jedem Gitterpunkt und jedem Zeitschritt zudem unterschiedlich sein kann. Weiterhin ist die Realisierung der Methode für das auch im Raum adaptive Verfahren PDEX1M [7] in Arbeit.



Rechenzeiten und Speedup am Beispiel der katalytischen Abgasreinigung.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Bearbeitet von: R. Beck, R. Ehrig, B. Erdmann, J. Lang, K.-D. Oertel, L. Oeverdieck, U. Pöhle, R. Roitzsch, L. Weimann

Kooperationspartner: J. Fuhrmann, H. Langmach (WIAS), R. Kornhuber (ZIB-Fellow, Mathematisches Institut, Universität Stuttgart), B. Sucrow (FB Mathematik und Informatik, Universität Essen)

Förderung: CRAY Research, Parallel Adaptive Multilevel Methods

Die Entwicklung graphischer Benutzeroberflächen (GUI) für ausgewählte CodeLib-Verfahren wurde fortgeführt. Die Erstellung derartiger Oberflächen ist dabei nicht so sehr unter dem Problemlösungsaspekt zu sehen, vielmehr soll die Erstenutzung eines Verfahrens erleichtert werden und Eigenschaften und optionale Möglichkeiten der Verfahren dem Anwender leichter zugänglich gemacht werden [8,10]. Für eine Reihe von Programmen wurden graphische Ausgabemodule entwickelt, die eine Analyse des algorithmischen Ablaufs erleichtern. Durch Erstellung einer auf der Entwicklungsumgebung tcl/tk basierenden Toolbox [9] wurde die Implementierung erleichtert und ein einheitliches Erscheinungsbild der verschiedenen Benutzeroberflächen erreicht. Das ganze Projekt hat auch einen starken Ausbildungsaspekt. Durch Experimentieren mit der entsprechenden Software kann eine Vertiefung von erworbenem theoretischen Wissen erreicht werden. Ziel der Entwicklung ist die Einrichtung eines virtuellen Labors (CodeLab) für die numerische Software der CodeLib. Ein erster Schritt in diese Richtung ist die erfolgte Bereitstellung des NLEQ-Labs im WWW

<http://www.zib.de/SciSoft/CodeLab/NLEQ1Lab/> .

Im Bereich der Pflege der KASKADE *Toolbox* wurde neben einer Reihe von Erweiterungen des KASKADE 3.x Baukastens [1] besonderer Wert auf Effizienzsteigerung durch Tuning des C++-Codes gelegt. Dabei konnten Resultate der Parallelisierungsarbeiten verwendet werden. Eine neue Version (KASKADE 3.1) konnte freigegeben werden. Daneben wurde mit der Entwicklung von Konfigurationsprozeduren begonnen, die eine höhere Portabilität gewährleisten. Um den Informations- und Erfahrungsaustausch zu erleichtern, wurde eine Mailing-Liste eingerichtet. Sie umfaßt zur Zeit 120 Subskribenten (40 aus Deutschland, 30 aus USA, 17 weitere Länder).

Der Leistungsumfang von KASKADE wurde durch neue Anwendungen im Bereich der monotonen Mehrgitter-Methoden für nichtlineare Variationsungleichungen in einer Zusammenarbeit mit R. Kornhuber validiert. Die Kooperation mit dem WIAS (J. Fuhrmann, H. Langmach) führte zur Übernahme des dort entwickelten OpenGL-Graphikmoduls (3D).

Im Projekt *Parallelisierung von KASKADE* wurde ein paralleler Prototyp des am ZIB entwickelten CCG-Algorithmus entworfen. Die Parallelisierung basiert auf einer nicht überlappenden Gebietszerlegung des adaptiv verfeinerten Gitters und der sich daraus ergebenden Verteilung der relevanten Daten. Dabei sind in den einzelnen Programmkomponenten zwei verschiedene Typen von Datenstrukturen für die Realisierung des Gitters (Dreiecke etc.) und die auftretenden linearen Gleichungssysteme (Matrizen, Vektoren) zu berücksichtigen, die unterschiedliche Kommunikationsstrukturen erfordern. Zunächst wurde die Parallelisierung auf der Grundlage einfacher geometrischer Gebietszerlegungen durchgeführt.

1. R. Beck, B. Erdmann, R. Roitzsch: *KASKADE 3.x – ein objektorientierter adaptiver Finite-Element-Code*. In W. Mackens, S. Rump (eds.), *Software Engineering im Scientific Computing*. Vieweg, 38–44 (1996)
2. R. Ehrig, U. Nowak, P. Deuffhard: *Highly scalable parallel linearly-implicit extrapolation algorithms*. ZIB Technical Report, TR 96–11
3. J. Fröhlich, J. Lang: *Twodimensional Cascadic Finite Element Computations of Combustion Problems*. ZIB Preprint, SC 96–5, submitted to *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*
4. J. Fröhlich, J. Lang, R. Roitzsch: *Selfadaptive Finite Element Computations with Smooth Time Controller and Anisotropic Refinement*. In: J.-A. Désideri, P. Le Tallec, E. Oñate, J. Périaux, E. Stein (eds.), *Proceedings of the Second ECCOMAS Conference on Numerical Methods in Engineering*, 523–527 (1996)
5. J. Lang: *High-Resolution Self-Adaptive Computations on Chemical Reaction-Diffusion Problems with Internal Boundaries*. *Chem. Engrg. Sci.* 51 (1996) 1055–1070
6. J. Lang: *Adaptive FEM for Reaction-Diffusion Equations*. SC 96–28, submitted to *Appl. Numer. Math.*
7. U. Nowak: *A Fully Adaptive MOL-Treatment of Parabolic 1-D Problems with Extrapolation Techniques*. *Applied Numerical Mathematics* **20**, 129–145 (1996)
8. U. Nowak, U. Pöhle, R. Roitzsch: *Eine graphische Oberfläche für numerische Programme*. In W. Mackens, S. Rump (eds.), *Software Engineering im Scientific Computing*. Vieweg, 265–278 (1996)
9. U. Nowak, U. Pöhle, R. Roitzsch: *Eine graphische Oberfläche für numerische Programme*. ZIB Technical Report, TR 96–10
10. U. Nowak, U. Pöhle, R. Roitzsch, B. Sucrow: *Formale Spezifikation des ZIB-GUI mit Hilfe von Graph-Grammatiken*. In: W. Mackens, S. Rump (eds.), *Software Engineering im Scientific Computing*. Vieweg, 290–296 (1996)

2.2.3 Chemische Verfahrenstechnik

Im Rahmen dieses Schwerpunktes wird typischerweise die im Schwerpunkt "Wissenschaftliche Software" entwickelte numerische Software zur Lösung technologisch relevanter Prozesse aus dem Bereich der chemischen Verfahrenstechnik eingesetzt. Häufig besitzen die interessantesten, schwierigen Anwendungsprobleme besondere Eigenschaften, die eine Simulation mit einem Standardverfahren nicht unmittelbar zulassen oder zu einem nicht effizienten Einsatz der Verfahren führen. Es sind geeignete Modifikationen und Erweiterungen zu entwickeln, um den Anforderungen aus der Praxis gerecht zu werden. Als Ausgangspunkt dient dabei meist eines der Standardverfahren KARDOS-1D/2D, PDEX1M, LIMEX oder NLEQ1. Treten bei der Simulation besondere Schwierigkeiten auf, so kann dies auch Anlaß zur Entwicklung völlig neuer Algorithmen sein. Ein weiterer Aspekt der Arbeit ist die Unterstützung der Anwender bei einer geeigneten Modellierung der zu simulierenden Phänomene.

Chemische Verbrennung

Bearbeitet von: P. Deuffhard, J. Fröhlich, J. Heroth, J. Lang, U. Maas, U. Nowak

Kooperationspartner: D. Schmidt, U. Maas (ab 1.11.96 – Institut für Technische Verbrennung, Universität Stuttgart), J. Fröhlich (ab 1.5.96 – Institut für Hydrodynamik, Universität Karlsruhe), H. Niemann, D. Schmidt (Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen, Universität Heidelberg)

Förderung: DFG-SPP „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“

Die mathematische Modellierung von Verbrennungsprozessen gewinnt auch in industriellen Anwendungen immer mehr an Bedeutung. Beispiele sind die Simulation von chemischen Reaktionen in der Atmosphäre, von verfahrenstechnischen Prozessen und Verbrennungsprozessen. Die immer detaillierteren Modelle der chemischen Kinetik führen dazu, daß z.B. bei der mathematischen Modellierung von Verbrennungsprozessen mehr als 100 partielle Differentialgleichungen (entsprechend mehr als 100 chemischen Spezies im Reaktionssystem) gelöst werden müssen. Dies ist selbst bei räumlich eindimensionalen Systemen nur unter Verwendung effizienter, adaptiver numerischer Verfahren möglich, da sowohl die Orts- als auch Zeitskalen mehrere Größenordnungen umfassen. Erschwerend kommt hinzu, daß oft, wie z.B. bei der katalytischen Verbrennung oder bei der Verbrennung von Tröpfchen, Randschichten an den Phasengrenzen aufgelöst werden müssen.

Auf der Basis einer in Raum und Zeit adaptiven Linienmethode, Programmpaket PDEX1M [10], wurde ein Verfahren zur Simulation eindimensionaler, instationärer Verbrennungsprozesse entwickelt [8]. Durch eine geeignete Diskretisierung der komplexen Modellgleichungen konnten die vorhandenen algorithmi-

schen Konzepte zur numerischen Integration beibehalten werden, d.h. das Verfahren bestimmt simultan und automatisch geeignete Orts- und Zeitschrittweiten. Kontroll- und Steuerprinzip ist dabei Extrapolation in Ort und Zeit. Erste Ergebnisse zeigen die Zuverlässigkeit des Gesamtverfahrens. Berechnet wurden unter anderem Zündprozesse, wie sie z.B. für das Verständnis des Zündvorgangs in Otto-Motoren wichtig sind.

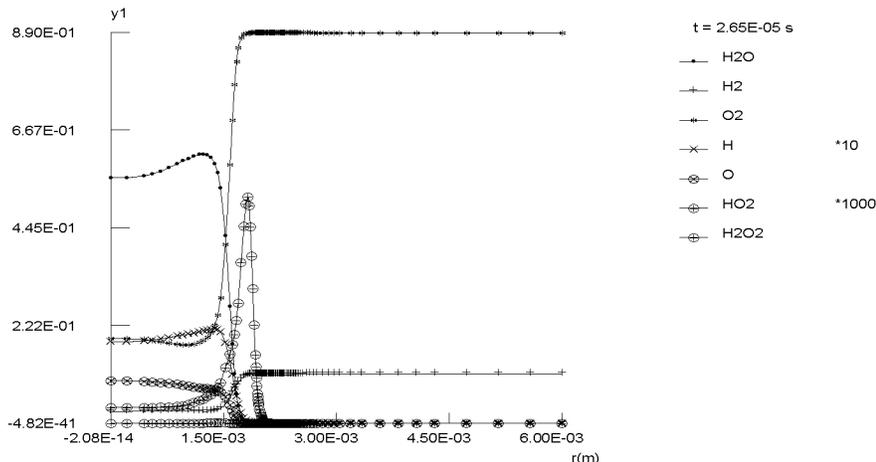


Abbildung 1: Massenbruchprofile während der Zündung eines Knallgasgemisches (Programmpaket PDEX1)

Die weiteren Arbeiten werden sich auf die Implementierung geeigneter Randbedingungen zur Beschreibung katalytischer Verbrennungsprozesse konzentrieren. Darüberhinaus sollen mit einer parallelen Version des Programms Systeme mit ca. 100 Spezies durchgerechnet werden.

Für den räumlich mehrdimensionalen Fall stellt sich die Frage nach der Auflösung komplizierter Geometrien als zusätzliche Schwierigkeit. Die erhöhte Komplexität der Ortsadaptivität wird zur großen Herausforderung für jedes Verfahren. Für diese Probleme bietet ein auf Finite Elemente basierendes Verfahren einen natürlichen Vorteil [3]. In einem ersten Schritt wurde ein adaptives Rothe-Verfahren, implementiert in KARDOS-2D, zur Simulation von Reaktions-Diffusions Gleichungen in zwei Raumdimensionen so modifiziert, daß sich Verbrennungsprozesse sowohl für gasförmige als auch für feste Stoffe effektiv simulieren lassen [5]. Insbesondere führen verminderte Diffusionseinflüsse, wie sie für Feststoffreaktionen typisch sind, zu sehr steilen Flammenfronten (siehe Abb. 2). Neben einer zuverlässigen und robusten Fehlersteuerung erwies sich ein tieferes Verständnis für die physikalischen Prozesse als unabdingbar. In einem zweiten Schritt wurde das Programmpaket KARDOS-2D mit geeigneten Schnittstellen versehen, die es erlauben, auch detaillierte chemische Reaktionsmodelle anzubinden. Erste Berechnungen für einen chemischen Reaktor werden dahingehend erweitert, daß Strömungsvorgänge sowie wandernde Ränder simuliert werden können.

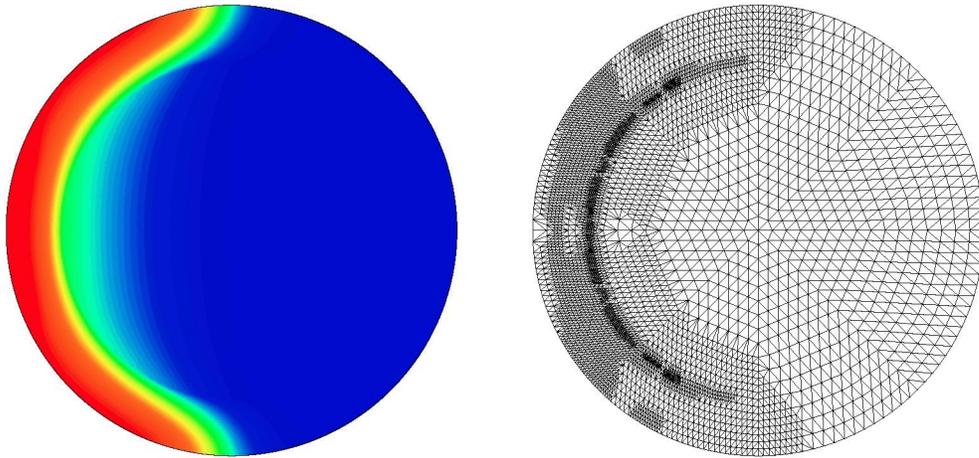


Abbildung 2: Lösung und Gitter für eine Flammenfront im Feststoff (Programmpaket KARDOS2)

Während im räumlich eindimensionalen Fall mit adaptiven Methoden und Ausnutzen spezieller Hardwaregegebenheiten die Simulation auch sehr großer Systeme möglich ist, bedarf es im mehrdimensionalen Fall neuer Lösungsansätze.

Da die chemischen Zeitskalen mehrere Größenordnungen überdecken, die physikalischen Transportprozesse hingegen nur einen vergleichsweise kleinen Bereich, können die schnellsten chemischen Prozesse entkoppelt werden. Durch Projektion der Gleichungen auf die langsamen Mannigfaltigkeiten erhält man eine erhebliche Dimensionsreduktion.

Vor der numerischen Simulation der Transport-Reaktions-Gleichungen werden die Mannigfaltigkeiten berechnet und tabelliert. Bei der Berechnung der Mannigfaltigkeiten kann der Approximationsfehler mit einem einfachen Kriterium geschätzt werden [1], das zumindest angibt, ob homogene chemische Systeme im Rahmen der vorgegebenen Genauigkeit noch richtig modelliert werden. Ein Modul für die effiziente Speicherung der Tabellen wird derzeit auf der Basis von dünnen Gittern realisiert und soll Tabellen bis Dimension 6 ermöglichen [2]. Diese Dimension wird für die Simulation der Verbrennung von Diesel-Kraftstoff veranschlagt [9]. Die weitere Arbeit konzentriert sich auf die Entwicklung eines Fehlermonitors, der die Kopplung der Transportprozesse und der chemischen Reaktion erfaßt. Ein Beispiel für die Mannigfaltigkeit eines stöchiometrischen Synthesegas-Luft-Systems ist in Abbildung 3 dargestellt.

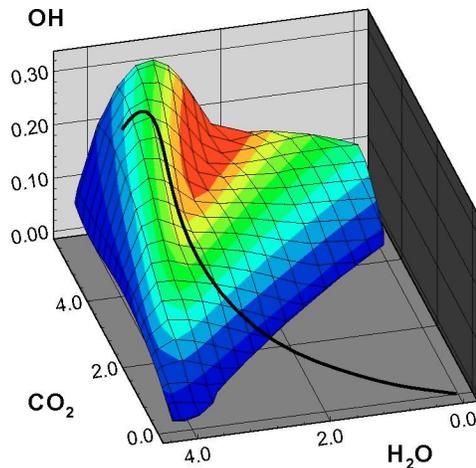


Abbildung 3: Intrinsische niedrigdimensionale Mannigfaltigkeit eines stöchiometrischen Synthesegas-Luft-Systems; Kurve: Typische Trajektorie einer laminaren Flamme im Zustandsraum [12].

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Bearbeitet von: R. Ehrig, J. Lang, U. Nowak, L. Oeverdieck, P. Deuffhard

Förderung: Volkswagenstiftung: Simulation von Aerosol-Bildung

Kooperationspartner: J. Frauhammer, G. Eigenberger (Institut für Chemische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart), J. Körber, K. Schaber (Institut für Technische Thermodynamik und Kältetechnik, Universität Karlsruhe), H. Klein (Linde AG), U. Nicken (BASF), W. Marquardt, J. Blum (RWTH Aachen), K.-H. Hoffmann, W. Merz (TU München), W. Ruppelt, R. Schuch (BASF)

Die Kooperation mit dem Institut für Chemische Verfahrenstechnik der Universität Stuttgart bei der Pflege und Weiterentwicklung des Programmpaketes PDEXPACK [11] wurde kontinuierlich fortgesetzt. Erfolgreich wurde die Moving-Grid-Variante des Löser PDEX1M [10] erweitert und an eine vorhandene Problemstellung angepaßt. Die Simulationsrechnungen in den untersuchten Kondensations- und Verdampfungsprozessen konnten mit dieser speziellen Moving-Grid-Technik bis zu einem Faktor 40 beschleunigt werden [4], im Vergleich zu einer bereits adaptiven aber statischen Gittersteuerung.

In Zusammenarbeit mit der RWTH Aachen wird der 2D-Code bei der Modellierung und Simulation für Entwurf, Regelung und Auswertung von Experimenten zum transienten Sieden verwendet. Numerische Berechnungen für ein Phosphor-Diffusionsmodell in Silikon wurden an der TU München durchgeführt. Eine gemeinsame Arbeit ist in Vorbereitung [7]. Eine kontinuierliche Betreuung bei der Erschließung von neuen Problemklassen wird für Mitarbeiter der BASF gewährleistet, die KARDOS vorwiegend für 1D-Probleme benutzen.

In der Kooperation mit dem Institut für Thermodynamik und Kältetechnik der

Universität Karlsruhe wird an der Erstellung eines Programmpaketes (SENECA) zur Simulation des Aerosolwachstums bei Absorptions- und Kondensationsprozessen gearbeitet. In SENECA sind Varianten der CodeLib-Programme NLEQ1 und LIMEX enthalten. Da beim Verschalten von Anlagen sehr große Jacobi-Matrizen mit spezieller Blockbandstruktur auftreten, wurde ein daraufhin zugeschnittener linearer Gleichungslöser entwickelt und implementiert. Daneben wurden die am ZIB entwickelten allgemeinen Sparsing-Techniken übertragen und getestet. Unter Verwendung eines physikalisch motivierten Sparsing-Kriteriums, ergeben sich teilweise deutliche Beschleunigungen in den Rechnungen. Geplante Detaillierungen in der Modellierung und das Ziel, noch komplexere Anlagen zu simulieren, machen eine Parallelisierung des Programms sinnvoll. Die im Rahmen des Projektes "Parallelisierung von Extrapolationsverfahren" geleisteten Arbeiten gingen unmittelbar in die Parallelisierung von SENECA ein. Es waren jedoch noch umfangreiche Umstrukturierungen im Bereich der Modellauswertung vorzunehmen, um eine parallelisierbare Implementierung zu erhalten. Die Arbeiten stehen kurz vor ihrem Abschluß.

1. P. Deuffhard, J. Heroth: *Dynamic Dimension Reduction in ODE Models*. In: F. Keil, W. Mackens, H. Voß, J. Werther (Hrsg.), *Scientific Computing in Chemical Engineering*, Springer-Verlag, 29-43 (1996)
2. P. Deuffhard, J. Heroth, U. Maas: *Towards Dynamic Dimension Reduction in Reactive Flow Problems*. Proc. 3rd Workshop on Modelling of Chemical Reaction Systems, Heidelberg 1996, im Druck
3. P. Deuffhard, J. Lang, U. Nowak: *Adaptive Algorithms in Dynamical Process Simulation*. in: H. Neunzert (ed.), *Progress in Industrial Mathematics at ECMI 94* (Wiley-Teubner), 122-137 (1996)
4. J. Frauhammer, H. Klein, G. Eigenberger, U. Nowak: *Solution of a moving boundary problem using an adaptive grid method - Rotary heat exchangers with condensation and evaporation and examples*. ZIB Preprint, SC 96-57
5. J. Fröhlich, J. Lang: *Twodimensional Cascadic Finite Element Computations of Combustion Problems*. ZIB Preprint, SC 96-5, submitted to *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*
6. J. Lang: *Numerical Solution of Reaction-Diffusion Equations*. in: F. Keil, W. Mackens, H. Voss, J. Werther (eds.), *Scientific Computing in Chemical Engineering*, 136-141 (1996)
7. J. Lang, W. Merz: *Numerical Simulation of Single Species Dopant Diffusion in Silicon under Extrinsic Conditions*. In Vorbereitung
8. U. Maas, U. Nowak: *An adaptive method of lines for the simulation of complex laminar combustion processes*. ZIB Preprint, SC 96-56

9. H. Niemann, D. Schmidt, U. Maas: *An Efficient Storage Scheme for Reduced Chemical Kinetics Based on Orthogonal Polynomials*. ZIB Preprint, SC 96-18
10. U. Nowak: *PDEX1M - A Software Package for the Numerical Simulation of Parabolic Systems in One Space Dimension*. In F. Keil, W. Mackens, H. Voß, J. Werther (eds.): *Scientific Computing in Chemical Engineering*, 163-169 (1996)
11. U. Nowak, J. Frauhammer, U. Nieken: *A Fully Adaptive Algorithm for Parabolic Partial Differential Equations in One Space Dimension*. *Comput.Chem.Eng.* **20(5)**, 547-561 (1996)
12. D. Schmidt, U. Maas: *Analysis of the Intrinsic Low-Dimensional Manifolds of Strained and Unstrained Flames*. Proc. 3rd Workshop on Modelling of Chemical Reaction Systems, Heidelberg 1996, im Druck

2.2.4 Hochfrequente Elektrotechnik/Integrierte Optik

In diesem Schwerpunkt werden analytische, algorithmische und anwendungsorientierte Problemstellungen untersucht, die sich aus der numerischen Lösung der Maxwell'schen Gleichungen ergeben. Die in den Anwendungsprojekten auftretenden typischen Frequenzen reichen hier von einigen Dutzend Megahertz (Hyperthermie-Projekt) bis hin zum Terahertz-Bereich (Infrarot-Bereich des Lichts, Integrierte Optik).

Adaptive Multilevel-Verfahren für Whitney-Basen

Bearbeitet von: R. Beck, P. Deuffhard, M. Schemann, A. Walsleben

Förderung: DFG, SFB 273 "Hyperthermie: Methodik und Klinik"

Kooperationspartner: Dr. A. Maurer, P. Turban, (Siemens AG, Zentralabteilung Forschung und Entwicklung, Erlangen), R. Hiptmair, Universität Augsburg

Whitney-Basen, im Finite-Elemente-Kontext manchmal auch Kantenelemente genannt, haben sich in den letzten Jahren als wichtiges Werkzeug zur Berechnung von Feldern im Bereich der Elektrodynamik etabliert. Ihre Stärken liegen in der physikalisch korrekten Modellierung von Übergangsbedingungen in inhomogenen Medien und an nicht-glatten metallischen Berandungen (Ecken und Kanten). In der Mathematik werden die von solchen Basen erzeugten Finite-Elemente-Räume als $H(\text{rot})$ -konform bezeichnet.

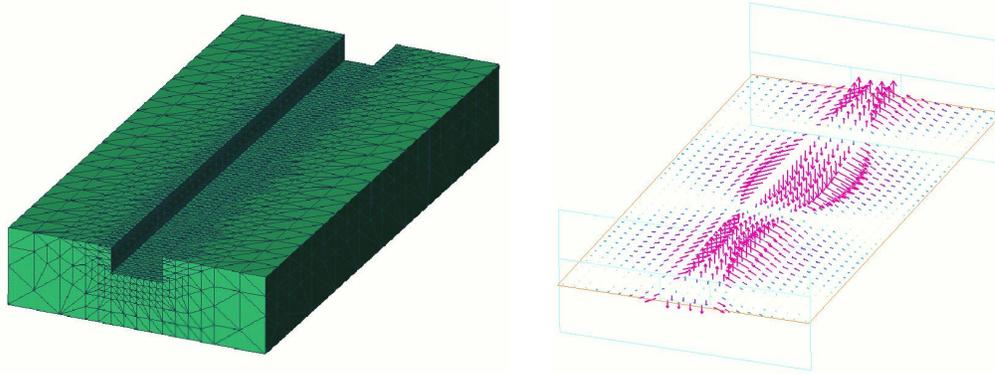
Der Rotationsoperator besitzt im Kontinuum einen unendlich entarteten Nullraum, der sich ins Diskrete signifikant vererbt. Ist man an der Berechnung reiner Wirbelfelder interessiert, dann müssen diese divergenzbehafteten Moden aus der Lösung eliminiert werden. Insbesondere führen sie zu einer Ineffizienz von Multilevel-Algorithmen bei zunehmender Verfeinerungstiefe des Finite-Elemente-Gitters.

Für die Berechnung *statischer* Magnetfelder mittels eines Vektorpotentials wurde von R. Hiptmair ein Multilevel-Löser entwickelt, der unabhängig von der Verfeinerungstiefe eine konstante Konvergenzrate besitzt. Er beruht auf einer geschichteten Multigrid-Iteration, bei der eine Coulomb-Eichung des Potentials vorgenommen wird. Im Fall *dynamischer* Felder sind die Verhältnisse komplexer. Die Funktionale enthalten einen zusätzlichen Term, der zu negativen Eigenwerten in den entsprechenden Matrizen führt; sie definieren damit keine Energie-Norm bzw. -Seminorm. Trotzdem gelang es durch eine geeignete Modifikation der Multilevel-Algorithmen, auch für solche Fälle Mehrgitter-Löser mit optimaler Konvergenz zu formulieren. Zusammen mit einem Schätzer für den lokalen Diskretisierungsfehler der Felder steht damit ein effizienter adaptiver Code für Feldberechnungen im Frequenzraum zur Verfügung.

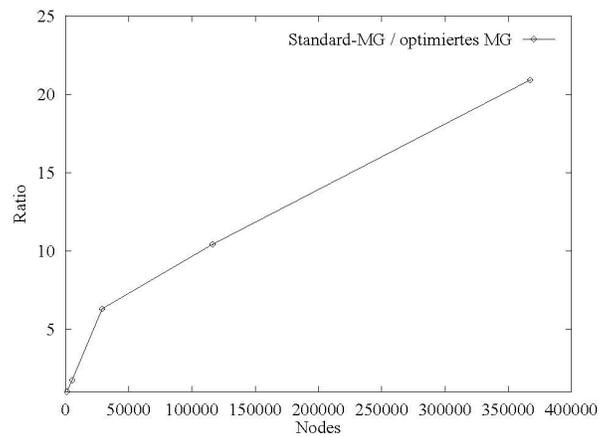
Praktische Anwendung finden die genannten Algorithmen bei der Berechnung von Streuphänomenen im Frequenzraum: sie dienen der Charakterisierung von

passiven Bauelementen in der Mikroelektronik (Kooperation mit Siemens). Hier konnten die Rechenzeiten um mehr als eine Größenordnung verkürzt werden (siehe die folgenden Abbildungen).

Ein weiterer Einsatzbereich sind Feldberechnungen im Projekt „Hyperthermie“ des Sonderforschungsbereichs 273 der DFG (s. Medizinische Therapie-Planung).



Ausschnitt aus dem adaptiv verfeinerten Finite-Elemente-Gitter einer Streifenleitung (links) und elektrisches Feld in einer Schnittebene unterhalb des Leiters.



Verhältnis der CPU-Zeiten für Standard-Mehrgitter und optimierten MG-Algorithmus bei fortschreitender Verfeinerungstiefe.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Kooperationspartner: R. März, Siemens AG München, ZFE, H.-P. Nolting, Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik, D. Yevick, Queen's University Kingston, Kanada

Zeitabhängige Maxwellgleichungen. (M. Schemann)

Diese Arbeit ist eine Fortsetzung und zugleich wesentliche Erweiterung der Arbeiten [4] zur adaptiven Behandlung der 2D-Wellengleichung basierend auf der Rothe-Methode (s. auch Abschnitt „Adaptive Multilevel-Methoden“). Es ist das Ziel, einen in Raum und Zeit adaptiven Algorithmus zur Berechnung elektromagnetischer Felder in Gebieten mit inhomogenen Materialien zu entwickeln. Die gegenwärtigen Arbeiten konzentrieren sich auf eine geeignete Formulierung der Maxwell'schen Gleichungen als Anfangswertproblem in einem problemangepassten Funktionenraum.

Eigenlösungen. (T. Friese, F. Schmidt)

Zielstellung des vom BMBF geförderten Projekts ist die Erarbeitung eines Mehrgitter-basierten Verfahrens zur Lösung des Eigenwertproblems der Helmholtzgleichung in zwei Dimensionen. Im Berichtszeitraum erfolgte der Übergang von den selbstadjungierten zu den allgemeineren nicht-selbstadjungierten Problemen. Damit ist es möglich, die Eigenmoden von gedämpfte Wellenleitern oder auch Lasern zu berechnen (s. auch Abschnitt „Adaptive Multilevel-Methoden“).

Randbedingungen. (F. Schmidt)

Für die Berechnung der Strahlausbreitung in der Integrierten Optik ist es wichtig, geeignete Randbedingungen zu verwenden. Diese Randbedingungen sollen das möglichst reflexionsfreie Passieren von Strahlen durch die Berandung des Simulationsgebietes garantieren. Die in einem Vorgängerprojekt konstruierten diskreten transparenten Randbedingungen für die Schrödingergleichung konnten für den Spezialfall zeituniformer Einschnitt-Diskretisierungen durch Verwendung des Operatorenkalküls von Mikusinski erheblich vereinfacht werden. Eine Erweiterung auf nichtuniforme Zeitschritte ist möglich.

Publikationen

1. R. Beck, R. Hiptmair: Multilevel solution of the time-harmonic Maxwell's equations based on edge elements. ZIB Preprint, SC 96-51
2. P. Deuffhard, T. Friese, F. Schmidt, R. März, H.-P. Nolting: Effiziente Eigenmodenberechnung für den Entwurf integriert-optischer Chips. In K. H. Hoffmann, W. Jäger, Th. Lohmann, and H. Schunck, editors, *Mathematik-Schlüsseltechnologie für die Zukunft*, pages 267-279. Springer Verlag (1996)

3. T. Friese: Eine nichtlineare Mehrgitter-Methode für das Eigenwertproblem linearer, nicht-selbstadjungierter Operatoren. Vorarbeiten zur Dissertation, voraussichtlicher Abschluß: Frühjahr 1997
4. M. Schemann, F.A. Borneman: Adaptive Rothe's method for the wave equation. ZIB Preprint, SC 96-39
5. F. Schmidt, R. März: On the reference wave vector of paraxial Helmholtz equations. *IEEE Journal of Lightwave Technology*, **14**, 2395-2400 (1996)
6. F. Schmidt, D. Yevick: Discrete transparent boundary conditions for Schrödinger-type equations. ZIB Preprint, SC 96-17
7. A. Walsleben: Whitney-Elemente zur Diskretisierung der Maxwellgleichungen in inhomogenen Medien. *Diplomarbeit*, Freie Universität Berlin, Fachbereich für Mathematik und Informatik (1996)

2.2.5 Computergestützte Analyse dynamischer Systeme

Im engeren Gebiet der dynamischen Systeme entstehen Algorithmen, die häufig nur für relativ kleine Modellprobleme taugen. Ziel dieses Projektes ist jedoch die Entwicklung von Algorithmen für realistische dynamische Systeme auf der Basis neuer Theorien. Zentrale Begriffe sind Wahrscheinlichkeit (Langzeitmittel), und Symmetrie. Die Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf einem Attraktor führt zur Konstruktion von Algorithmen für mengenwertige Abbildungen. Symmetrie führt zur Computeralgebra im Gebiet der dynamischen Systeme, insbesondere im Zusammenhang mit Studien in der symmetrischen Verzweigungstheorie.

Numerische Approximation der wesentlichen Dynamik

Bearbeitet von: M. Dellnitz (ZIB-Fellow, z. Zt. Bayreuth), O. Junge

Förderung: DFG SPP *Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme*

Viele dynamische Systeme weisen ein kompliziertes Langzeitverhalten auf. Ein solches Verhalten ist u.a. dadurch charakterisiert, daß zwei verschiedene Trajektorien – auch wenn deren Anfangswerte nahe beieinander liegen – bereits nach sehr kurzer Zeit ein völlig unterschiedliches Verhalten aufweisen. Nicht nur im Langzeitverhalten ergeben sich komplizierte Strukturen, sondern bei numerischen Rechnungen tritt schon in relativ kleinen Zeiträumen “numerisches Chaos” auf. Andererseits sind für “viele” Trajektorien die durch sie erzeugten *zeitlichen Mittel* identisch, und dementsprechend gibt es ergodentheoretische Größen, deren Kenntnis statistische Aussagen über die Langzeitdynamik gestatten. Im Rahmen unseres Projekts werden Verfahren entwickelt, die eine effiziente numerische Approximation dieser Größen ermöglichen [1,2].

Der den Verfahren zugrundeliegende Gedanke ist es, die komplizierte Dynamik zunächst in Form der Berechnung einer zugehörigen *invarianten Menge* zu lokalisieren und im Anschluß anhand der Approximation eines *invarianten Maßes* zu beschreiben. Der erste Schritt, die Lokalisierung, wird durch kürzlich entwickelte Unterteilungsalgorithmen realisiert, die eine Boxüberdeckung der invarianten Menge generieren. Im zweiten Schritt wird der *Frobenius-Perron Operator* diskretisiert (Galerkin Methode): der Fixpunkt des diskretisierten Operators ist eine Approximation des natürlichen invarianten Maßes. Für eine Klasse von Problemen ist es gelungen, auch theoretisch die Konvergenz dieses Verfahrens gegen sogenannte *SBR-Maße* nachzuweisen.

Über die Berechnung invarianter Maße hinaus wurden die Methoden dahingehend weiterentwickelt, daß auch die Identifikation *fast-invarianten* Verhaltens ermöglicht wird. Konkret können Bereiche im Phasenraum identifiziert werden, in denen Trajektorien durchschnittlich lange verweilen, bevor sie in andere Berei-

che entweichen. Zudem kann die mittlere Aufenthaltsdauer mit dem Spektrum des Frobenius-Perron Operators in Verbindung gebracht werden. Schließlich haben wir durch eine Verzahnung der Maßberechnung mit den Unterteilungsalgorithmen ein adaptives Verfahren zur Boxverfeinerung entwickelt, das den numerischen Aufwand in vielen Fällen um mehrere Größenordnungen reduziert. Insgesamt erlauben somit die entworfenen Algorithmen, das *wesentliche dynamische Verhalten* zu extrahieren. Diese Ideen werden auf Hamiltonsche Systeme erweitert (siehe Projekt “Direkte Berechnung statistischer Mittel” im Schwerpunkt Moleküldynamik).

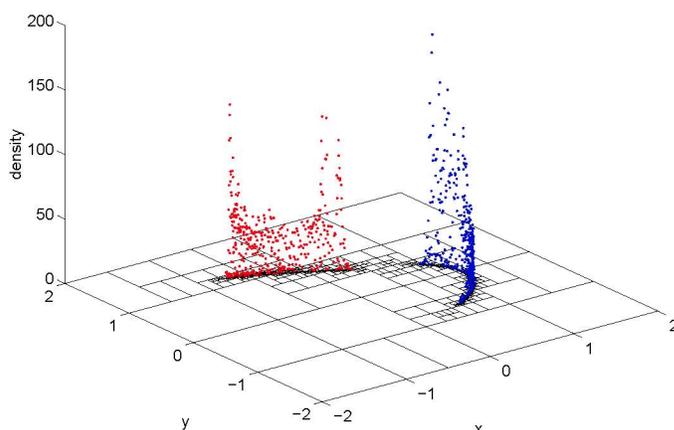


Illustration des (natürlichen) invarianten Maßes für die Hénon Abbildung. Das Bild zeigt die Dichte des approximierenden diskreten Maßes auf einer adaptiven Boxüberdeckung.

Computeralgebra in dynamischen Systemen

Bearbeitet von: K. Gatermann (FUB und ZIB)

Kooperationspartner: F. Guyard (Nizza, Frankreich), R. Lauterbach (WIAS Berlin), I. Hoveijn (Groningen, Niederlande)

In den letzten Jahren wurden dynamische Systeme insbesondere unter dem Gesichtspunkt der Symmetrie untersucht. Bei der theoretischen Behandlung dieser äquivarianten dynamischen Systeme ergeben sich Fragen, die nur mittels Computeralgebra bearbeitet und damit gelöst werden können. Zu dieser Gruppe von Fragen gehört z.B. wie ein generisches äquivariantes Vektorfeld aussieht, bzw. eine eindeutige Darstellung gewährleistet werden kann, d.h. die Verzweigungsgleichungen werden ausgerechnet. Für diesen Themenkreis wurde ein Maple-Paket [8] entwickelt, das Rechnungen für endliche Gruppen [3] und kontinuierliche Gruppen [4] wie $O(3)$ durchführen kann. Der Teil über die kontinuierlichen Gruppen wurde in Zusammenarbeit mit F. Guyard entwickelt. Dieses Paket ist ein weiterer Schritt zur Elimination der Handrechnungen, wie sie in der Analysis immer

noch üblich sind. Tabelle 1 zeigt an einem Beispiel, daß diese Algorithmen sehr rechenzeitintensiv sein können.

Grundlage dieser symbolischen Rechnungen sind die Gröbner-Basen, spezielle Ideal-Basen, die eindeutige Rechnungen im Restklassenring erlauben. Leider ist das existierende Gröbner-Basen-Paket in Maple so schlecht, daß eine Neuimplementation [7] mit wesentlichen Erweiterungen vorgenommen werden mußte. Dabei wurde die neue Idee des Hilbert-Reihen getriebenen Buchberger-Algorithmus (Gianni, Mora, Robbiano, Traverso 1996) aufgegriffen und verallgemeinert. Damit enthält dieses Paket mehr Möglichkeiten als vergleichbare Pakete in general-purpose Systemen. An weiteren mathematischen Verbesserungen des Buchberger-Algorithmus wird gearbeitet.

Ein weiterer Themenkreis in der Theorie der äquivarianten dynamischen Systeme betrifft die Ausreduktion der Symmetrie mittels Reduktion auf den Orbitraum. Das ist eine Verwandte einer Methode, die bei Hamilton'schen Systemen als Untersuchung im reduzierten Phasenraum bekannt ist. Die auftretenden Varietäten werden erst durch gezielte Verwendung der Computeralgebra einer genaueren Analyse zugänglich. Bei den Hamilton'schen Systemen werden Normalformen für Resonanzen betrachtet und die Struktur des Orbitraumes, der hier eine torische Varietät ist, untersucht. Dies geschieht in Kooperation mit I. Hoveijn.

Erfahrungen aus dieser Arbeit flossen in die Lehre in zwei Vorlesungen mit Titel *Algorithmen der Computeralgebra* und *Symmetrische Verzweigungstheorie* an der FUB ein.

Grad	Invariante		Äquivariante	
	cpu	vollständig bis	cpu	vollständig bis
5	9 sec	5	18 min	5
6	20 sec	6	53 min	6
7	28 sec	7	2.0 h	8
8	47 sec	∞	4.6 h	10
11			21.9 h	∞
∞	265 sec	∞		

Tabelle 1: Rechenzeiten für den Beweis der vollständigen Erzeugung des Invariantenringes und des Moduls der Äquivarianten für $SO(2) \times S^1$. Es wurden dafür die von Ch. Leis vorgeschlagenen 5 Invarianten und 10 Äquivarianten benutzt. Die leichtere Frage der Vollständigkeit bis zu einem gewissen Grad kann durch Restriktion in der Berechnung der Gröbner-Basis bearbeitet werden, ergibt aber oft Antworten für einen etwas höheren Grad.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Explizite, symplektische Diskretisierungen. (S. Reich, Ch. Schütte, F. Bornemann, P. Nettesheim, F. Schmidt)

Die Bewegungsgleichungen für Systeme starrer Körper mit konservativem Kraftfeld besitzen eine reiche geometrische Struktur. Effiziente Diskretisierungen sollten die symplektische Struktur des Phasenraumes als auch Symmetrien der Hamiltonfunktion erhalten. Es wurden Integratoren [5] konstruiert, die die Beschreibung starrer Körper durch Hamiltonsche Bewegungsgleichungen mit holonomen Zwangsbedingungen ausnutzen. Allerdings führen diese Algorithmen auf nichtlineare Gleichungssysteme. Dagegen nutzen explizite Integratoren [6] die spezielle Struktur der Bewegungsgleichungen starrer Körper aus. Diese Algorithmen lösen insbesondere in der Moleküldynamik (siehe Schwerpunkt Moleküldynamik) weniger effiziente Algorithmen wie SHAKE ab. Ein weiteres Anwendungsgebiet symplektischer Diskretisierungen stellt die quanten-klassische Moleküldynamik (QCMD) dar. Die Kopplung quantenmechanischer und klassischer Freiheitsgrade als Approximation der reinen Quantenmechanik wurde mathematisch voll gerechtfertigt. Damit konnte die kanonische Form der QCMD-Bewegungsgleichungen nachgewiesen werden. Darauf basierend wurde ein expliziter und symplektischer Algorithmus (PICKABACK) erarbeitet.

Homogenisierung. (F. Bornemann, Ch. Schütte)

Im Projekt "Homogenisierung schneller Freiheitsgrade" (siehe Schwerpunkt "Moleküldynamik") tauchen im Grenzprozeß der Homogenisierung Probleme mit gewissen *Resonanzen* der schnelleren Freiheitsgrade auf, die das sogenannte "Takens-Chaos" induzieren können. Bei der Identifizierung und Analyse dieser Resonanzen spielen Symmetrien der Dynamik eine wesentliche Rolle. Daher wird die Anwendung der oben skizzierten Methoden auf diese Zusammenhänge studiert.

1. M. Dellnitz, O. Junge: *On the approximation of complicated dynamical behavior*. Eingereicht beim *SIAM Journal of Numerical Analysis*. ZIB Preprint, SC 96-35
2. M. Dellnitz, O. Junge: *Adaptive box refinement in subdivision techniques for the approximation of dynamical behavior*. Eingereicht bei *Computing and Visualization in Science*. ZIB Preprint, SC 96-36,
3. K. Gatermann: *Semi-invariants, equivariants and algorithms*. *Applicable Algebra in Engineering, Communication and Computing* 7, 105-124 (1996)
4. K. Gatermann, F. Guyard: *Gröbner bases, invariant theory and equivariant dynamics*. ZIB Preprint, SC 96-37
5. S. Reich: *Symplectic integration of constrained Hamiltonian systems by composition methods*. *SIAM J. Numer. Anal.* **33**, 475-491 (1996)

6. S. Reich: *Symplectic integration of conservative multibody systems*. Fields Institute Communications **10**, 181–191 (1996)

Software:

7. K. Gatermann, *moregroebner version 2.0*. Maple Paket zur Berechnung von Gröbner-Basen, erhältlich unter <http://www.zib.de/gatermann/moregroebner.html>.
8. K. Gatermann, F. Guyard, *symmetry version 1.0*. Maple Paket für Berechnungen in der äquivarianten Dynamik, erhältlich unter <http://www.zib.de/gatermann/symmetry.html>.

2.2.6 Moleküldynamik

Der Projektschwerpunkt hat die Entwicklung neuer Modelle und Algorithmen zur Beschreibung der Dynamik molekularer Systeme zum Ziel, wobei wir hauptsächlich **Molekülcluster** und **biomolekulare Systeme** ins Auge gefaßt haben. Die Dynamik solcher Systeme findet typischerweise auf sehr vielen verschiedene Zeitskalen statt, die nichtlinear und nichtdissipativ gekoppelt sind. In den meisten Fällen ist man zur Berechnung der chemisch relevanten Information jedoch an einer Auflösung der Bewegung auf den schnellsten Zeitskalen gar nicht interessiert, sondern nur an statistischen Eigenschaften der Dynamik über sehr lange Zeiten (Zeitmittelwerte, seltene globale Konformationsänderungen). Die Langzeit-Simulation solcher Systeme ist aber durch die schnellen Zeitskalen extrem rechenintensiv und — wegen der unvermeidbaren Fehlerverstärkung — ein schlecht gestelltes Problem (numerisches Chaos). Um in dieser Situation einen wirklichen Fortschritt zu erzielen, setzt sich die Arbeitsgruppe das Ziel, völlig neue Algorithmen und Modelle zu entwerfen.

Homogenisierung schneller Freiheitsgrade

Bearbeitet von: F. Bornemann, Ch. Schütte, S. Reich

Kooperationspartner: AG Manz, Theoretische Chemie, FU Berlin

Grundlage des Projektes ist die Frage: Wie kann man direkt Bewegungsgleichungen herleiten, die die schnellsten Freiheitsgrade nicht mehr enthalten? Die schnellsten Zeitskalen der Dynamik rühren immer von relativ großen oder kleinen Parameterwerten in den Modellen her. Für viele Moleküle ist z.B. die auf die Auslenkung der Bindungslängen und $-$ winkel wirkende Rückstellkraft groß im Vergleich zu den anderen auftretenden Bindungskräften (symbolisiert durch $\mathcal{O}(1/\epsilon)$ für entsprechend kleines ϵ). Ein mathematisch präziser Rahmen zum Studium der Auswirkung der schnellen Bewegungen ist die Analyse des Grenzwertes $\epsilon \rightarrow 0$. Man ist daran interessiert, ob man für den Grenzwert der Folge der Lösungen für verschiedene ϵ eine Gleichung angeben kann, die die *direkte* Bestimmung der Grenzlösung ermöglicht, also die Skala ϵ nicht mehr enthält. Wir haben eine Beweistechnik erarbeitet, die für verschiedenste Hamiltonsche Bewegungsgleichungen diese *Grenzgleichung* anzugeben und die Konvergenz gegen ihre Lösung zu beweisen erlaubt [4].

Was im Grenzfall passiert, kann am obigen Beispiel der großen Rückstellkraft gut veranschaulicht werden (vgl. [12]): Die starke Kraft induziert im Grenzwert ein “Einfrieren” der schnellen Freiheitsgrade auf die Ruhelage, also eine holonome Zwangsbedingung. Allerdings konvergieren nur die Orte punktweise auf die Mannigfaltigkeit der Zwangsbedingungen. Die Impulse der schnellen Freiheitsgrade dagegen konvergieren nur schwach gegen Null, also im zeitlichen Mittel. Daher ist in den eingefrorenen Bindungsschwingungen eine nicht-verschwindende Grenzenergie “gespeichert”, die in einem *Korrekturpotential* resultiert, welches dann

wiederum die Bewegung der langsameren Freiheitsgrade beeinflusst (vgl. Abbildung, Korrekturpotential W). Die von uns konzipierte Beweistechnik erlaubt die Entwicklung expliziter Gleichungen für dieses Korrekturpotential.

<p>Klassische MD:</p> $\ddot{q} = -DV^T(q) - \frac{1}{\epsilon} DU^T(q)$ <p style="text-align: center;">↓</p> $\ddot{q} = -D(V + W)^T(q) - D^2U \cdot \lambda$ $DU(q) = 0$	<p>Quanten-klassische MD:</p> $\ddot{q} = -D \langle \psi, H(q) \psi \rangle$ $i\epsilon \dot{\psi} = H(q) \psi$ <p style="text-align: center;">↓</p> $\ddot{q} = -\sum_k \theta_k DE_k(q)$ $H(q) \Phi_k = E_k(q) \Phi_k$
--	---

Originalgleichungen und zugehörige Grenzgleichungen für $\epsilon \rightarrow 0$. (D bezeichnet die Ableitung nach dem Ort q .)

Neben dem Problem schneller Bindungsschwingungen fand die neue Methodik vor allem bei der Konstruktion der Grenzgleichung des *gemischt quanten-klassischen* QCMD-Modells Anwendung. In diesem Fall sind die schnellen Freiheitsgrade (Elektronen oder Protonen mit Masse $\mathcal{O}(\epsilon)$) quantenmechanisch an die klassische Modellierung der meisten Atome eines Moleküls gekoppelt. Als Grenzgleichung für $\epsilon \rightarrow 0$ ergibt sich eine Variante der bekannten Gleichung des zeitabhängigen Born-Oppenheimer-Modells (vgl. Abbildung). Hier führt der Übergang zur Grenzgleichung zu einer neuen Klasse sehr effizienter Algorithmen, deren Anwendung auf realistische Probleme in Vorbereitung ist.

In beiden Fällen kann die Grenzlösung an gewissen Resonanzstellen der schnellen Schwingungen mehrdeutig werden. Auch bei der Charakterisierung dieser Resonanzen führte die Homogenisierungstechnik zu neuen, wesentlichen Einsichten, die jedoch erst Anfang nächsten Jahres publiziert werden können.

Für den Fall der klassischen MD wurde untersucht, wie sich die Grenzgleichung ändert, wenn man das System (durch Gleichgewichts-Kopplung an ein Wärmebad) einer stochastischen Anregung aussetzt. Für den einfachen Testfall konnte gezeigt werden, daß sich für verschwindende Kopplung wiederum das erwähnte Korrekturpotential ergibt, während im Grenzfall sehr starker Kopplung das bekannte Fixman-Potential an seine Stelle tritt [10].

Wenn das Grenzsysteem äquivalent zu einem starren Körper ist, entfällt mit den inneren Freiheitsgraden auch das Korrekturpotential (Beispiel: Wassermoleküle). Hier zeigt sich, daß häufig Effekte endlichen ϵ 's einen nicht vernachlässigbaren Einfluß auf die reduzierte Dynamik haben. In der Arbeit [11] wurde eine entsprechende Modifikation der Potentialfunktionen vorgeschlagen. Diese erlaubt insbesondere eine effizientere Implementierung als die in früheren Ansätzen verfolgte Modifizierung der Zwangsbedingungen.

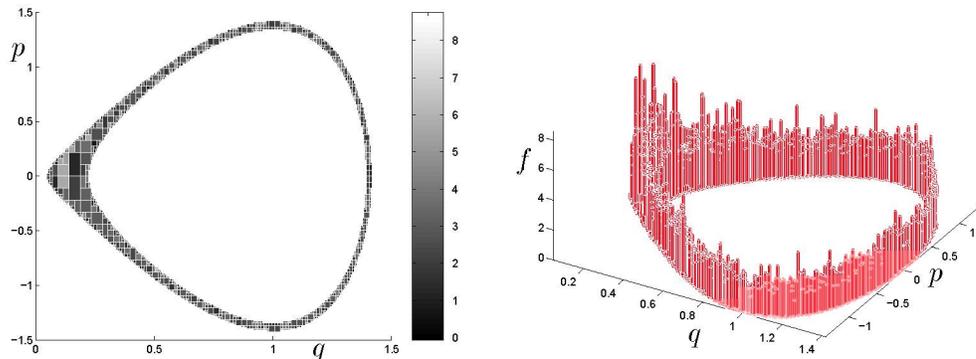
Direkte Berechnung statistischer Eigenschaften

Bearbeitet von: P. Deuffhard, Ch. Schütte

Kooperationspartner: M. Dellnitz (ZIB-Fellow), O. Junge, Universität Bayreuth

Im Berichtsjahr gelang der Entwurf eines völlig neuen Algorithmus zur Berechnung der wesentlichen statistischen Eigenschaften der Dynamik von molekularen Systemen [5]. Im kommenden Jahr wird nach einer Verbesserung der Effizienz der einzelnen Bausteine die Anwendung auf realistische Probleme aus der Moleküldynamik (MD) erfolgen.

Die Untersuchungen in [8] haben deutlich gemacht, daß man bei klassischen Hamiltonschen Anfangswertproblemen aus der MD mit einem starken, nichtlinearen Wachstum des globalen Diskretisierungsfehlers rechnen muß. Langzeit-Simulationen der Dynamik können also aus prinzipiellen Gründen keine verlässlich interpretierbaren Ergebnisse liefern. Die neue Methode erlaubt direkt, d.h. ohne Langzeit-Simulationen, die Berechnung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Phasenraum und der Häufigkeit globaler Konformationsänderungen. Sie verfolgt keinen Monte-Carlo Ansatz, sondern approximiert wirklich die Statistik der originalen Dynamik. Ausgangspunkt für den neuen Algorithmus war dabei ein rekursiver Unterteilungsalgorithmus zur Berechnung invarianter Maße dynamischer Systeme (siehe Schwerpunkt “Computergestützte Analyse dynamischer Systeme”), der auf den Fall Hamiltonscher Systeme erweitert werden konnte.



Dargestellt ist eine Hälfte der Energiezelle und die Phasenraum-Aufenthaltswahrscheinlichkeit f eines Systems mit dem Hamilton-Operator $H = p^2/2 + (q^2 - 1)^2$ zur Energie $E = 0.95 \pm 0.04$. Die dreidimensionale Darstellung läßt deutlich ein Maximum von f nahe des Umkehrpunktes $(0, 0)$ erkennen.

Die Berechnung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit setzt die Kenntnis wesentlicher Eigenschaften der Dynamik auf *allen* Zeitskalen voraus. Sie ist mathematisch charakterisiert als die Wahrscheinlichkeitsdichte, die *invariant* gegen den Transport durch die Dynamik des Systems ist. In anderen Worten: Sie ist gegeben durch einen Eigenvektor zum Eigenwert 1 des Frobenius-Perron-Operators,

der diesen Transport einer Wahrscheinlichkeitsdichte beschreibt. Während dieser Eigenvektor zu einer Invarianz, also einer Zeitskala $T = \infty$ gehört, beschreiben die Eigenvektoren zu Eigenwerten $\lambda < 1$, aber Betrag nahe 1, die Statistik der Dynamik auf großen Zeitskalen $T < \infty$. Linearkombinationen dieser Eigenvektoren charakterisieren die unter der Dynamik *fast-invarianten* Mengen, also Gebiete im Phasenraum, in denen sich das beschriebene System lange Zeit aufhält. Die mittlere Aufenthaltsdauer in diesen fast-invarianten Mengen kann anhand der betreffenden Eigenwerte mit Betrag nahe 1 abgeschätzt werden. Diese fast-invarianten Strukturen gehören zu verschiedenen Konformationen des molekularen Systems; die mittlere Aufenthaltsdauer charakterisiert die zeitliche Statistik von Konformationsänderungen.

Der Frobenius–Perron–Operator und seine Eigenvektoren werden wie folgt approximiert: Es wird eine Box–Überdeckung der “Energiezelle” $\Gamma_\delta(E)$ des Hamiltonschen Systems, also der Menge von Zuständen mit Energien $E \pm \delta$, erzeugt. Diese Überdeckung entsteht adaptiv durch rekursive Unterteilung einer Anfangsbox. Auf ihrer Grundlage wird die Matrix A der Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den Boxen erzeugt, wobei das Bild einer Box unter dem Hamiltonschen Fluß mittels eines Ensembles *kurzer* Trajektorien bestimmt wird. Die stochastische Matrix A stellt dann eine Galerkin–Diskretisierung des Frobenius–Perron–Operators dar. Zur effizienten Lösung des zugehörigen nicht–selbstadjungierten Eigenwertproblems wurde der im Schwerpunkt “Adaptive Multilevel–Methoden” dargestellte Mehrgitter–Algorithmus erfolgreich eingesetzt.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Bearbeitet von: S. Reich, Ch. Schütte, P. Nettesheim, F. Bornemann

Neben den beiden gerade genannten Problemstellungen wird die Projektarbeit von der (Weiter-)Entwicklung und Analyse von Integrationsalgorithmen für die verschiedenen Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (klassisch, quantenmechanisch, quanten–klassisch) bestimmt.

Wie schon oben ausgeführt, ist die Langzeit–Simulation der Lösung eines klassischen Hamiltonschen Anfangswertproblems aus der MD ein im Sinne der Vorwärtsfehleranalyse schlecht–gestelltes Problem. Bei der *Rückwärtsfehleranalyse* numerischer Lösungen gewöhnlicher Differentialgleichungen betrachtet man die numerische Lösung als die “exakte” Lösung einer modifizierten Differentialgleichung. Diese Betrachtungsweise ergibt ein besseres Verständnis für das Langzeit–Verhalten der verwendeten Diskretisierungsverfahren, insbesondere für Hamiltonsche Systeme. In der Arbeit [9] wurde ein neuer Beweis für die Restgliedabschätzung angegeben. Des weiteren wurden qualitative (geometrische) Eigenschaften der modifizierten Differentialgleichung untersucht.

Symplektische Integratoren haben sich als sehr geeignet für die Langzeit–Simulation Hamiltonscher Systeme erwiesen. Ein wesentliches Manko derartiger Inte-

gratoren ist jedoch, daß ihre schönen Eigenschaften durch die Verwendung einer klassischen Schrittweitensteuerung zerstört werden. In vielen Anwendungen aus der MD ist eine Steuerung der Schrittweite (z.B. bei Stoßvorgängen) allerdings sehr wünschenswert. In der Arbeit [9] konnten nun erstmals adaptive symplektische Integratoren niedriger Ordnung angegeben werden. Weiterhin wurden Verfahren variabler Schrittweite für allgemeine reversible Differentialgleichungen und Skalierungsansätze untersucht, die auf dem Konzept eines lokalen Fehlerschätzers beruhen [8]. Ist man allerdings an der genauen Approximation einer einzelnen Lösungskurve auf "kurzen" Intervallen interessiert, erweist sich ein neu entwickelter, auf der Extrapolation des symplektischen Leapfrog-Schemas aufbauender Integrator als bei weitem am effizientesten [8].

In Bezug auf Herleitung und Diskretisierung *quanten-klassischer Modelle* konnten wesentliche Fortschritte erzielt werden. Die das QCMD-Modell betreffenden waren schon im Projekt "Homogenisierung schneller Freiheitsgrade" beschrieben worden [1,6]. Darüberhinaus wurde erstmals eine mathematische Rechtfertigung des häufig zur quanten-klassischen Ankopplung der Elektronenhüllen verwendeten *Car-Parrinello-Verfahrens* gegeben [3]. Die Ergebnisse der rigorosen Analyse führten direkt zur Konstruktion eines adaptiven Algorithmus zur effizienten Steuerung des Verfahrens über die sogenannte "fake energy" [2].

Zur Berücksichtigung quantenmechanischer Effekte muß für einige Freiheitsgrade die *zeitabhängige Schrödingergleichung* gelöst werden, z.B. im Rahmen der meisten heute diskutierten quanten-klassischen Modelle (vgl. obige Abbildung). In der Anwendung haben sich Integratoren mit Ortsdiskretisierung durch Spektralmethoden bei Verwendung speziell entwickelter Zeitdiskretisierungen als besonders effizient erwiesen. Im Rahmen einiger Diplomarbeiten wurden diese Techniken eingehend studiert [7] und Verbesserungen (adaptive Ortsdiskretisierung mit Fehlerkontrolle, Mehrgittermethode bei impliziter Diskretisierung in der Zeit, Unterraumapproximation der Dynamik) erarbeitet, die wesentliche Steigerungen der Effizienz und vor allem der Verlässlichkeit der Algorithmen erlauben.

1. F. A. Bornemann, P. Nettesheim, Ch. Schütte: Quantum-classical molecular dynamics as an approximation to full quantum dynamics. *J. Chem. Phys.*, **105** 1074–1083 (1996)
2. F. A. Bornemann, Ch. Schütte: A mathematical investigation of the Car-Parrinello method. (*submitted to Num. Math.*, 1996), ZIB Preprint, SC 96–19
3. F. A. Bornemann, Ch. Schütte: Adaptive accuracy control for microcanonical Car-Parrinello simulations. (*submitted to J. Chem. Phys.*, 1996), ZIB Preprint, SC 96–20
4. F. A. Bornemann, Ch. Schütte: Homogenization of highly oscillatory Hamiltonian systems. *Physica D*, (to appear 1996).

5. P. Deuffhard, M. Dellnitz, O. Junge, Ch. Schütte: Computation of Essential Molecular Dynamics by Subdivision Techniques I. Basic Concept. ZIB Preprint, SC 96-45
6. P. Nettesheim, F. A. Bornemann, B. Schmidt, Ch. Schütte: An explicit and symplectic integrator for quantum-classical molecular dynamics. *Chem. Phys. Lett.*, 256:581-588 (1996)
7. P. Nettesheim, W. Huisinga, Ch. Schütte, F.A. Bornemann: Chebyshev-approximation for wavepacket-dynamics: better than expected. ZIB Preprint, SC 96-47
8. V. Prole: Adaptive Diskretisierung Hamiltonscher Systeme. Diplomarbeit, Freie Universität Berlin (1996)
9. S. Reich: Backward error analysis for numerical integrators. (*submitted to BIT, 1996*), ZIB Preprint, SC 96-21
10. S. Reich: Smoothed Langevin dynamics of highly oscillatory systems. (*submitted to Physica D, 1996*), ZIB Preprint, SC 96-04
11. S. Reich: Torsion dynamics of molecular systems. *Phys. Rev. E*, **53** 4176-4181 (1996)
12. Ch. Schütte, F.A. Bornemann: Homogenization approach to smoothed molecular dynamics. In V. Lakshmikantham, editor, *World Congress of Nonlinear Analysis '96. Proceedings of the Second Congress held in Athens, Greece*. Walter de Gruyter, Berlin, New York (to appear).

2.2.7 Wissenschaftliche Visualisierung

Ziel der Wissenschaftlichen Visualisierung ist es, die hochentwickelten Fähigkeiten des menschlichen Sehsystems zur Informationsvermittlung zu nutzen. Die darzustellende Information besitzt im allgemeinen mathematische Struktur und ist numerisch oder symbolisch repräsentiert. Typische Informationsobjekte sind Flächen, Gitter, Graphen, Skalar-, Vektor- und Tensorfelder. Für solche Objekte sind visuelle Darstellungen zu entwickeln, die den kognitiven Fähigkeiten des Menschen besonders gut entsprechen. Dazu werden Methoden aus Computergrafik, Bildverarbeitung und algorithmischer Mathematik verwendet sowie Technologien wie Grafik- und Display-Hardware, Video, Multimedia oder Virtual Reality eingesetzt. Bei der Entwicklung wirkungsvoller Visualisierungsverfahren sind auch Belange des jeweiligen Anwendungsgebiets zu berücksichtigen und sinnesphysiologische, wahrnehmungspsychologische und ästhetische Aspekte zu beachten. Die interaktive visuelle Analyse von Daten setzt Bildberechnungszeiten im Subsekunden-Bereich voraus. Geeigneten Datenstrukturen und effizienten Algorithmen, die moderne Grafikhardware intelligent nutzen, kommt deshalb eine entscheidende Rolle zu.

Linienintegralfaltung

Bearbeitet von: D. Stalling, H. Battke, M. Zöckler, H.C. Hege

Kooperationspartner: M. Rumpf (Universität Freiburg, Universität Bonn)

Die Linienintegralfaltung (LIC) ist eine leistungsfähige Methode zur Darstellung von zweidimensionalen Vektorfeldern. Im Gegensatz zu anderen Verfahren vermittelt sie ein hochaufgelöstes Bild der Feldverteilung im gesamten Datenvolumen. Dies wird durch die Berechnung einer Texturmatrix erreicht, aus der die Richtungsstruktur des Feldes unmittelbar abgelesen werden kann.

Ein am Konrad-Zuse-Zentrum entwickelter Algorithmus zur schnellen Berechnung von LIC-Bildern [1] konnte weiter verbessert werden. Das LIC-Verfahren erfordert die simultane numerische Integration eines Vektorfeldes in einer flächendeckenden, möglichst wenig überlappenden Weise. Die Platzierung der Integralkurven konnte durch die Verwendung von Sobol-Sequenzen, d.h. spezielle Folgen von Quasizufallszahlen, optimiert werden. Der Rechenaufwand wurde durch eine adaptive Längen Anpassung der einzelnen Integralkurven minimiert. Schließlich konnte die Berechnung von animierten LIC-Sequenzen durch Ausnutzung der Kohärenz zwischen aufeinanderfolgenden Bildern erheblich beschleunigt werden. Trotz zahlreicher algorithmischer Verbesserungen war die Berechnung von animierten LIC-Sequenzen im Rahmen einer interaktiven Anwendung bisher noch nicht möglich. Deshalb haben wir den Algorithmus zur Bildberechnung parallelisiert und auf dem Parallelrechner Cray T3D implementiert. Die Implementierung benutzt eine Bildraumpartitionierung und zeichnet sich durch ein geschicktes Kommunikations- und Synchronisationsschema aus, mit dem redundante Berech-

nungen auf verschiedenen Prozessoren effektiv verhindert werden können. Die oben genannten Verbesserungen des LIC-Algorithmus wie auch dessen Parallelisierung wurden auf dem ersten Eurographics Workshop on Parallel Graphics and Visualization vorgestellt [2].



Abbildung 1: Darstellung eines Vektorfeldes auf einer zweidimensionalen Mannigfaltigkeit mit Hilfe des LIC-Algorithmus [4].

Weitere Arbeiten befaßten sich mit der Erweiterung der Linienintegralfaltung auf beliebige, auch mehrfach zusammenhängende, triangulierte Flächen, s. Abb. 1. Anstatt die Bildberechnung, wie kürzlich vorgeschlagen, im Parameterraum einer Fläche vorzunehmen, wurde ein Verfahren entwickelt, das die hierbei auftretenden Bildverzerrungen vermeidet. In dem neu entwickelten Verfahren wird jedes Dreieck unabhängig, aber in einer mit den Nachbardreiecken konsistenten Weise texturiert. Um das entstehende texturierte Objekt interaktiv am Bildschirm drehen und darstellen zu können, mußte ein Verfahren entwickelt werden, das den Texturspeicher einer Grafikkworkstation optimal ausnutzt. Dies wurde durch ein dichtes Zusammenpacken vieler kleiner Dreiecke zu jeweils größeren quadratischen Blöcken erreicht. Das NP-schwere Problem konnte durch eine Heuristik, bei der die Dreiecke nach einer sequentiellen Auswahlstrategie zeilenweise angeordnet werden, so gelöst werden, daß ein nahe am Optimum liegender Ausnutzungsgrad des Texturspeichers erzielt wird [3, 4].

Visualisierung von 3D-Vektorfeldern

Bearbeitet von: D. Stalling, M. Zöckler, H.C. Hege

Während es für zweidimensionale Vektorfelder möglich ist, beispielsweise mit Hilfe der Linienintegrale, alle wesentlichen Feldmerkmale in einem Bild zusammenzufassen, ist dies für dreidimensionale Felder ungleich schwieriger. Zum einen kann man aufgrund der wechselseitigen Verdeckung von Objekten immer nur Teilbereiche im Raum sichtbar machen, zum anderen fällt es oft schwer, komplexe räumliche Strukturen aus einem zweidimensionalen Bild mental zu rekonstruieren. Ein wichtiges Hilfsmittel bei der räumlichen Wahrnehmung sind Beleuchtungseffekte. Lichtreflexe lassen Objektformen deutlich hervortreten, insbesondere, wenn man sie unter verschiedenen Blickwinkeln betrachtet. Um derartige Effekte zu nutzen, war man bisher darauf angewiesen, die Feldlinien eines Vektorfeldes durch dünne Röhren zu approximieren. Der Grund ist, daß heutige Grafikcomputer für die Beleuchtung von Objekten mit eindeutig definierten Oberflächennormalen ausgelegt sind. Linien hingegen haben keine eindeutig definierte Normale.

Am Konrad-Zuse-Zentrum wurde im Berichtszeitraum eine Methode entwickelt, bei der ein verallgemeinertes Beleuchtungsmodell für Linien effektiv mit Hilfe der Texturehardware moderner Grafikkrechner ausgewertet werden kann. Dabei wird die Berechnung der auftretenden Skalarprodukte mit Hilfe einer hardwareseitig unterstützten Matrixtransformation vorgenommen. Im Gegensatz zur Approximation mit dünnen Röhren können so viele tausend Feldlinien dargestellt werden und die komplexen Szenen noch problemlos am Bildschirm manipuliert werden. Zusätzlich können durch den Einsatz von Transparenzen einerseits qualitativ hochwertige Bilder ohne Alias-Effekte erzeugt werden und andererseits durch eine entlang der Feldlinie variable Transparenz das Richtungsvorzeichen kodiert werden. Es stellt sich heraus, daß die bei semi-transparenten Objekten notwendige Tiefensortierung wirkungsvoll durch eine Vorsortierung entlang der drei Hauptachsenrichtungen ersetzt werden kann. Der Einsatz von Transparenzen bedeutet somit nur einen minimalen algorithmischen Mehraufwand. Durch lokal veränderliche Einfärbung der Feldlinien kann zusätzlich zur Vektorfeldrichtung eine weitere skalare Größe dargestellt werden.

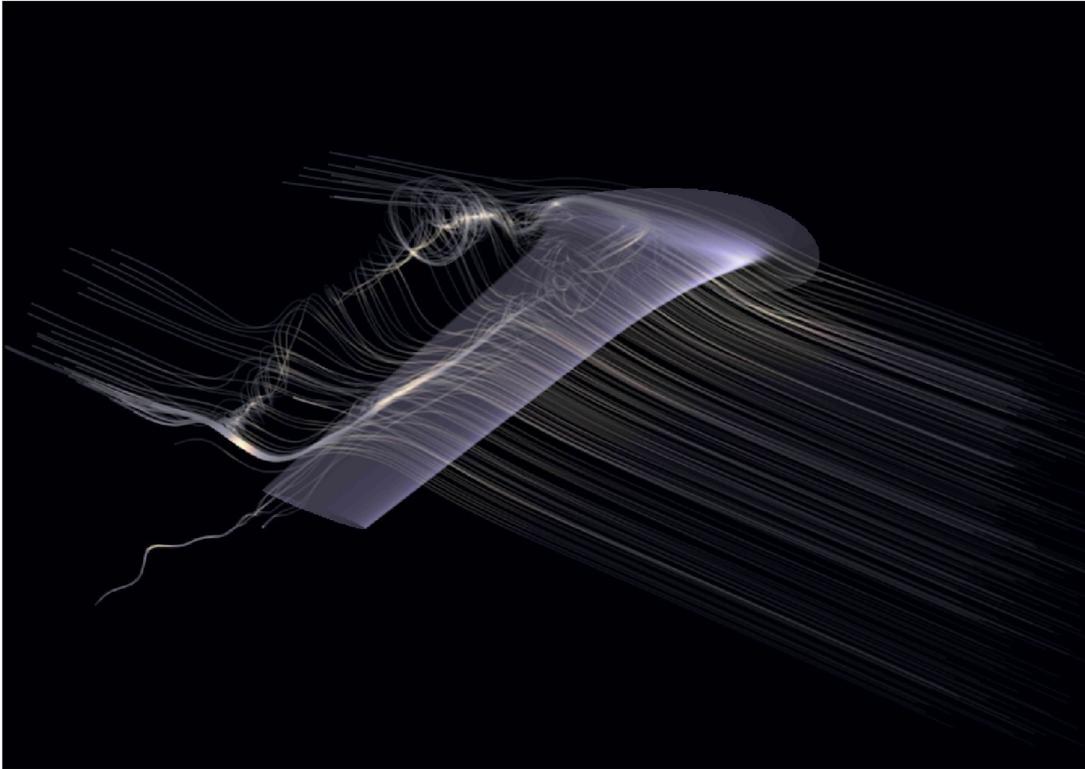


Abbildung 2: Darstellung einer Tragflügelströmung mit Hilfe von beleuchteten Feldlinien [5].

Die beschriebenen Techniken wurden im November 1996 auf der Visualization Konferenz in San Francisco vorgestellt [5] und dort mit dem ‘Best Paper Award’ ausgezeichnet. Eine Erweiterung des Verfahrens um zusätzliche Strategien zur Platzierung der Feldlinien, Darstellung und Rendering der Feldlinien als NURBS-Kurven, modifizierte Sortierstrategie sowie hardware-unterstützte Tiefenschattierung ist in [6] dargestellt.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Bearbeitet von: H. Battke, W. Baumann, Th. Brenner, P. Deuffhard, H.C. Hege, A. Merzky, D. Limbach, P. Müller, O. Paetsch, U. Schwarz, J. Schmidt-Ehrenberg, D. Stalling, H. Stüben, M. Zöckler

Förderung: BMBF/DFN: Netzverteilte Visualisierung wissenschaftlicher Daten (bis Sept. 1996), BMBF/DFN: Informationssystem Visualisierung (ab Okt. 1996)

Kooperationspartner: SFB 288: Differentialgeometrie und Quantenphysik, Fachbereich Mathematik, Technische Universität Berlin (U. Pinkall, K. Polthier), Institut für Astronomie und Astrophysik der TU Berlin (E. Sedlmayr), Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik, Technische Universität Berlin (F. Thiele), Institut für Theoretische Physik der Technischen Universität Berlin (S. Heß), Bereich Theorie, Hahn-Meitner-Institut Berlin (P. J. Kuntz), Arbeitsgruppe Nu-

merik und Funktionalanalysis, Fachbereich Mathematik, Technische Universität Berlin (H. Schwandt), Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (M. Korzen), Institut für Kommunikations- und Softwaretechnik, AG Konnektionismus, (K. Obermayer, M. Scholz), Institut für Tierphysiologie – Neurobiologie –, Fachbereich Biologie, Freie Universität Berlin (R. Menzel).

Neben der Visualisierung von Vektorfeldern wurden auch Entwicklungen auf dem Gebiet der Darstellung von 3D-Skalarfeldern durchgeführt. Für Daten auf regulären Gittern wurden ein parallel arbeitender Isoflächengenerator [7] und ein paralleles Zell-Projektionsverfahren [8] entwickelt und auf dem massiv-parallelen System CRAY T3D implementiert. Des weiteren wurde ein verbessertes Zell-Projektionsverfahren für Daten auf Tetraedergittern implementiert, bei dem innerhalb der Tetraeder statt mit konstanter Lichtemission und -absorption mit linear variierenden (zueinander proportionalen) Koeffizienten gerechnet wird [9]. Die numerisch und auch visuell verbesserten Resultate lassen sich durch Nutzung von Texturhardware ohne Performance-Einbußen erzielen. Eine Darstellung von Verfahren zum direkten Volume-Rendering findet sich in [10].

Ein weiteres Arbeitsfeld war die Anwendung von Visualisierungsverfahren in verschiedenen wissenschaftlichen Fragestellungen. Das breite Spektrum der am ZIB entwickelten Verfahren zur Vektorfeldvisualisierung wurde speziell auf elektrostatische Felder angewandt, wie sie bei quantenchemischen Simulationen eine Rolle spielen [11]. Dabei zeigte sich, daß viele ursprünglich für die Strömungsmechanik entwickelte Methoden auch hier sinnvoll eingesetzt werden können, wobei die Möglichkeit zur Kombination unterschiedlicher Darstellungsverfahren eine wichtige Rolle spielt. Daneben wurden diese Verfahren weiterhin für die Visualisierung von Ergebnissen aus Strömungssimulationen selbst eingesetzt. In diesem Zusammenhang war es erforderlich, einige Softwarekomponenten zu erweitern, beispielsweise zur Unterstützung von dreidimensionalen krummlinigen Gittern sowie von zweidimensionalen Dreiecksgittern.

In Kooperation mit der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung wurde ein Visualisierungssystem erstellt, das die Meßdaten von Experimenten in Prüföfen während des Brandversuchs on-line darstellt. Die an diskreten Punkten gemessenen Daten werden geeignet interpoliert und mit 3D-Visualisierungsmethoden direkt auf dem als Tetraedergitter vorliegenden Prüfobjekt dargestellt [12].

Im Rahmen eines umfangreichen, vom BMBF/DFN geförderten Projektes wurden verschiedene Lösungen zur netzverteilten Visualisierung erarbeitet. Dabei wurden sowohl generische Werkzeuge als auch anwendungsspezifische Arbeitsumgebungen zur netzverteilten Visualisierung und Simulation erstellt. Die allgemeinen Werkzeuge unterstützen Aufgaben wie Kopplung von Simulationen auf Hochleistungsrechnern an lokale Grafikarbeitsplätze, objektorientierte und verteilte Visualisierung, Remote-Videoaufzeichnung, parallele Bilddatenkompression und digitalen Filmschnitt. Die anwendungsspezifischen Visualisierungsumgebun-

gen dienen Forschungen in den Gebieten Numerische Mathematik, Astrophysik, Strukturforschung, Chemie, Polymerphysik und Strömungsmechanik. Resultate der Projektarbeiten wurden auf der CeBIT '96 ausgestellt und sind in [13] zusammengefaßt.

In einem seit Okt. 96 laufenden Drittmittel-Projekt wird ein verteiltes Informationssystem zum Thema Wissenschaftliche Visualisierung aufgebaut. Die ersten Arbeiten befaßten sich mit dem Entwurf des Informationssystems, der Informationsstrukturierung und der Entwicklung eines netzweiten Bibliographie-Services. In Kooperation mit den Arbeitsgruppen Konnektionismus an der TU Berlin und Neurobiologie an der FU Berlin wurde ein BMBF-Verbundprojekt, das eine 3D-Rekonstruktion und Analyse von Insektenhirnen zum Ziel hat, vorbereitet. Hierzu wurden mit einem konfokalen Mikroskop aufgenommene Bilddaten von Neuronen analysiert. Insbesondere wurden 3D-Oberflächenrekonstruktionen vorgenommen und Visualisierungen erstellt.

Aktualisierte und erweiterte Beiträge zum letztjährigen Internationalen Workshop „Visualization and Mathematics“ in Berlin-Dahlem wurden in einem Sammelband zusammengefaßt und herausgegeben [14]. Die Planungen und Vorarbeiten für eine Nachfolgetagung im Sept. 1997 sind angelaufen.

Für ein Filmfestival mit mathematisch orientierten Beiträgen, das während des International Congress of Mathematicians 1998 (ICM'98) für die allgemeine Öffentlichkeit in Berlin veranstaltet werden soll, wurden Vorarbeiten (Konzept, Programmkomitee, Finanzierung, Ausschreibung) geleistet.

Publikationen

1. D. Stalling, H.C. Hege, *Fast and Resolution Independent Line Integral Convolution*, Proceedings of SIGGRAPH '95, (Los Angeles, California, August 6-11,1995). In *Computer Graphics Annual Conference Series*, pp. 249-256 (1995)
2. M. Zöckler, D. Stalling, H.-C. Hege, *Parallel Line Integral Convolution*, in: Proc. First Eurographics Workshop on Parallel Graphics and Visualisation, 26-27 September 1996, Bristol, U.K., 15 p. To appear in *Parallel Computing* (1997)
3. H. Battke, Entwicklung texturbasierter Verfahren zur Vektorfeldvisualisierung, Diplomarbeit, FB Informatik, Humboldt-Universität zu Berlin (1996)
4. H. Battke, D. Stalling, H.-C. Hege, *Fast Line Integral Convolution for Arbitrary Surfaces in 3D*, ZIB Preprint, SC 96-59, in: H.C. Hege, K. Polthier (Hrsg.), *Visualization and Mathematics*, Springer-Verlag (1997)
5. M. Zöckler, D. Stalling, H.-C. Hege, *Interactive Visualization of 3D-Vector Fields using Illuminated Streamlines*, Proc. IEEE Visualization '96, to appear 1996, San Francisco, pp. 107-113 (1996)

6. D. Stalling, M. Zöckler, H.-C. Hege, *Fast Display of Illuminated Field Lines*, ZIB Preprint SC 96-58, submitted to IEEE Trans. on Visualization and Computer Graphics
7. T. Anders, *Effiziente Algorithmen zur Isoflächengenerierung aus Volumendaten*, Diplomarbeit, FB Informatik, Humboldt-Universität zu Berlin (1996)
8. T. Brenner, *PVR – Parallel Volume Rendering: Ein Projektionsansatz für den Cray T3D*, Diplomarbeit, FB Informatik, Humboldt-Universität zu Berlin, (1996)
9. R. Beck, P. Deuffhard, H.C. Hege, M. Seebass, D. Stalling, *Numerical Algorithms and Visualization in Medical Treatment Planning*, ZIB Preprint, SC 96-54.
10. H.C. Hege, T. Höllerer, D. Stalling, *Volume Rendering: Mathematical Models and Algorithmic Aspects*, in: W. Nagel (Hrsg.), *Partielle Differentialgleichungen, Numerik und Anwendungen*, Konferenzen des Forschungszentrums Jülich GmbH, p. 227-255 (1996)
11. D. Stalling, T. Steinke, *Visualization of Vector Fields in Quantum Chemistry*, ZIB Preprint, SC 96-01 (1996)
12. M. Korzen, R. Schriever, K.-U. Ziener, O. Paetsch, G. Zumbusch, *Real-Time 3-D Visualization of Surface Temperature Field Measured by Thermocouples on Steel Structures in Fire Engineering*, in: J. Ziebs et.al. (Hrsg.), *Proc. Int. Symposium “Local Strain and Temperature Measurements in Non-Uniform Fields at Elevated Temperatures“*, Woodhead Publishing, Cambridge, England (1996)
13. W. Baumann, H.-C. Hege, U. Schwarz, H. Stüben, *Netzverteilte Visualisierung und Simulation*, ZIB, Technical Report TR 96-08 (1996)
14. H.C. Hege, K. Polthier (Hrsg.), *Visualization and Mathematics*, Springer Verlag, 390 p. (1997)

2.2.8 Medizinische Therapieplanung

Bearbeitet von: P. Deuffhard, M. Seebass, D. Stalling, O. Paetsch, R. Beck, H.-C. Hege

Kooperationspartner: W. Schlegel (Deutsches Krebsforschungszentrum Heidelberg), K.-H. Hoffmann (Institut für Angewandte Mathematik, TU München), D. Grönemeyer (Universität Bochum)

Förderung: DFG, SFB 273 “Hyperthermie: Methodik und Klinik”,
Fa. Dr. Sennewald Medizin-Technik GmbH, München

Dieser Schwerpunkt hat sich 1996 am ZIB etabliert. Das Aufgabenfeld läßt sich wie folgt beschreiben: Patientenspezifische Information liegt meist in Form von Bilddaten vor. An Hand dieser Daten müssen die relevanten anatomischen Strukturen definiert und ein 3D-Modell erzeugt werden, das als Grundlage der Planung dient. Integraler Bestandteil einer Planung ist eine numerische Simulation der Therapie. Aufgrund der Simulationsresultate müssen die Parameter der Therapie festgelegt werden. Dies kann in einem interaktiven Prozeß oder durch automatische Optimierung erfolgen. Ein Planungssystem muß also leistungsfähige Simulations-, Visualisierungs- und 3D-Interaktionsmöglichkeiten bieten.

Im Zentrum des Interesses stand am ZIB anfänglich die Radiofrequenz-Hyperthermie. Bei der Arbeit an diesem Projekt wurde deutlich, daß die meisten der anfallenden Aufgaben ähnlich in anderen medizinischen Anwendungen auftreten, was zu einer erweiterten Schwerpunktsetzung führte.

Hyperthermie-Planungssystem (HyperPlan)

Bearbeitet von: D. Stalling, M. Seebass, O. Paetsch, R. Beck, J. Nadobny, H.C. Hege

Kooperationspartner: J. Nadobny, P. Wust, R. Felix (Virchow-Klinikum, HU Berlin), S. Wegner, H. Oswald (Deutsches Herzzentrum Berlin), W. Wlodarczyk, G. Mönich (Fachbereich Elektrotechnik, TU Berlin)

Die regionale Hyperthermie ist ein Verfahren in der *Krebstherapie*, bei dem Tumorgewebe durch kontrollierte Radiowelleneinstrahlung auf Temperaturen von 42 bis 44°C erwärmt wird. Das Projekt wird in enger Kooperation mit Medizinern des Virchow-Klinikums und Experten aus der Abteilung Bildverarbeitung des Deutschen Herzzentrums in Berlin bearbeitet. Das langfristige Ziel ist es, die patientenspezifische Planung für die regionale Hyperthermie-Therapie deutlich zu vereinfachen und erheblich zu beschleunigen. So soll es dem behandelnden Arzt ermöglicht werden, innerhalb einer klinisch praktikablen Zeit eine komplette Planung durchzuführen.

Einen Schwerpunkt nahm die Entwicklung verbesserter Algorithmen zur *Bildsegmentierung* ein. Die manuelle Konturierung einzelner CT-Schichten konnte durch halb-automatische Verfahren erheblich beschleunigt werden („Intelligent Scissors“) [7]. Für die Zukunft wird eine 3D-Segmentierung angestrebt.

Einige Komponenten, beispielsweise eine verallgemeinerte 3D-Wasserscheiden-Transformation, wurden bereits implementiert und getestet.

Im aktuellen Entwicklungszustand zeichnet sich HyperPlan durch die transparente *Einbindung aller Simulations-Komponenten* aus, angefangen von der Berechnung des elektrischen Feldes und der Lösung des Wärmetransport-Problems bis hin zur automatischen Optimierung der Antennenparameter [2, 3, 6, 9]. Dabei wird die E-Feldberechnung derzeit nach der FDTD-Methode (finite differences time domain) durchgeführt. Ein weiteres Verfahren zur Feldberechnung basierend auf einer adaptiven Multilevel-Finite-Elemente-Methode mit einer Felddarstellung durch sogenannte Vektor-Elemente befindet sich gegenwärtig in Entwicklung [1].

Das Spektrum der leistungsfähigen *Interaktions- und Visualisierungsmethoden*, die HyperPlan bereitstellt, wurde im Berichtszeitraum weiter vervollständigt, beispielsweise durch die Möglichkeit zur schnellen Berechnung von MIP-Bildern (maximum intensity projections) oder durch textur-basiertes Pseudo-Color-Coding auf Schnitten und Oberflächen.

In *Kooperation* mit der Technischen Universität Berlin, Fachbereich Elektrotechnik, wurde untersucht, inwieweit sich Radiofrequenz-Hyperthermie (HT) und Magnetresonanz-Tomographie (MR) kombinieren lassen. Das Ziel ist, das MR-Verfahren während der Hyperthermie als ein nichtinvasives Verfahren zur Temperaturmessung einzusetzen. Dabei dürfen sich HT-Applikator und MR-Tomograph gegenseitig nicht in ihrer Wirkung beeinflussen. Es wurden Rechnungen für ein Modell eines HT-Applikators mit und ohne MR-Komponenten durchgeführt. Die FDTD-Methode ist für derartige frequenzabhängige Studien besonders geeignet, weil sie es ermöglicht, in einem Lauf ein breites Frequenzspektrum von Lösungen auf einmal zu bestimmen. Die Resultate zeigen [4], daß bei geeignet gewählter Antennenlänge und Platzierung der Antennen nahe der Oberfläche des Wasserbolus der parasitäre Einfluß des MR-Tomographen auf den HT-Applikator minimiert werden kann. Dabei ist es möglich, die Felder beider Systeme zu entkoppeln und innerhalb des HT-Applikators die Anpassung der Antennen an die Generatoren zu gewährleisten.

HyperPlan wurde im März 1996 auf der CeBIT-Messe in Hannover und im April 1996 auf dem Hyperthermie-Weltkongress in Rom zum ersten Mal der internationalen Fachöffentlichkeit vorgestellt [8]. Das System ist dabei auf ein breites Interesse gestoßen. Aus den so geknüpften Kontakten ergab sich insbesondere eine enge Zusammenarbeit mit der Firma Dr. Sennewald/Medizin-Technik GmbH in München. Seit Oktober 1996 wird eine *kommerzielle Version* zusammen mit Hyperthermie-Applikatoren des amerikanischen Herstellers BSD Medical Corp. vertrieben. Im Zuge der Fortentwicklung werden mit Hilfe von HTML-Dokumenten und Java-Applets Online-Hilfefunktionen sowie interaktive Schritt-für-Schritt Anleitungen realisiert, siehe auch Abb. 1.

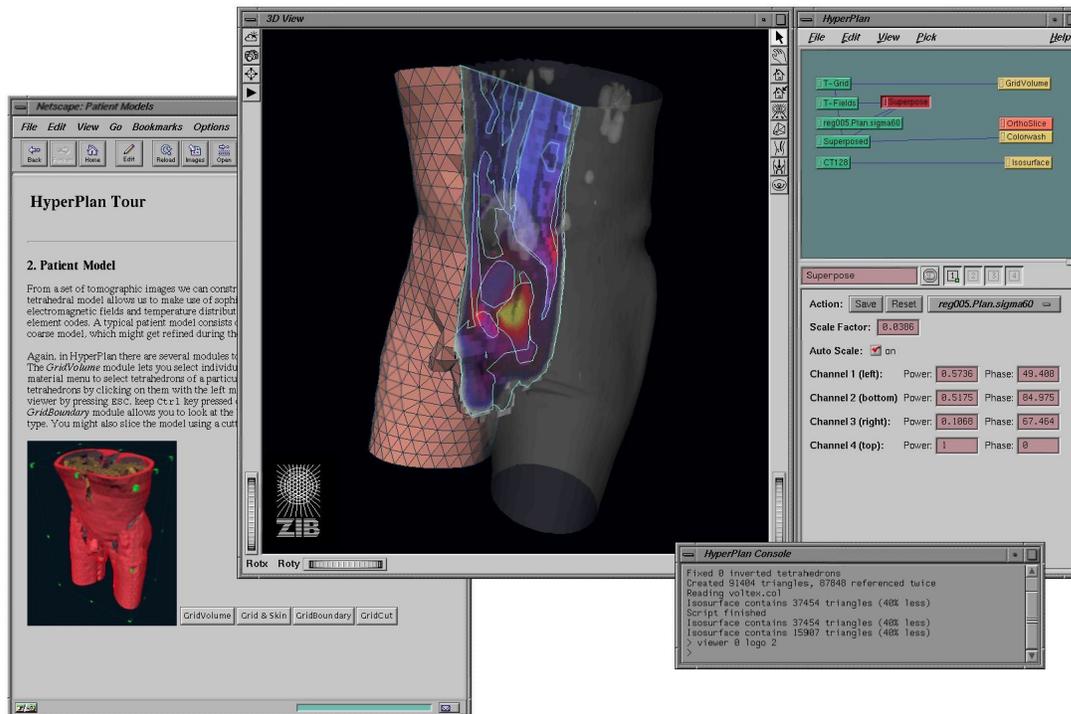


Abbildung 1: Oberfläche des medizinischen Planungssystems HyperPlan mit HTML-basiertem Hilfesystem, 3D Grafikfenster, Netzwerkkeditor und Kommandozeileingabe [2].

Ebenfalls auf der CeBIT-Messe in Hannover wurde HyperPlan bei der Einweihung des vom DFN-Verein eingerichteten, bundesweiten Breitband-Wissenschaftsnetzes (B-WIN) vorgeführt. In Anwesenheit von Bundesforschungsminister Rüttgers und hochrangiger Vertreter der Deutschen Telekom wurde eine Feldberechnung auf dem Höchstleistungs-Parallelrechner Cray T3D am ZIB gestartet und Daten on-line zur Darstellung nach Hannover übertragen. Die Feldberechnung wurde dabei mit einem parallelisierten FDTD-Code durchgeführt.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Die FDTD (finite differences time domain) Methode zur Lösung der Maxwell-Gleichungen in inhomogenen Medien wurde von J. Nadobny weiter verbessert. Insbesondere wurde mit D. Sullivan (University of Idaho) ein Interpolationsverfahren für die Umgebung von Grenzflächen entwickelt, das unerwünschte Grenzflächeneffekte erheblich reduziert [5].

In Kooperation mit verschiedenen medizinischen und mathematischen Arbeitsgruppen wurde analysiert, inwieweit die im Rahmen der Hyperthermie-Planung entwickelten Methoden für andere medizinische Fragestellungen eingesetzt werden können. Im Vordergrund der Überlegungen standen dabei die konformale Strahlentherapie und die Gynäkologie. Arbeiten zur 3D-Rekonstruktion von

Beckenregionen im Hinblick auf gynäkologische Fragen mündeten in einen Drittmittel-Antrag zum Thema „Simulation des Geburtsvorganges“, der gemeinsam mit der Gruppe K.-H. Hoffmann (TU München) gestellt wurde. Mit W. Schlegel (DKFZ Heidelberg) wurde ein gemeinsamer Workshop „Scientific Computing in der Medizin“ etwa für Sommer 1997 verabredet.

Publikationen

1. R. Beck, H.-C. Hege, M. Seebass, P. Wust, P. Deuffhard, R. Felix, *Adaptive Finite Element Codes for Numerical Calculations in Hyperthermia Treatment Planning*, Proc. 7th Int. Congress on Hyperthermic Oncology, Roma, Italy, April 1996, Vol. 2, pp. 515-517 (1996)
2. R. Beck, P. Deuffhard, H.C. Hege, M. Seebass, D. Stalling, *Mathematical Algorithms and Visualization in Medical Treatment Planning*, in: H.C. Hege, K. Polthier (Hg.), *Visualization and Mathematics*, Springer-Verlag (1997)
3. J. Nadobny, P. Wust, M. Seebass, P. Deuffhard, R. Felix, *A Volume-Surface Integral Equation Method for Solving Maxwell's Equations in Electrically Inhomogeneous Media Using Tetrahedral Grids*, IEEE Trans. Microwave Theory Tech., 44(4), pp. 543-554 (1996)
4. J. Nadobny, P. Wust, W. Wlodarczyk, M. Seebass, P. Deuffhard, G. Mönich, R. Felix, *Simulation Studies for Combination of Hyperthermia and Magnetic Resonance Systems*, Proc. 7th Int. Congress on Hyperthermic Oncology, Roma, Italy, April 1996, Vol. 2, pp. 549-551 (1996)
5. J. Nadobny, D. Sullivan, P. Wust, M. Seebass, P. Deuffhard, R. Felix, *A High Resolution Interpolation at Arbitrary Interfaces for the FDTD Method*, submitted to IEEE Trans. Microwave Theory Tech., 1996.
6. M. Seebass, D. Stalling, J. Nadobny, P. Wust, R. Felix, P. Deuffhard, *Three-Dimensional Finite Elements Mesh Generation for Numerical Simulations of Hyperthermia Treatments*, Proc. 7th Int. Congress on Hyperthermic Oncology, Roma, Italy, April 1996, Vol. 2, pp. 547-548 (1996)
7. D. Stalling, H.-C. Hege, *Intelligent Scissors for Medical Image Segmentation*, in B. Arnolds, H. Müller, D. Saupe, T. Tolxdorff (eds), *Tagungsband zum 4. Freiburger Workshop „Digitale Bildverarbeitung in der Medizin“*, Freiburg, 14.-15. März, 1996, pp. 32-36 (1996)
8. D. Stalling, M. Seebass, H.-C. Hege, P. Wust, P. Deuffhard, R. Felix, *HyperPlan - an integrated system for treatment planning in regional hyperthermia*, Proc. 7th Int. Congress on Hyperthermic Oncology, Roma, Italy, April 1996, **2**, 552-554 (1996)

9. P. Wust, M. Seebass, J. Nadobny, P. Deuffhard, G. Mönich, R. Felix, *Simulation Studies Promote Technological Development of Radiofrequency Phased Array Hyperthermia*, Int. Journal of Hyperthermia, **12**, 477–494 (1996)

2.2.9 Polyedrische Kombinatorik und Graphentheorie

Verfahren, welche auf polyedrischen Methoden beruhen, gehören heutzutage zu den effizientesten Algorithmen zur Behandlung diskreter Optimierungsprobleme. Aus nicht zuletzt diesem Grunde hat sich die Untersuchung neuartiger mathematischer Strukturen in der Polyedertheorie zu einem eigenständigen Forschungsgebiet entwickelt, siehe Projekte *Polyedertheorie für kombinatorische Optimierungsprobleme* und *Polyedrische Unterteilungen*. Häufig führt das Studium kombinatorischer Optimierungsprobleme zu Fragestellungen, welche mit Hilfe graphentheoretischer Konzepte formuliert und gelöst werden können. Umgekehrt erlaubt das Studium spezieller Klassen von Graphen in einigen Fällen Rückschlüsse auf polyedrische Beschreibungen gewisser kombinatorischer Probleme. Das Stabile-Mengen-Polytop für perfekte Graphen ist ein solches Beispiel, welches wir in diesem Zusammenhang untersuchen.

Polyedertheorie für kombinatorische Optimierungsprobleme

Bearbeitet von: N. Ascheuer, R. Borndörfer, A. Eisenblätter, M. Grötschel, A. Löbel, A. Martin, R. Wessäly, R. Weismantel

Kooperationspartner: C.E. Ferreira (Universität São Paulo, Brasilien), M. Fischetti (Universität Padua, Italien), M. Laurent (ENS, Frankreich), L.A. Wolsey (CORE, Belgien)

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

Die Polyedrische Kombinatorik beschäftigt sich mit dem Studium der konvexen Hülle der ganzzahligen Lösungen eines diskreten Optimierungsproblems, welches nach dem Weyl’schen Darstellungssatz durch ein System linearer Gleichungen und Ungleichungen beschrieben werden kann. Obwohl die Existenz einer solchen Beschreibung gesichert ist, ist sie für die meisten in der Praxis auftretenden diskreten Probleme unbekannt. Um polyedrische Methoden für solche Probleme einsetzen zu können, gilt es, Familien von linearen Ungleichungen zu finden, welche zumindest gültig bezüglich des untersuchten Polyeders sind. Besonderes Interesse gilt hierbei facetten-definierenden Ungleichungen, d.h. solchen, die maximale Seitenflächen des Polyeders definieren.

Die algorithmische Umsetzung der Polyedertheorie erfolgt in sogenannten Schnittebenenverfahren. Diese können, stark vereinfacht, als ein iterativer Prozeß beschrieben werden, in dem lineare Programme gelöst und um verletzte gültige Ungleichungen erweitert werden. Dieser Prozeß wird iteriert, bis eine Optimallösung gefunden wird, eine Güte der besten zulässigen Lösung garantiert werden kann, oder keine verletzten Ungleichungen mehr gefunden werden. Ein zentraler Teil des Algorithmus ist die effiziente Identifikation von verletzten gültigen Ungleichungen (Separierungsproblem).

Für spezielle Probleme, wie das Rundreiseproblem, das Steinerbaumproblem und

das Stabile-Mengen-Problem in Graphen, wird diese Methode bereits erfolgreich eingesetzt und führt zu der Lösung großer und schwieriger Problemebeispiele. Spezielle Untersuchungen, die in unserer Arbeitsgruppe durchgeführt werden, konzentrieren sich derzeit auf das Studium von Polyedern im Zusammenhang mit folgenden kombinatorischen Optimierungsproblemen:

- dem Problem, Wege oder Steinerbäume in einem Graphen zu packen oder zu finden [5, 6, 9],
- dem Rundreiseproblem mit Zeit- und/oder Präzedenzrelationen [1],
- dem Problem, Mengen zu packen, zu überdecken oder zu partitionieren [2],
- lineare und quadratische Rucksackprobleme [7, 14],
- Matrix-Dekompositionsprobleme und Graphenpartitionierungsprobleme unter Nebenbedingungen [3],
- dem Problem, simultan mehrere Flüsse zu packen (Multicommodity-Flow-Problem).

Neben der strukturellen Untersuchung der Polyeder steht insbesondere die Entwicklung und Implementierung von effizienten Branch&Cut-Algorithmen im Vordergrund unserer Arbeit. Hierzu sind z.B. für gegebene Klassen von Ungleichungen Separationsverfahren zu entwickeln. Für die angesprochenen Problemebeispiele konnten Prototypen implementiert werden, die anderen bekannten Verfahren bereits vergleichbar oder überlegen sind.

Polyedrische Unterteilungen

Bearbeitet von: J. Rambau.

Kooperationspartner: P. Edelman und V. Reiner (University of Minnesota, USA), G.M. Ziegler (Technische Universität Berlin).

Gegeben sei eine beliebige Konfiguration von Punkten im d -dimensionalen Euklidischen Raum. Eine *polyedrische Unterteilung* dieser Punktconfiguration bezeichnet die Zerlegung der konvexen Hülle dieser Menge in endlich viele Polytope, deren Ecken aus der Punktconfiguration stammen. Dabei müssen sich je zwei dieser Polytope in einer gemeinsamen Seite (leere Menge zugelassen) schneiden. Die verschiedenen polyedrischen Unterteilungen einer Punktconfiguration können z. B. per Verfeinerung teilweise geordnet werden. Das definiert über den *Simplizialkomplex aller Ketten* eine *topologische Struktur* auf der Menge aller polyedrischen Unterteilungen der Punktconfiguration.

Erkenntnisse über grundlegende topologische Eigenschaften dieser Menge (Zusammenhang, sphärischer Homotopietyp) sowie metrische Eigenschaften (Kardinalität, Durchmesser) werden z. B. für die Analyse effizienter *Unterteilungsalgorithmen mit Zielkriterien* in der algorithmischen Geometrie benötigt. Eine

besondere Bedeutung haben *Triangulierungen* (Zerlegungen in Simplexe) mit bestimmten Eigenschaften auch in den Finite-Elemente-Methoden.

Nachdem die Struktur der Mengen aller *regulären* Unterteilungen mittlerweile durch die Theorie der *Sekundärpolytope* von Gelfand, Kapranov und Zelevinsky (1991) gut verstanden ist, bleiben für die topologische Struktur der Menge *aller* Unterteilungen einer Punktconfiguration noch viele Fragen offen. In Dimensionen größer als zwei ist nicht einmal klar, ob man durch schrittweises Vergrößern und Verfeinern jede Unterteilung in jede Unterteilung transformieren kann, wenn man die triviale Unterteilung mit einem Element verbietet (Zusammenhang). Es existieren Punktconfigurationen, für die die Menge aller *induzierten* Unterteilungen (Unterteilungen, die nur Unterteilungsstücke benutzen, die Projektionen von Seiten eines auf die Punktconfiguration projizierenden Polytops sind) *nicht zusammenhängend* ist [10, 12].

In diesem Projekt soll der topologische Typ von Unterteilungsmengen *spezieller* Punktconfigurationen untersucht werden. Kandidaten sind die Eckenmengen von zyklischen Polytopen und Würfeln. Im ersten Fall gibt es ermutigende Vorarbeiten [4, 10, 11], die bereits Zusammenhang und — in Spezialfällen — sphärischen Homotopietyp garantieren.

Stabile Mengen und perfekte Graphen

Bearbeitet von: R. Borndörfer, M. Grötschel, A. Wagler.

Kooperationspartner: S. Hougardy (Humboldt-Universität zu Berlin).

Förderung: Leibniz-Preis der Deutschen Forschungsgemeinschaft, verliehen an M. Grötschel

Das Stabile-Mengen-Problem ist eines der kombinatorischen Optimierungsprobleme an der Schnittstelle zwischen Graphentheorie, Ganzzahliger Optimierung und Komplexitätstheorie: die Bestimmung von Stabilitätszahl und, damit eng verbunden, von Cliquenzahl und chromatische Zahl eines Graphen sind nicht nur von graphentheoretischem Interesse, sondern finden häufig als Modell für ganzzahlige Optimierungsprobleme Anwendung (siehe auch Projekte zur Frequenzzuweisung im Mobilfunk und zu Transportproblemen mit und ohne Echtzeitanforderungen [2]). Deshalb ist die Kenntnis von Graphenklassen von Bedeutung, für welche das Stabile-Mengen-Problem in polynomialer Zeit lösbar ist. Grötschel, Lovász und Schrijver bewiesen 1981 die Existenz eines solchen Algorithmus für perfekte Graphen. Diese Graphenklasse ist dadurch charakterisiert, daß Nicht-Negativitäts- und Cliquen-Ungleichungen für die Beschreibung des Stabile-Mengen-Polytops perfekter Graphen hinreichend sind. Trotz dieser bedeutenden Eigenschaft ist die Klasse der perfekten Graphen noch nicht vollständig verstanden, insbesondere ist nicht bekannt, ob ein Graph in polynomialer Zeit auf Perfektheit überprüft werden kann.

Unser Interesse gilt deshalb einerseits der graphentheoretischen Charakterisie-

rung perfekter Graphen, andererseits liegt ein Schwerpunkt unserer Forschungsarbeit in einer Erweiterung des polyedrischen Verständnisses des Stabile-Mengen-Problems über die Klasse der perfekten Graphen hinaus. Im einzelnen werden folgende Fragestellungen verfolgt:

- Identifikation neuer Unterklassen perfekter Graphen und Untersuchung des Problems deren Erkennbarkeit, siehe z.B. [8].
- Strukturelle Untersuchungen der Perfektheit in Grenzfallsituationen: Die Betrachtung minimal imperfekter Graphen hat gezeigt, daß diese sehr starke Eigenschaften besitzen (obwohl deren endgültige Charakterisierung, gleichbedeutend mit dem Beweis der Perfekte-Graphen-Vermutung von Berge, noch aussteht). Wir verfolgen das neue Konzept kritisch (bzw. antikritisch) perfekter Graphen, d.h. von Klassen perfekter Graphen, die durch Löschen (bzw. Hinzufügen) einer beliebigen Kante ihre Perfektheit verlieren, siehe [13].
- Beschreibung des Stabile-Mengen-Polytops allgemeiner Graphen, insbesondere imperfekter Graphen an der Grenze zur Perfektheit.

Publikationen

1. N. Ascheuer. *Hamiltonian Path Problems in the On-line Optimization of Flexible Manufacturing Systems*. Dissertation, Technische Universität Berlin, 1995. Erhältlich als ZIB Technical Report, TR 96-03
2. R. Borndörfer. *Set Partitioning and its Application to a Vehicle Routing Problem*. Dissertation, Technische Universität Berlin (1997) Erscheint in 1997.
3. R. Borndörfer, C. E. Ferreira und A. Martin. *Decomposing matrices into blocks*. ZIB Preprint, in Vorbereitung.
4. P. Edelman, V. Reiner und J. Rambau. *On the topological type of subdivision posets of cyclic polytopes*. Manuskript (1996)
5. M. Grötschel, A. Martin und R. Weismantel. *Packing steiner trees: a cutting plane algorithm and computational results*. *Mathematical Programming*, 72:125 – 145 (1996)
6. M. Grötschel, A. Martin und R. Weismantel. *Packing steiner trees: polyhedral investigations*. *Mathematical Programming*, 72:101 – 123 (1996)
7. C. Helmberg, F. Rendl und R. Weismantel. *Quadratic knapsack relaxations using cutting planes and semidefinite programming*. In W. H. Cunningham, S. T. McCormick und M. Queyranne, Editoren, *Integer Programming and Combinatorial Optimization*, Volume 1084 der *Lecture Notes in Computer Science*, Seiten 175–189. Springer Verlag (1996)

8. S. Hougardy, V. Le und A. Wagler. Wing-triangulated graphs are perfect. *Journal of Graph Theory*, 24(1):1–7 (1997)
9. T. Koch und A. Martin. Solving Steiner tree problems in graphs to optimality. ZIB Preprint SC 96–42
10. J. Rambau. *Projections of Polytopes and Polyhedral Subdivisions*. Berichte aus der Mathematik. Shaker, Aachen (1996) Dissertation, TU-Berlin.
11. J. Rambau. Triangulations of cyclic polytopes and higher Bruhat orders. Preprint 496/1996, Fachbereich Mathematik, TU-Berlin (1996) Erscheint in *Mathematika*.
12. J. Rambau und G. M. Ziegler. Projections of polytopes and the Generalized Baues Conjecture. *Discrete & Computational Geometry*, 16(3):215–237 (1996)
13. A. Wagler. On critically perfect graphs. ZIB Preprint SC 96–50, in Vorbereitung.
14. R. Weismantel. Hilbert bases and the facets of special knapsack polytopes. *Mathematics of Operations Research*, 21(4):886–904 (1996)

2.2.10 Algorithmen zur Lösung allgemeiner ganzzahliger Programme

Ein effizientes Verfahren zur Lösung allgemeiner ganzzahliger linearer Programme gibt es, nach derzeitiger wissenschaftlicher Überzeugung, nicht. Dennoch können viele praxisrelevante Probleme von allgemeinen Verfahren in vernünftiger Zeit gelöst werden. Der Erfolg dieser Algorithmen hängt wesentlich von der Fähigkeit ab, Struktureigenschaften von Problemen, oder Problemklassen, erkennen und ausnützen zu können. Mit dieser Aufgabenstellung beschäftigen wir uns im ersten der folgenden drei Teilprojekte. Nichtlineare Methoden, wie sie im zweiten Projekt beschrieben werden, dienen dabei zum einen zur Zusammenführung einzelner Teillösungen, zum anderen zur Erstellung besonders guter Relaxationen schwieriger Unterprobleme. Nicht zuletzt entscheidet die algorithmische Umsetzung auf modernsten Rechnerarchitekturen, der wir uns im dritten Projekt widmen, über den Erfolg der neu entwickelten Verfahren.

Dekompositionsmethoden für ganzzahlige und stochastisch ganzzahlige Programme

Bearbeitet von: R. Borndörfer, A. Martin, R. Schultz

Kooperationspartner: C.C. Carøe (Universität Kopenhagen, Dänemark)

Um allgemeine ganzzahlige Programme praktischer Größenordnungen lösen zu können, müssen häufig strukturelle Eigenschaften der zugrundeliegenden Nebenbedingungsmatrix erkannt und ausgenützt werden. Ein klassisches Beispiel hierfür ist die Verwendung von Kenntnissen für lineare 0/1 Rucksackprobleme (siehe auch Projekt "Schnittebenenverfahren für allgemein gemischt-ganzzahlige Programme"). In diesem Forschungsvorhaben erweitern wir diesen Gedanken und untersuchen Matrizen mit Blockstruktur. Dabei geht es im ersten Teilprojekt um die Frage, wie man für eine beliebig gegebene Matrix erkennt, ob sie Blockstruktur hat, und gegebenenfalls eine solche Zerlegung findet. Im zweiten Projekt werden Methoden zur Ausnutzung der für stochastische Programme typischen Blockstruktur entwickelt.

Dekomposition von Matrizen in Blöcke. Für eine gegebene Matrix A wird eine minimale Anzahl von Zeilen gesucht, bei deren Entfernung die Restmatrix in B Blöcke der Größe höchstens K zerfällt. Eine zulässige Lösung dieses Problems besteht aus einer Partitionierung R_0, R_1, \dots, R_B der Zeilen von A , $|R_i| \leq K$ für $i = 1, \dots, B$, so daß die Matrix mit Zeilen R_1, \dots, R_B Blockstruktur (mit Blöcken R_1, \dots, R_B) aufweist. Dieses Problem hat, wie eingangs erwähnt, Anwendungen in der ganzzahligen Programmierung. Wählt man für ein gegebenes Ungleichungssystem $Ax \leq b$ und eine Partitionierung R_0, R_1, \dots, R_B von A , je eine Zeile aus verschiedenen Elementen der Partition R_0, R_1, \dots, R_B , so ergibt sich eine Relaxierung des Systems $Ax \leq b$ in Form eines Multiple-Knapsack Problems. Kenntnisse über dessen Struktur können nun zur Lösung des Originalproblems

ausgenutzt werden. Darüber hinaus gibt es Anwendungen bei der Parallelisierung der LU-Faktorisierung, wie sie beispielsweise im Simplex-Verfahren vorkommt. Die Blöcke entsprechen hier den zur Verfügung stehenden Prozessoren. Als Kapazität K wählt man typischerweise $\frac{\text{Anzahl Zeilen}}{B}$, um eine gleichmäßige Auslastung der Prozessoren zu erzielen. Alle Zeilen eines Blocks können unabhängig von den anderen Blöcken zugewiesenen Zeilen faktorisiert werden. Lediglich die nicht zugeordneten Zeilen müssen abschließend sequentiell bearbeitet werden.

Zur Lösung des Matrix-Dekompositionsproblems verfolgen wir einen polyedrischen Ansatz. Wir haben das Matrixdekompositions-Problem als ganzzahliges Programm formuliert und die LP-Relaxierung durch einige neue Ungleichungen verschärft (dazu zählen die sog. Cover-, Kreis- und Cliques-Ungleichungen). Diese Ungleichungen bilden die Basis eines Schnittebenenalgorithmus (siehe auch Projekt “Polyedrische Kombinatorik und Graphentheorie”). Unsere Implementierung wurde an verschiedenen Beispielen der MIPLIB und der NETLIB getestet. Dabei ergab sich, daß die Optimallösung für Beispiele bis zu mittlerer Größenordnung in vernünftiger Zeit stets bestimmt werden konnte [2].

Stochastische Programme. Zufallsbehaftete Eingangsdaten in gemischt-ganzzahligen linearen Programmen lassen sich mittels Modellierungstechniken der stochastischen Optimierung erfassen. Diesen Modellen unterliegt ein Schema abwechselnder Beobachtung und Entscheidung. Die Modelle sind auf die Auswahl solcher nichtantizipativer (d.h. nicht die Kenntnis zukünftiger Beobachtungen voraussetzender) Entscheidungen gerichtet, daß der Erwartungswert einer resultierenden zufallsbehafteten Zielfunktion zum Optimum geführt wird. Für diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilungen der zufallsbehafteten Daten führt dieser allgemeine Modellansatz bei gemischt-ganzzahligen linearen Programmen auf hochdimensionale Probleme diesen Typs mit blockangularer Struktur. Jeder einzelne Block entspricht dabei dem Ausgangsproblem für eine Realisierung der zufallsbehafteten Daten. Typische Anzahlen für Realisierungen variieren zwischen mehreren hundert bis zu mehreren tausend. Die erwähnten Nichtantizipativitätsbedingungen verkoppeln schließlich die Blöcke miteinander.

In [3] wurde ein Dekompositionsverfahren für lineare gemischt-ganzzahlige stochastische Programme entwickelt, welches Lagrange Relaxation der Nichtantizipativitätsbedingungen mit Branch-and-Bound verbindet. Zur Lösung der konvexen nichtglatten Dualaufgaben wird ein proximales Subgradientenverfahren benutzt (NOA 3.0 von Kiwiel [7]). Die nach der Dekomposition entstehenden einander ähnlichen kleineren gemischt-ganzzahligen linearen Programme werden vorerst noch (jedesmal von neuem) mit dem CPLEX Mixed Integer Optimizer gelöst. Für den rein-ganzzahligen Fall laufen gegenwärtig Untersuchungen, hier Testmengen einzusetzen, wie sie im Projekt “Testmengen in der ganzzahligen Optimierung” studiert werden. Dies könnte zu einer Beschleunigung des Verfahrens führen, weil Information aus der vorausgegangenen Lösung ähnlicher Teilprobleme weiter genutzt werden kann.

Nichtlineare Methoden in der kombinatorischen Optimierung

Bearbeitet von: C. Helmberg, R. Schultz, R. Weismantel

Kooperationspartner: C.C. Carøe (Universität Kopenhagen, Dänemark), F. Rendl (Technische Universität Graz, Österreich)

Wir unterscheiden zwei Themenkreise, in denen nichtlineare Konzepte Eingang in die kombinatorische Optimierung finden. Zum einen bieten sich nichtlineare Verfahren als alternative Lösungsmethode zur (approximativen) Berechnung linearer Relaxationen an. Zum anderen eröffnen nichtlineare Methoden die Möglichkeit zum Entwurf bedeutend besserer Relaxationen, zu deren Lösung wir wiederum nichtlineare Verfahren einsetzen und entwickeln.

1. Lagrange Relaxation. Dem ersten Gebiet zugeordnet ist die klassische Lagrange Relaxation gemischt-ganzzahliger linearer Programme, die mittels Subgradientenverfahren gelöst wird. Im speziellen haben wir für stochastische Programme mit Ganzzahligkeitsforderungen ein Branch-and-Bound basiertes Lösungsverfahren entwickelt, bei dem die Schrankenbestimmung mittels Lagrange Relaxation erfolgt [3]. Durch die Aufnahme der koppelnden Nebenbedingungen in die Zielfunktion zerfällt das stochastische Programm in Teilprobleme, die den einzelnen Realisierungen der zugrundeliegenden diskreten Wahrscheinlichkeitsverteilungen entsprechen. Typischerweise erlauben Struktur und Größe der Teilprobleme, allgemeine Verfahren zu deren Lösung zu verwenden. Andererseits ist die Anzahl der Realisierungen meist so groß, daß leistungsfähige Löser für nichtglatte konvexe Programme einzusetzen sind. Unsere Implementierung benutzt den Code NOA 3.0 von Kiwiel, der auf einem proximalen Bundle-Verfahren beruht [7]. Insgesamt gesehen zählt das von uns entwickelte Verfahren für gemischt-ganzzahlige stochastische Programme zu den ersten in der Literatur veröffentlichten robusten Methoden für diese Problemklasse.

2. Semidefinite Relaxationen. Im zweiten Themenkreis beschäftigen wir uns mit semidefiniten Relaxationen kombinatorischer Probleme und deren algorithmischer Umsetzung. Semidefinite Programme verallgemeinern lineare Programme dahingehend, daß positiv semidefinite Matrixvariablen zugelassen werden. Viele Partitions- und Färbungsprobleme sowie quadratische 0/1-Programme mit Nebenbedingungen können äquivalent als lineare Programme über positiv semidefiniten Matrizen mit beschränktem Rang dargestellt werden. Läßt man die Rangbedingung fallen, erhält man eine semidefinite Relaxation.

Ein grundlegendes Problem beim Entwurf semidefiniter Relaxationen für quadratische 0/1-Programme mit Nebenbedingungen besteht darin, lineare Ungleichungen effizient in einen Raum höherer Dimension einzubetten. Für das quadratische Rucksackproblem konnten wir für drei kanonische Formulierungsarten eine Inklusionshierarchie der entsprechenden Relaxationen nachweisen. Als Verallgemeinerung der linearen Programmierung lassen sich auch semidefinite Relaxationen gut durch Schnittebenen verbessern. Dabei stellt sich ebenso die Frage nach möglichst

wirksamen Schnittebenen in Hinblick auf die gewählte semidefinite Grundmenge. Erste Antworten zu diesem Problemkreis finden sich in [6] (siehe auch Projekt “Polyedertheorie für kombinatorische Optimierungsprobleme”).

Zur Berechnung semidefiniter Relaxationen verwenden wir den Innere-Punkte-Algorithmus aus [5]. Da der Aufwand zur Lösung semidefiniter Programme mittels Innere-Punkte-Methoden stark mit der Dimension wächst, gewinnt für Branch-and-Bound-Verfahren die Frage an Bedeutung, ob anhand der Dualvariablen frühzeitig Variable fixiert werden können. Das aus der linearen Programmierung bekannte Verfahren der reduzierten Kostenfixierung ist nicht unmittelbar anwendbar, da die entsprechenden Ungleichungen in der semidefiniten Relaxation oft nicht explizit enthalten sind. In [4] entwickeln wir ein neues Verfahren zur Fixierung von Variablen für eine Klasse von Semidefiniten Programmen, zu der auch die kanonische MAX-CUT-Relaxation gehört. Mittels einer Transformation, die Dualvariablen und Struktureigenschaften erhält, läßt sich dieses Verfahren auch auf semidefinite Relaxationen quadratischer 0/1-Probleme anwenden.

Auch wenn damit die wichtigsten Vorarbeiten zur Entwicklung eines allgemeinen Verfahrens zur Lösung quadratischer 0/1-Probleme mit Nebenbedingungen geleistet zu sein scheinen, ist das Lösen praktisch interessanter Größenordnungen noch in weiter Ferne. Den Engpaß bildet dabei der hohe Rechenaufwand, der mit dem Lösen der semidefiniten Programme mittels Innere-Punkte-Methoden verbunden ist. Es sind zur Zeit keine Innere-Punkte-Verfahren bekannt, die es erlauben, Struktureigenschaften der Kostenmatrix auszunützen. Deshalb arbeiten wir an der Entwicklung anderer Verfahren zur approximativen Lösung der semidefiniten Relaxationen. Diese beruhen auf der Beobachtung, daß sich die meisten semidefiniten Relaxationen kombinatorischer Probleme äquivalent als extremale Eigenwertoptimierungsaufgaben darstellen lassen. Eigenwertprobleme sind nichtglatte konvexe Optimierungsaufgaben, die mit Subgradientenverfahren gelöst werden können. Subgradienten bestimmen sich aus den Eigenvektoren zu den extremalen Eigenwerten. Die zur Berechnung der Eigenvektoren eingesetzten Lanczos-Algorithmen erlauben es, die Struktur des Problems auszunützen. Da eine laufende Verbesserung der Relaxation durch Schnittebenen erfolgt, verändert sich die Zielfunktion ständig. Aus diesem Grund sind allgemein verfügbare Lösungsalgorithmen zur nichtglaten Optimierung nicht einsetzbar. Erste Experimente mit dem neuen Verfahren zeigen ab etwa 100 binären Variablen deutlich schnellere Laufzeiten bei nur leichtem Verlust an Qualität der Schranke im Vergleich zum Innere-Punkte-Verfahren.

Schnittebenenverfahren für allgemein gemischt-ganzzahlige Programme

Bearbeitet von: M. Grammel, A. Martin, R. Weismantel, R. Wunderling

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

Förderung: Cray Research, Inc. (USA)

Ziel dieses langfristig angelegten Projekts ist die Lösung gemischt-ganzzahliger linearer Programme. Ein Schlüssel zu diesem Ziel ist die schnelle Lösung der zugrundeliegenden linearen Programme. Dabei wurden in den vergangenen Jahren große Fortschritte erzielt (siehe z. B. CPLEX und OSL). Trotzdem erscheint es nach wie vor notwendig, die Lösungsverfahren für lineare Programme zu beschleunigen, insbesondere für solche linearen Programme, die bei Anwendungen in der Ganzzahligen Optimierung und in der Kombinatorischen Optimierung vorkommen. Eine Möglichkeit dazu besteht in der Nutzung von Parallelrechnern.

Simplex-Algorithmen für Parallelrechner. 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 solche 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.

Die Parallelisierung erstreckt sich von Operationen auf dünnbesetzten Matrizen über Suchalgorithmen beim Pricing und Ratio-Test bis hin zum sog. "Block-Pivoting". Dabei handelt es sich um ein neues Verfahren, bei dem mehrere sequentielle Iterationen zu einer parallelen zusammengefaßt werden.

DoPlex und SMOplex folgen einem objektorientierten Softwareentwurf und basieren auf einer gemeinsamen Basis(-klasse). Diese Basis ist SoPlex, ein sequentieller Simplex-Algorithmus, der inzwischen mit den besten Codes durchaus konkurrenzfähig ist [10].

Parallelisierung des dualen Simplex-Verfahrens. Das duale Simplexverfahren ist für die Kombinatorische Optimierung von besonderer Bedeutung, da es häufig in Schnittebenenverfahren zur Lösung ganzzahliger Programme verwendet wird. Auf Basis der sequentiellen Implementierung von CPLEX wurden in [1] drei verschiedene parallele Implementierungen untersucht. Eine verwendet PVM, eine die Unix System V Shared-Memory Interprozeßkommunikationsbibliothek, und eine die PowerC Erweiterung von C für Silicon Graphics Mehrprozessor-Rechner. Diese Versionen wurden auf unterschiedlichen parallelen Plattformen getestet: auf Workstation Cluster, auf einer Sun S20-502, auf einem Silicon Graphics Mehrprozessor-Rechner und auf einer IBM SP2. Mit PVM konnte nur bei Beispielen, für die das Verhältnis Anzahl Zeilen zu Anzahl Spalten sehr groß ist, eine Beschleunigung erzielt werden. PVM scheint somit nur geeignet für Probleme,

deren Speicherplatzanforderung für einen einzelnen Rechner zu groß sind. Die System V Shared-Memory Version war gegenüber der PVM-Version wesentlich besser, wenngleich auch hier oft nicht die gewünschten Laufzeitverbesserungen erzielt werden konnten. Die besten Ergebnisse wurden mit der PowerC-Version von Silicon Graphics erreicht. Sie bestätigen bis auf wenige Ausnahmen die Erwartungen.

Objektorientierte Klassenbibliothek für Branch-and-Cut. Neben der schnellen Lösung linearer Programme wird in einem weiteren Projekt 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 Schnittebenen-Codes für Set-Partitioning Probleme (ein Problem, das häufig bei gemischt-ganzzahligen Programmen als Unterproblem auftritt) verschiedene sequentielle und parallele B&C-Versionen 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.

Schließlich wurde damit begonnen, erste Komponenten für einen Code zur Lösung allgemein gemischt-ganzzahliger Programme zu schreiben. Dazu zählt einerseits das "Preprocessing". In diesem Schritt wird versucht, redundante Information in der Problembeschreibung zu finden, zu eliminieren und durch logische Implikationen die Formulierung zu verschärfen. Ein Vergleich mit state-of-the-art Software wie CPLEX zeigt, daß unser Preprozessor gute Ergebnisse erzielt.

Desweiteren wurden Kenntnisse über das Rucksackpolyeder integriert [8, 9]. Dazu fassen wir jeweils eine Ungleichung, die auch durch Aggregation mehrerer Ungleichungen gebildet werden kann, als eine Rucksack-Bedingung auf und versuchen daraus verletzte Rucksack-Ungleichungen abzuleiten. Der Erfolg dieser Vorgehensweise wurde an MIPLIB Problemen getestet. Für einige praktische Probleme konnten beachtliche Erfolge erzielt werden.

Publikationen

1. R. E. Bixby und A. Martin. Parallelizing the dual simplex method. ZIB Preprint, SC 95–45
2. R. Borndörfer, C. E. Ferreira und A. Martin. Decomposing matrices into blocks. ZIB Preprint, in Vorbereitung.
3. C. C. Carøe und R. Schultz. Dual decomposition in stochastic integer programming. ZIB Preprint, SC 96–46
4. C. Helmberg. Fixing variables in semidefinite relaxations. ZIB Preprint, SC 96–43
5. C. Helmberg, F. Rendl, R. J. Vanderbei und H. Wolkowicz. An interior–point method for semidefinite programming. *SIAM J. Opt.*, 6(2):342–361 (1996)
6. C. Helmberg, F. Rendl und R. Weismantel. Quadratic knapsack relaxations using cutting planes and semidefinite programming. In W. H. Cunningham, S. T. McCormick und M. Queyranne, Editoren, *Integer Programming and Combinatorial Optimization*, Volume 1084 der *Lecture Notes in Computer Science*, Seiten 175–189. Springer Verlag (1996)
7. K. C. Kiwiel. Proximity control in bundle methods for convex nondifferentiable minimization. *Mathematical Programming*, 46:105–122 (1990)
8. R. Weismantel. On the 0/1 knapsack polytope. ZIB Preprint, SC 94–01. Erscheint in *Mathematical Programming*.
9. R. Weismantel. Hilbert bases and the facets of special knapsack polytopes. *Mathematics of Operations Research*, 21(4):886–904 (1996)
10. R. Wunderling. Paralleler und objektorientierter Simplex. ZIB Technical Report, TR 96–09 (1996)

2.2.11 Zahlentheoretische und geometrische Methoden

Ganzzahlige Optimierung ist eng verbunden mit der Geometrie der Zahlen, der Konvexgeometrie, der Algebra und der Zahlentheorie. In diesem Grundlagenprojekt werden verschiedene neuere Methoden und Resultate dieser mathematischen Disziplinen im Hinblick auf ihre Anwendbarkeit in der Ganzzahligen Optimierung untersucht. Die Schwerpunkte dieses Projekts lassen sich den folgenden Themenkreisen zuordnen:

- Algorithmische Fragestellungen aus der Geometrie der Zahlen,
- Minimale Erzeugendensysteme und Testmengen,
- Packungen und Überdeckungen konvexer Körper.

Geometrie der Zahlen

Bearbeitet von: M. Henk, R. Weismantel

Kooperationspartner: D.I. Dais (Universität Bonn), R. Firla und G.M. Ziegler (Technische Universität Berlin)

Förderung: Leibniz-Preis der Deutschen Forschungsgemeinschaft, verliehen an M. Grötschel

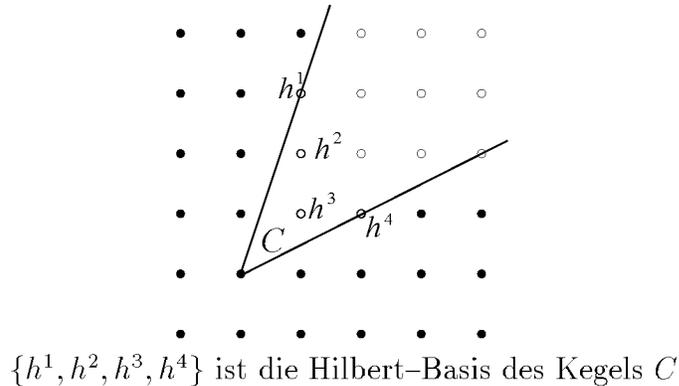
Die klassische Geometrie der Zahlen bildet eine Brücke zwischen Konvexität, Diophantischer Approximation und der Theorie der quadratischen Formen (Gitterpackungen von Kugeln). Heutzutage ist sie ein unabhängiges Forschungsgebiet mit engen Beziehungen zu diversen anderen Gebieten der Mathematik, wie z.B. Kodierungstheorie und Ganzzahlige lineare Optimierung. Unser Hauptinteresse gilt den folgenden Problemen:

Konvexe Körper und Gitterpunkte. Das Studium von geometrischen Eigenschaften konvexer Körper, die keinen Gitterpunkt im Inneren besitzen, gehört zu den grundlegenden Problemen der Geometrie der Zahlen. In [2] konnten wir bestmögliche Ungleichungen für solche Körper angeben, die das Volumen bzw. die Oberfläche mit dem Inkugelradius verbinden. Der sogenannte zweite Fundamentalsatz von Minkowski über sukzessive Minima beschreibt eine Beziehung zwischen den sukzessiven Minima und dem Volumen eines 0-symmetrischen konvexen Körpers [14]. Hier stellt sich das Problem, eine analoge Beziehung zwischen den sukzessiven Minima und der Anzahl der Gitterpunkte eines Körpers zu beweisen. Dies würde insbesondere zu einer Verallgemeinerung des Satzes von Minkowski führen.

Algorithmische Aspekte. Ein zentrales Problem ist die algorithmische Bestimmung eines kürzesten (nicht trivialen) Vektors in einem gegebenem Gitter. Es ist nicht bekannt, ob dieses Problem \mathcal{NP} -schwer ist, etwa bzgl. der euklidischen Norm. In [15] konnten wir zeigen, daß sich dieses Problem für eine große Familie von Normen polynomial reduzieren läßt auf das Problem, einen nächsten

Gittervektor zu einem beliebigen Punkt zu finden. Unser gegenwärtiges Forschungsinteresse gilt hier der allgemeinen Fragestellung: Wie „gut“ lassen sich bestimmte Größen aus der Geometrie der Zahlen (z.B. inhomogenes Minimum, Packungsdichte konvexer Körper) algorithmisch bestimmen?

Hilbert-Basen. Die Geometrie von minimalen Erzeugendensystemen (Hilbert-Basen) rationaler (punktierter) Kegel ist bisher nur unzureichend verstanden, obwohl die Berechnung solcher Basen von zentraler Bedeutung für Testmengen-Algorithmen in der Ganzzahligen linearen Optimierung ist, siehe auch Projekt Testmengen in der Ganzzahligen Optimierung. In [16] studieren wir sowohl geo-



metrische Eigenschaften als auch algorithmische Aspekte von Hilbert-Basen. Insbesondere geben wir dort eine bestmögliche obere Schranke für die sogenannte Höhe von Elementen der Hilbert-Basis an und zeigen, daß in fester Dimension eine Hilbert-Basis in output-polynomialer Zeit gefunden werden kann. Jedoch ist hier noch viel Grundlagenarbeit zu leisten. Einerseits sind wir daran interessiert, für spezielle Kegel, die zu gewissen Optimierungsproblemen korrespondieren, möglichst gute Algorithmen zur Berechnung der Hilbert-Basis zu finden. Andererseits suchen wir nach geometrischen Eigenschaften, die diese Basen charakterisieren. So wird z.B. vermutet, daß Hilbert-Basen die Carathéodory Eigenschaft besitzen, d.h. jeder ganzzahlige Punkt in einem d -dimensionalen Kegel kann als nicht negative ganzzahlige Linearkombination von höchstens d Elementen der Hilbert Basis dargestellt werden.

Hilbert Basen sind auch eng verbunden mit dem Problem „gute“ Triangulierungen eines rationalen Kegels zu finden, d.h. solche, die gewissen Auflösungen torischer Varietäten entsprechen. Hier beschäftigen wir uns zum einen mit nicht-diskrepanten Auflösungen von 3-dimensionalen kanonischen torischen Singularitäten, und zum anderen untersuchen wir die Existenz von nicht-diskrepanten Auflösungen Gorensteinscher Quotientensingularitäten in Dimensionen ≥ 4 .

Testmengen in der Ganzzahligen Optimierung

Bearbeitet von: M. Henk, A. Martin, R. Schultz, R. Urbaniak, R. Weismantel

Kooperationspartner: G. Cornuejols (CMU, USA), R. Thomas (Texas A & M, USA), L. Wolsey (CORE, Belgien), G. M. Ziegler, A. Schulz (Technische Universität Berlin)

Förderung: Graduiertenkolleg “Algorithmische Diskrete Mathematik” gefördert durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft; Leibniz-Preis der Deutschen Forschungsgemeinschaft, verliehen an M. Grötschel

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. Zur Lösung solcher Problemstellungen gibt es grundlegende Verfahren: einerseits Gitterreduktionsmethoden, andererseits Verfahren, die Testmengen für ganzzahlige Programme konstruieren.

Eine Testmenge eines ganzzahligen Programms ist eine endliche Menge von Vektoren, so daß jeder nicht optimale, zulässige Punkt des Programms durch Addition eines Elements aus der Testmenge verbessert werden kann. In der Literatur sind mehrere Arten von Testmengen bekannt, die, unter anderem, davon abhängen, in welcher Form das Ausgangsproblem gegeben ist. Zu erwähnen sind an dieser Stelle die Graver-Testmenge [11], Nachbarschaftssysteme [17] und die reduzierte Gröbner-Basis [7].

In den letzten Jahren gab es eine Reihe von Ergebnissen, die aufzeigen, daß das Studium von Testmengen ein vielversprechendes Forschungsthema ist. Dies soll im folgenden dargestellt werden.

Testmengen für ganzzahlige Programme definieren Erzeugendensysteme für die ganzzahligen Punkte in gewissen Kegeln. Diese Erzeugendensysteme spielen eine wichtige Rolle in verschiedenen Gebieten der Algebra, der Zahlentheorie, der Kombinatorik und der Geometrie. Beispielsweise konnte in [19] ein Zusammenhang aufgezeigt werden zwischen kurzen Vektoren in Gittern, zwischen dem gruppentheoretischen Ansatz in der Ganzzahligen Optimierung und dem Studium von Testmengen. Ferner lassen sich Verfahren zur Berechnung von Testmengen algebraisch interpretieren. So führte eine algebraische Interpretation des Verfahrens in [22] zu dem Begriff eines abgeschnittenen Ideals, welcher in [20] eingeführt wurde.

In [12, 18] 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 beliebige ganzzahlige Programme zu verallgemeinern.

Die bisher bekannten Algorithmen zur Berechnung einer Testmenge sind nicht geeignet zur Behandlung von großen Problemen. Ein Ansatz, um in dieser Rich-

tung Fortschritte zu erreichen, besteht in der Verwendung von Dekompositionsmethoden für ganzzahlige Programme. Solche Dekompositionsmethoden in Verbindung mit Verfahren zur Skalierung von Daten und der impliziten Behandlung von Teilen einer Testmenge ergeben für eine Reihe von ganzzahligen Programmen erhebliche Verbesserungen. Ferner ermöglichen solche Ideen, gute und schnelle Heuristiken für die Ganzzahlige Optimierung zu entwerfen, siehe [9].

Ein Schwerpunkt künftiger Arbeiten wird darauf gelegt, für bestimmte diskrete Optimierungsprobleme polynomiale Augmentierungsalgorithmen zu entwerfen, welche auf dem Studium von Testmengen beruhen. Ein erster Schritt in diese Richtung findet sich in [21].

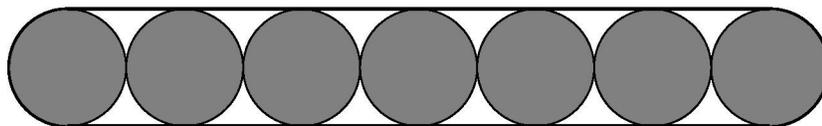
Packungen und Überdeckungen konvexer Körper

Bearbeitet von: M. Henk

Kooperationspartner: U. Betke und J.M. Wills, Universität-GH Siegen

Förderung: Graduiertenkolleg "Algorithmische Diskrete Mathematik" gefördert durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft, Leibniz-Preis der Deutschen Forschungsgemeinschaft, verliehen an M. Grötschel

In [4] and [5] beschreiben wir einen neuen Zugang zu den klassischen Problemen endlicher und unendlicher (Gitter)-Packungen und (Gitter)-Überdeckungen von Translaten konvexer Körper. Dieser neue Ansatz beruht auf der Einführung von parametrische Dichten, die eine Fülle von interessanten Eigenschaften und Anwendungen besitzen. So konnte unter Verwendung dieser Dichten die „Wurstvermutung“ von L. Fejes Tóth in Dimensionen ≥ 42 bestätigt werden [3, 6].



„Wurst“-förmige Anordnung von 7 Kreisen.

Basierend auf parametrischen Dichten konnte eine einheitliche Theorie für endliche und unendliche Packungs- oder Überdeckungsprobleme entwickelt werden. Diese Theorie ermöglicht es, z.B. die Dichte einer dichtesten unendlichen (Gitter)-Packung mittels der parametrischen Dichten endlicher (Gitter)-Packungen abzuschätzen. Neben der Weiterentwicklung der allgemeinen Theorie über parametrischen Dichten soll in Zukunft ein Schwerpunkt unserer Forschungsaktivitäten auf den Zusammenhang zwischen endlichen und unendlichen Dichten gelegt werden.

Endliche und unendliche Gitterpackungen. In [13] konnten wir zeigen, daß der sogenannte kritische Parameter endlicher Gitterpackungen kleiner als 3 ist. Unser Ziel ist es, die Schranke 2 zu beweisen. Dieses Resultat würde einen neuen

Beweis der klassischen Minkowski-Hlawka-Schranke darstellen, jedoch nun mit Hilfe endlicher Gitterpackungen. Daher hoffen wir, daß dieser Zugang zu neuen Einsichten in das Mysterium unendlicher Gitterpackungen führt.

Kristallwachstum. Die parametrische Dichte liefert mathematisch elegante Modelle zur Beschreibung von Kristallwachstum, die physikalisch gleichwertig sind zu den klassischen Modellen von Gibbs-Curie-Wulff und Kossel-Stranski [1], [23]. Bei kleinen Kugel- (Atom-) Zahlen haben Physiker und Kristallographen mit aufwendigen Computerprogrammen die optimalen Cluster-Packungen von bis zu 1000 Kugeln bestimmt. Diese Cluster sind für die moderne Physik und Technik interessant, und die Dichte wird nach dem Lennard-Jones-Potential bestimmt. Mit einem anderen Potential haben Conway et al. (optimale) Cluster bestimmt, die in der Kodierungstheorie eine Rolle spielen [8]. Erste Stichproben bei der parametrischen Dichte deuten auf Übereinstimmung mit den optimalen Clustern bzgl. des Lennard-Jones-Potentials hin [23]. Unser gegenwärtiges Interesse gilt hier einer computergestützten systematischen Untersuchung der optimalen Cluster bzgl. der parametrischen Dichte.

Publikationen

1. V. Arhelger, U. Betke und K. Böröczky Jr. Large finite lattice packings. Preprint 278, Universität-GH Siegen (1996)
2. P. W. Awyong, M. Henk und P. R. Scott. Note on lattice-point-free convex bodies. ZIB Preprint, SC 96-44, erscheint in Monatshefte Mathematik
3. U. Betke und M. Henk. Finite packings of spheres. Technical Report 465, TU Berlin, 1995. Erscheint in *Discrete Comput. Geom.* (1996)
4. U. Betke, M. Henk und J. M. Wills. Finite and infinite packings. *J. reine angew. Math.*, 453:165-191 (1994)
5. U. Betke, M. Henk und J. M. Wills. A new approach to covering. *Mathematika*, 42:251-263 (1995)
6. U. Betke, M. Henk und J. M. Wills. Sausages are good packings. *Discrete Comput. Geom.*, 13:297-311 (1995)
7. P. Conti und C. Traverso. Buchberger algorithm and integer programming. In *Proceedings AAECC-9*, Seiten 130-139, New Orleans (1991) Springer LNCS 539
8. J. H. Conway, T. D. S. Duff, R. H. Hardin und N. J. A. Sloane. Minimal energy clusters of hard sphere. *Discrete Comput. Geom.*, 14:237-260 (1995)
9. G. Cornuejols, R. Urbaniak, R. Weismantel und L. Wolsey. Decomposition of integer programs and of generating sets. ZIB Preprint, in Vorbereitung

10. R. Graham, M. Grötschel und L. Lovász, Editoren. *Handbook of Combinatorics*. Elsevier Science B.V., Amsterdam (1995)
11. J. E. Graver. On the foundations of linear and integer programming I. *Mathematical Programming*, 8:207–226 (1975)
12. M. Grötschel und L. Lovász. Combinatorial optimization. In Graham et al. [10], chapter 28.
13. M. Henk. Finite and infinite packings (1995) Habilitationsschrift, Universität-GH Siegen.
14. M. Henk. Minkowski's second theorem on successive minima. Technical report, TU Berlin (1995)
15. M. Henk. Note on shortest and nearest lattice vectors. Technical Report 430, TU Berlin (1995) erscheint in Inform. Process. Lett.
16. M. Henk und R. Weismantel. On minimal generating systems of integral polyhedral cones. ZIB Preprint, SC 96–12
17. H. E. Scarf. Neighborhood systems with production sets with indivisibilities. *Econometrica*, 54:507–532 (1986)
18. A. Schulz, R. Weismantel und G. M. Ziegler. 0/1 integer programming: optimization and augmentation are equivalent. In P. Spirakis, Editor, *Algorithms-ESA95*, Lecture Notes in Computer Science 979, Seiten 473–483. Springer-Verlag (1995)
19. B. Sturmfels, R. Weismantel und G. M. Ziegler. Gröbner bases of lattices, corner polyhedra and integer programming. *Beiträge zur Geometrie und Algebra*, 36:281–298 (1995)
20. R. Thomas und R. Weismantel. Truncated Gröbner bases for integer programming. ZIB Preprint SC 95–9, erscheint in *Applicable Algebra in Engineering, Communication and Computing*.
21. R. Thomas und R. Weismantel. Test sets and inequalities. In W. H. Cunningham, S. T. McCormick und M. Queyranne, Editoren, *Integer Programming and Combinatorial Optimization*, Volume 1084 der *Lecture Notes in Computer Science*, Seiten 16–30. Springer Verlag (1996)
22. R. Urbaniak, R. Weismantel und G. M. Ziegler. A variant of Buchberger's algorithm for integer programming. ZIB Preprint, SC 94–29, erscheint in *SIAM Journal on Discrete Mathematics*.
23. J. M. Wills. Lattice packings of spheres and the Wulff-shape. *Mathematika*, 86:229–236 (1996)

2.2.12 Transportprobleme mit und ohne Echtzeitanforderungen

Transportprobleme fragen nach der Beförderung von Personen oder Gütern durch effizienten Einsatz von Transportmitteln. In etwas weiterem Sinne umfaßt diese Klasse auch die Planung von Verkehrsinfrastruktur. Transportprobleme haben in der Vergangenheit eine wichtige Rolle bei der Entwicklung der Diskreten Mathematik, der Optimierung und des Operations Research gespielt; zur Geschichte von Transportproblemen siehe auch [5].

Heute geht ein bedeutender Trend in der angewandten Optimierung in Richtung einer mathematischen Behandlung *komplexer realer Transportsysteme*. Als Fernziel sehen wir etwa die Optimierung der operativen Planung eines Nahverkehrsunternehmens einer Großstadt oder der Steuerung des Materialflusses in einer Fabrik an. Ein gemeinsames Kennzeichen solcher Planungsprobleme ist ihre Vielschichtigkeit, die in der Praxis zu einer hierarchischen Planung in mehreren aufeinanderfolgenden Stufen führt. In der operativen Planung im ÖPNV folgt etwa auf die Linienplanung die Erstellung des Fahrplanes, auf diesem Ergebnis aufbauend erfolgt die Fahrzeugumlaufplanung und so fort. Die Resultate eines solchen Prozesses sind um so unbefriedigender, je kleiner jedes Teilproblem ist. Ein zweites typisches Kennzeichen ist das Auftreten komplexer Nebenbedingungen wie etwa arbeitsrechtlicher Bestimmungen. Solche Bedingungen führen dazu, daß viele Planer der Meinung sind, komplexe Transportprobleme seien einer mathematischen Behandlung nicht zugänglich — und das trotz oft sowohl planerisch als auch finanziell enormer Problemgrößen und unüberschaubarer kombinatorischer Komplexität.

Wir untersuchen zwei Klassen von Transportproblemen, die sich in der Verfügbarkeit der Daten unterscheiden. Bei der Fahrplanerstellung im ÖPNV liegen zum Entscheidungszeitpunkt alle Daten vor — ein Beispiel eines *Off-Line-Problems*. Bei *On-Line-Problemen* dagegen erzwingen unvorhersehbare Änderungen der Daten eine andauernde Reoptimierung des Systems in Echtzeit. Solche Anforderungen entstehen zum Beispiel in flexiblen Fertigungssystemen durch das Auftreten von Störungen oder Generierung und Stornierung von Aufträgen [1]. Allgemein sind Echtzeitprobleme durch Entscheidungszwang bei unvollständiger Information gekennzeichnet.

Wir verfolgen das Ziel, komplexe Transportprobleme zu modellieren, zu simulieren und mathematische Methoden zu ihrer Lösung zu entwickeln. Im Off-Line-Fall bedeutet dies, in vertretbarer Rechenzeit optimale oder wenigstens beweisbar gute Lösungen zu finden. Für in Echtzeit arbeitende On-Line-Verfahren ist bereits das Problem der sinnvollen Bewertung der Lösungsqualität Gegenstand der Forschung. Ein Konzept, das wir gegenwärtig verfolgen, ist die A-Posteriori-Analyse, bei der das On-line erreichte Resultat mit dem Ergebnis einer Off-Line-Optimierung verglichen wird, die man hätte vornehmen können, wenn man von Anfang an alle Daten gekannt hätte. Im On-Line- wie im Off-Line-Fall führt die-

ser Ansatz zusammen mit der Bestrebung, möglichst große Teile des tatsächlichen Planungsprozesses adäquat abzubilden, zwangsläufig zur Bearbeitung großer mathematischer Modelle. Diese müssen die realen Nebenbedingungen korrekt abbilden und — innerhalb gewisser Grenzen — zusätzlich flexibel in Bezug auf mögliche Änderungen sein. Da die Unteilbarkeit von Gütern oder Transportmitteln häufig die Behandlung ganzzahliger Größen erfordert, entwickeln und verwenden wir Methoden der Ganzzahligen Optimierung. Gegenwärtig bearbeiten wir zwei Probleme im Bereich ÖPNV mit Off-Line-Ansätzen: *Fahrzeugumlaufplanung* und *Fahrzeugeinsatzplanung im Behindertentransport*. On-Line-Verfahren entwickeln wir im Bereich flexibler Fertigungssysteme zur *Echtzeitsteuerung automatischer Transportsysteme*.

Optimierung der Fahrzeugumlaufplanung im öffentlichen Nahverkehr

Bearbeitet von: M. Grötschel, A. Löbel

Kooperationspartner: Berliner Verkehrsbetriebe (BVG), HanseCom GmbH (Hamburg), IVU GmbH (Berlin)

Förderung: Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie

Ausgangspunkt der Fahrzeugumlaufplanung sind eine Menge von Fahrgastfahrten, die das Ergebnis der vorgeschalteten Linienplanung und Fahrplanerstellung sind. Eine Fahrgastfahrt beginnt und endet in der Regel an einer Linienendhaltestelle und muß mit einem Fahrzeug eines geeigneten Typs durchgeführt werden. Die Aufgabe der Fahrzeugumlaufplanung besteht darin, diese Fahrgastfahrten so zu Umläufen zu verketteten, daß jede Fahrt mit einem geeigneten Fahrzeug durchgeführt wird und die Umläufe einer Reihe von Bedingungen genügen, etwa daß Start und Endpunkt am gleichen Depot sein müssen. Minimiert werden sollen die Anzahl der Fahrzeuge und nachgeordnet die operativen Kosten.

Das Fahrzeugumlaufplanungsproblem ist ein Off-Line-Problem. Zu seiner Lösung verfolgen wir einen auf einem Multi-Commodity-Flow-Modell basierenden Ansatz. Im Gegensatz zu älteren Verfahren in diesem Bereich wird das Umlaufplanungsproblem nicht in Teilprobleme zerlegt oder lokal bearbeitet, sondern global betrachtet, um alle Freiheitsgrade nutzbar zu machen. Die Umlaufplanungsprobleme unserer Kooperationspartner in Hamburg und Berlin mit bis zu 25.000 Fahrgastfahrten führen dabei zu ganzzahligen linearen Programmen mit bis zu 70 Millionen Variablen. Diese Probleme bearbeiten wir mit LP- und Lagrange-Techniken, wobei die implizite Behandlung des Großteils der Variablen mit Hilfe von Column-Generation-Techniken sowie die Ausnutzung von Netzwerkflußstrukturen des Multi-Commodity-Flow-Modells besonders wichtig ist. Mit diesen Verfahren konnte die Möglichkeit von signifikanten Fahrzeugeinsparungen bei unseren Kooperationspartnern nachgewiesen werden; ihr realer Einsatz steht unmittelbar bevor. Eine Übersicht zur Fahrzeugumlaufplanung geben [6] und

im Detail [11], zu den verwendeten LP-Techniken siehe [9, 10], zu Lagrange-Verfahren [8] und zur Anwendung bei der BVG [12].

Fahrzeugeinsatzplanung im Behindertentransport

Bearbeitet von: R. Borndörfer, M. Grötschel, R. Weismantel

Kooperationspartner: Berliner Zentralausschuß für Soziale Aufgaben e.V., F. Klostermeier, C. Küttner

Förderung: Berliner Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur

Die Fahrzeugeinsatzplanung im Behindertentransport beginnt mit einer Menge von Fahrtwünschen, die die Kunden einer Telefonzentrale mitgeteilt haben. Die Fahrtwünsche werden mit Hilfe einer Flotte von Spezialbussen verschiedener Typen durchgeführt, die je nach täglichem Bedarf angemietet werden. Das Problem der Fahrzeugeinsatzplanung besteht darin, eine geeignete Menge von Fahrzeugen anzumieten und für jedes dieser Fahrzeuge eine solche Tagestour zu bestimmen, daß alle Fahrtwünsche mit einem geeigneten Fahrzeug durchgeführt werden und die Touren eine Anzahl von Bedingungen erfüllen, etwa daß vorgeschriebene Schichtlängen oder Pausenzeiten eingehalten werden und der Service pünktlich erfolgt. Minimiert werden sollen die Beförderungskosten.

Aufgrund der Organisation des Fahrdienstes mit Vorbestellung von Fahrtwünschen ist die Fahrzeugeinsatzplanung eine Off-Line-Fragestellung. Wir bearbeiten dieses Problem mit einem Set-Partitioning-Ansatz. Dieses Modell ist gut geeignet für den Bereich der Behindertenbeförderung mit vielen Extrawünschen der Kunden: diese können bei der Erzeugung einzelner zulässiger Touren berücksichtigt werden, die Bestimmung einer optimalen Kombination von Touren erfolgt davon unabhängig auf einer abstrakten Ebene. Bei dem von unserem Kooperationspartner BZA betriebenen Telebus-Behindertenfahrdienst in Berlin liegen täglich im Schnitt etwa 1.500 Fahrtwünsche vor, was zu Set-Partitioning-Problemen mit gleicher Anzahl Zeilen und mehreren hunderttausend Spalten führt. Wir bearbeiten diese Probleme mit Branch-and-Cut-Techniken, wobei Tourenerzeugung, iterative Problemreduktion und die Verwendung von Schnittebenen wichtige Aspekte sind. Eine erste Ausbaustufe eines auf diesem Ansatz basierenden Telebus-Computersystems ist bereits im Einsatz, siehe [3, 4]. Zur Tourenerzeugung siehe [7], zum Branch-and-Cut-Verfahren [2].

Echtzeitsteuerung automatischer Transportsysteme

Bearbeitet von: N. Ascheuer, M. Grötschel, N. Kamin, J. Rambau

Kooperationspartner: Herlitz AG (Berlin)

Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft im Rahmen des Schwerpunktprogramms "Echtzeit-Optimierung großer Systeme"

Das Versandzentrum unseres Kooperationspartners Herlitz AG, Berlin, besteht aus automatischen Hochregallagern, die mittels moderner Fördertechnik mit verschiedenen, ebenfalls automatisierten Kommissionierbereichen verbunden sind. In diesem Versandzentrum gehen permanent Bestellungen ein, die unverzüglich bearbeitet werden müssen. Damit stellt sich das Problem der Echtzeitoptimierung des kompletten Transportsystems der Herlitz AG, und dies ist unser Fernziel. Gegenwärtig bearbeiten wir zwei Problemfelder.

Der erste Bereich ist die Glückwunschkartenkommissionierung. Dort fahren auf einem festen Rundkurs acht Kommissioniermobile, die bis zu 19 Aufträge gleichzeitig bearbeiten können, an Regallagern entlang. Auf dem Kurs kann es zu Staus kommen, da die Mobile einander nicht überholen können. Das Problem der Steuerung der Kommissioniermobile besteht darin, die Aufträge so auf die Fahrzeuge zu verteilen, daß eine schnellstmögliche und termingerechte Bearbeitung gewährleistet ist.

Unser Ansatz zur Lösung des Fahrzeugsteuerungsproblems ist, die Anzahl der Stopps der Mobile zu verringern und das Auftreten von Staus zu vermindern. Dazu entwickeln wir Echtzeit-Heuristiken, deren Qualität wir einerseits durch Simulation, andererseits durch eine A-Posteriori-Analyse mit Hilfe entsprechender ganzzahliger linearer Programme untersuchen. Bei bis zu 700 Aufträgen täglich entstehen so Probleme mit mehreren zehntausend Zeilen und Spalten, die wir mit LP-Techniken bearbeiten. Besonders wichtig ist dabei die Ausnutzung von Präzedenzstrukturen. Die Simulationsergebnisse zeigen, daß durch unsere Echtzeitverfahren die Bearbeitungszeit der Aufträge deutlich verkürzt werden kann, selbst wenn nur sechs oder sieben Mobile eingesetzt werden. Für die Probleme bei Herlitz liefern diese Heuristiken sogar im A-Posteriori-Vergleich Lösungen guter Qualität. Ein zweiter Bereich ist die effiziente Steuerung des gesamten Palettentransport- und -lagersystems, das aus Regalbediengeräten und einem damit verbundenen Palettenfördersystem besteht. Optimierungsziel ist die termingerechte Verfügbarkeit der Paletten. In der Steuerung von Regalbediengeräten haben wir Erfahrungen aus einem ähnlichen Projekt in Kooperation mit der Siemens-Nixdorf-Informationssysteme AG, Augsburg. In diesem Projekt wurde ein Optimierungspaket zur Minimierung der Leerfahrzeit entwickelt, dem Untersuchungen einer On-Line Variante des Asymmetrischen-Travelling-Salesman-Problems zugrundeliegen [1]. Unsere Ansätze zur Lösung des Palettentransportproblems basieren auf der Übertragung und Erweiterung der Erfahrungen, die wir bei der Steuerung von Regalbediengeräten und Kommissioniermobilen gewinnen konnten.

Publikationen

1. N. Ascheuer. *Hamiltonian Path Problems in the On-line Optimization of Flexible Manufacturing Systems*. Dissertation, Technische Universität Berlin (1995) erhältlich als ZIB Technical Report, TR 96-03
2. R. Borndörfer. *Set Partitioning and its Application to a Vehicle Routing Problem*. Dissertation, Technische Universität Berlin (1997) erscheint in 1997.
3. R. Borndörfer, M. Grötschel, F. Klostermeier und C. Küttner. Telebus Berlin - Mobilität für Behinderte. ZIB Preprint, SC 96-40
4. R. Borndörfer, M. Grötschel, W. Herzog, F. Klostermeier, W. Konsek und C. Küttner. Kürzen muß nicht Kahlschlag heißen - Das Beispiel Telebus - Behindertenfahrdienst Berlin. ZIB Preprint, SC 96-41
5. R. Borndörfer, M. Grötschel und A. Löbel. Alcuin's transportation problems and integer programming. ZIB Preprint, SC 95-27
6. M. Grötschel, A. Löbel und M. Völker. Optimierung des Fahrzeugumlaufs im öffentlichen Nahverkehr. ZIB Preprint, SC 96-8
7. F. Klostermeier und C. Küttner. Kostengünstige Disposition von Telebussen. Diplomarbeit, Technische Universität Berlin (1993)
8. A. Kokott und A. Löbel. Lagrangean relaxations and subgradient methods for multiple-depot vehicle scheduling problems. ZIB Preprint, SC 96-22
9. A. Löbel. Solving large-scale real-world minimum-cost flow problems by a network simplex method. ZIB Preprint, SC 96-7
10. A. Löbel. Solving the LP relaxations of large-scale multiple-depot vehicle scheduling problems exactly. ZIB Preprint, SC 96-26
11. A. Löbel. *Optimal Vehicle Scheduling in Public Transit*. Dissertation, Technische Universität Berlin (1997) erscheint in 1997.
12. A. Löbel und U. Strubbe. Wagenumlaufoptimierung - Methodischer Ansatz und praktische Anwendung. In *Heureka '96: Optimierung in Verkehr und Transport*, Seiten 341-355. Forschungsgesellschaft für Straßen- und Verkehrswesen, Köln (1996)

2.2.13 On- und Off-line Optimierung in Kraftwerkssystemen

Unsere Arbeiten zur Optimierung in Kraftwerkssystemen sind auf die Entwicklung von Modellen, Algorithmen und Implementierungen zur brennstoffkostenoptimalen Elektrizitätsproduktion beim Kooperationspartner VEAG Berlin gerichtet. Schwerpunkte bilden dabei die optimale Blockauswahl mittels großdimensionaler gemischt-ganzzahliger linearer Optimierungsmodelle sowie die optimale Lastverteilung mit unvollständiger Information unter Echtzeit-Bedingungen. Bestandteil des letztgenannten Themas sind auch statistische Lastvorhersagen [1].

Optimale Blockauswahl bei der Kraftwerkseinsatzplanung

Bearbeitet von: A. Martin, R. Schultz, R. Urbaniak, R. Weismantel

Kooperationspartner: W. Römisch (Humboldt-Universität zu Berlin), VEAG Vereinigte Energiewerke AG (Berlin)

Förderung: Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie, Berliner Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur

Unser Zugang zur optimalen Blockauswahl ermöglicht die simultane Optimierung von thermischer und wassergebundener Erzeugung und ist flexibel hinsichtlich praktisch relevanter Randbedingungen (z.B. Wasserstände in Pumpspeicherwerken, Reservehaltung im Gesamtsystem). Für die resultierenden mathematischen Optimierungsprobleme wurden primale und duale Verfahren entwickelt und implementiert sowie an realen Daten der VEAG getestet [2, 4].

Primale Verfahren fußen auf LP-basiertem Branch-and-Bound einschließlich problemangepaßter Verzweigungsstrategien. (Unsere Implementierung benutzt die CPLEX Callable Library.) Unter Verwendung von generalized flow cover cuts wurden gültige Ungleichungen für die konvexe Hülle der relevanten gemischt-ganzzahligen Bereiche abgeleitet. Ihre Einbindung in Lösungsverfahren wird zur Zeit untersucht.

Duale Verfahren gehen von einer Lagrange-Relaxation der Last- und Reservebedingungen aus, was zur Entkopplung des Gesamtproblems in Teilprobleme für die einzelnen Erzeugereinheiten führt. Zur Lösung der Lagrange-Dualprobleme werden proximale Bundle-Verfahren der nichtdifferenzierbaren Optimierung eingesetzt. Zur Gewinnung primal zulässiger Punkte aus den Resultaten der dualen Optimierung wurden exakte und heuristische Methoden entwickelt, deren Spezifikum die simultane Behandlung von thermischen Einheiten und Pumpspeicherwerken ist (vgl. [2]).

Mit beiden Verfahrensansätzen wurden Aufgaben mit mehreren tausend Booleschen und mehreren zehntausend stetigen Variablen bei Gütegarantien im Promille- und Rechenzeiten im Minutenbereich auf Workstations gelöst. Diese gehören unseres Wissens zu den größten Blockauswahlproblemen für hydro-thermische Kraftwerkssysteme, über deren Lösung in der Literatur berichtet wurde.

Optimale Lastverteilung mit unvollständiger Information unter Echtzeit-Bedingungen

Bearbeitet von: N. Gröwe, J. Polzehl, R. Schultz

Kooperationspartner: W. Römisch (Humboldt-Universität zu Berlin), VEAG Vereinigte Energiewerke AG (Berlin)

Förderung: Schwerpunktprogramm "Echtzeit-Optimierung großer Systeme" der Deutsche Forschungsgemeinschaft, Berliner Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur

In Kraftwerkssystemen entstehen Echtzeit-Anforderungen durch den Zeittakt für Steuerbefehle an Erzeugereinheiten und durch unvollständige Information über zukünftige Systemparameter wie z.B. den Lastverlauf. Aufgrund der Verkopplung aktueller mit zukünftigen Steuerbefehlen ist eine Off-Line Optimierung des Systems unmöglich. Vielmehr wird mit wachsender Information über die ungewissen Daten eine ständige Reoptimierung des Systems notwendig. Gemessen an der Zahl der Variablen und Restriktionen ist die Lastverteilung in Kraftwerkssystemen wie dem des Kooperationspartners VEAG Berlin ein hochdimensionales Optimierungsproblem. Ein Spezifikum des VEAG-Systems ist der substantielle Anteil von Pumpspeicherwerken an der installierten Kraftwerksleistung. So entstehen zusätzliche Zeitkopplungen, welche bei der erwähnten Reoptimierung besonders zu berücksichtigen sind.

Im Rahmen des von der DFG geförderten Vorhabens "Optimale Lastverteilung mit unvollständiger Information unter Echtzeit-Bedingungen" werden mathematische Modelle, Algorithmen und Computercodes zur Echtzeit-Optimierung in Kraftwerkssystemen entwickelt [3]. Mathematischer Ansatz ist dabei die Modellierung mittels stochastischer Programme, welche auf große gemischt-ganzzahlige lineare Programme mit spezifischer Blockstruktur führen, zu deren Lösung Dekompositionsverfahren entwickelt werden. Aufgrund der vielfältigen Verkopplung innerhalb des Modells (bezüglich Zeitschritten, Erzeugereinheiten und Lastszenarien) ergeben sich mehrere Dekompositionsmöglichkeiten, deren gegenseitige Abwägung und Koordination ein wesentlicher Teil unserer theoretischen Untersuchungen ist. Weitere relevante theoretische Fragestellungen betreffen polyedrische Untersuchungen für gemischt-ganzzahlige zulässige Bereiche, Testmengen für die nach der Dekomposition entstehenden untereinander ähnlichen Teilprobleme, Anpassung von Verfahren der nichtglatten Optimierung bei der Lagrange-Relaxation sowie Ableitung von Szenario-Bäumen aus dem statistischen Datenmaterial für die ungewissen Systemparameter.

Publikationen

1. O. Bunke, B. Droge und J. Polzehl. Model selection, transformations and variance estimation in nonlinear regression. ZIB Preprint, SC 95-43

2. D. Dentcheva, R. Gollmer, A. Möller, W. Römisch und R. Schultz. Solving the unit commitment problem in power generation by primal and dual methods. Preprint 96-25, Humboldt-Universität Berlin (1996)
3. W. Römisch und R. Schultz. Decomposition of a multi-stage stochastic program for power dispatch. *ZAMM - Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 76(3):29–32 (1996)
4. W. Römisch, R. Schultz, D. Dentcheva, R. Gollmer, A. Möller, P. Reeh, G. Schwarzbach und J. Thomas. Optimale Blockauswahl bei der Kraftwerkseinsatzplanung. ZIB Preprint, SC 96–03

Erscheint in: K.-H. Hoffmann, W. Jäger, T. Lohmann, H. Schunck (Hrsg.), "Mathematik – Schlüsseltechnologie für die Zukunft", Proceedings des BMBF-Statusseminars der anwendungsorientierten Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik, Springer-Verlag.

2.2.14 Telekommunikation

Die Telekommunikationstechnologie spielt eine Schlüsselrolle in der Informationsgesellschaft. Sie gestattet, große Datenmengen schnell zu übertragen. Den verschiedenen Techniken zur Datenübermittlung ist gemeinsam, daß die Kapazitäten beschränkt und teuer sind. Die Frage nach einer möglichst effektiven Nutzung der Kapazitäten läßt sich nach geeigneter Modellierung mit Methoden der ganzzahligen Optimierung behandeln.

Die Abteilung Optimierung beschäftigt sich mit fünf Projekten im Bereich Telekommunikation. Drei der Aufgabenstellungen kommen aus der *Netzwerkdimensionierung*, eine aus der *Frequenzplanung im Mobilfunk* und eine aus der *Dimensionierung von ACD-Systemen*. Über ein weiteres Projekt wird mit dem Deutschen Forschungsnetz e.V.

(DFN-Verein) verhandelt.

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

Bearbeitet von: M. Brandt

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

Förderung: Arbeitsgemeinschaft industrielle Forschung e.V. unter der Projekträgererschaft des BMBF, Berliner Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur

Betrachtet wird ein Übertragungskanal in einem breitbandigen Mehrdienstnetz (B-ISDN). Dem Kanal wird eine Überlagerung einer festen Anzahl unterschiedlicher Verkehrsströme mit unterschiedlichen Intensitäten, Bandbreitenanforderungen und mittleren Belegungsdauern 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.

Das beschriebene System kann als ein Bediensystem modelliert werden, wobei die Anzahl der Bediener der Kapazität des Kanals entspricht. Leitet man einen der Überlaufströme auf ein Bediensystem mit unendlich vielen Bediengeräten, so charakterisieren die Momente auf der Überlaufgruppe diesen Überlaufstrom. Ist die Anzahl der unterschiedlichen Typen von Forderungen nicht zu groß, so kann man die individuellen Blockierungswahrscheinlichkeiten und die ersten Momente auf den Überlaufgruppen für die einzelnen Typen von Forderungen aus den Balance-Gleichungen für die stationären Anzahlen von Forderungen der einzelnen Typen im System und auf den Überlaufgruppen numerisch ermitteln. Für realistische Systeme sind Approximationen dieser Größen von Interesse. Die von

Roberts [8] vorgeschlagene Approximation der individuellen Blockierungswahrscheinlichkeiten für die unterschiedlichen Typen von Forderungen wurde zu einer Approximation der ersten Momente auf den Überlaufgruppen verallgemeinert. Diese neue Approximation ermöglicht eine Anpassung geeigneter Erneuerungsprozesse (z.B. von Interrupted-Poisson-Prozessen) an die individuellen Überlaufströme durch Fitting der ersten Momente auf den Überlaufgruppen auch für eine realistische Anzahl von Forderungstypen, vgl. [4].

Die Approximationen der Blockierungswahrscheinlichkeiten und der ersten Momente auf den Überlaufgruppen sowie verschiedene Verfahren der Anpassung von Erneuerungsprozessen an die individuellen Überlaufströme und ein Modul zur Simulation des Systems wurden in einem Programmpaket (in C) implementiert.

Routing in ATM-Netzwerken

Bearbeitet von: A. Martin

Kooperationspartner: Telenor (Norwegian Telecom, Norwegen), Universität Oslo (Norwegen)

ATM (Asynchronous Transfer Mode) ist ein Transportverfahren für Breitbandnetze und wird allgemein als die Netzwerk-Technologie der Zukunft eingeschätzt. ATM-Netze besitzen sehr hohe Flexibilität und können Kapazitäten auf Anfrage reservieren, beispielsweise für multimediale Anwendungen.

Ein ATM-Netz basiert auf den Übertragungskanälen eines physikalischen Netzes. Die Knoten des physikalischen Netzes bilden die „Digital Cross Connects“ (DCCs), und jeder Verbindung entspricht eine Menge von Glasfasern. Einige dieser DCCs sind als ATM-Switches (Knoten mit Vermittlungstechnik) ausgezeichnet und bilden die Knoten des ATM-Netzes. Die Kanten des ATM-Netzes, sogenannte Virtuelle Pfade (VPs), entsprechen Wegen im physikalischen Netz. Jeder VP hat eine Kapazität, ausgedrückt in Mbit/s. Eine Anforderung, Daten zu übertragen, beansprucht im ATM-Netz Kapazität entlang eines Weges vom Quell- zum Zielknoten.

Für eine gegebene Liste von Anforderungen ist eine Menge von technisch realisierbaren VPs zu bestimmen, die ein ATM-Netz bilden. Dieses ATM-Netz soll alle Anforderungen erfüllen können, und die Kosten, die sich aus Installationskosten für die VPs und den Routing-Kosten der Anforderungen zusammensetzen, sind zu minimieren.

Das Problem wurde zusammen mit Mitarbeitern von Telenor und der Universität Oslo untersucht. Für realistische Probleme lassen sich vielversprechende Ergebnisse mit einem *Schnittebenenverfahren* erzielen [6].

Dimensionierung des Festnetzes von E-Plus

Bearbeitet von: D. Alevras, M. Grötschel, R. Wessäly

Kooperationspartner: E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf)

In Kooperation mit E-Plus wird an der kostengünstigen Dimensionierung des Festnetzes von E-Plus gearbeitet. Neben zahlreichen Funkstationen für den Kontakt zu den Mobiltelefonen benötigt ein Mobilfunknetz ein Festnetz. Das Festnetz dient der Verbindung der Funkstationen sowie der Anbindung an andere Telefonnetze im In- und Ausland. Es besteht in der Regel aus einem angemieteten Leitungnetz, derzeit von der Deutschen Telekom, und Richtfunkstrecken. In diesem Projekt werden verschiedene Modelle zur kostengünstigen Dimensionierung eines „ausfallsicheren“ Festnetzes zwischen den Vermittlungszentralen entwickelt.

Gemeinsamkeiten der Modelle sind: zwischen je zwei Vermittlungszentralen ist ein Bedarf und eine Menge potentiell installierbarer Kapazitäten gegeben; die Kapazitäten müssen so gewählt werden, daß der gegebene Bedarf „ausfallsicher“ geroutet werden kann. Die Modelle unterscheiden sich in den potentiell installierbaren Kapazitäten und der Spezifikation von Ausfallsicherheit.

Unter Ausfallsicherheit wird verstanden, daß bei Ausfall einer Vermittlungszentrale oder einer Verbindung zwischen diesen ein Teil des Bedarfs weiterhin geroutet werden kann. Dies läßt sich auf eine der folgenden Arten erreichen: durch diversifizierte Pfade, durch vollständiges Umrouten bei Ausfall oder durch Umrouten des ausfallenden Verkehrs.

Zur Dimensionierung des Festnetzes zwischen den Vermittlungszentralen von E-Plus wurden *primale Heuristiken* und ein *Schnittebenenverfahren* (siehe [2, 1]) erarbeitet. Durch die berechnete untere Schranke für die Kosten kann die Güte der ermittelten Lösungen abgeschätzt werden.

Frequenzplanung im Mobilfunk

Bearbeitet von: R. Borndörfer, A. Eisenblätter, M. Grötschel, A. Martin

Kooperationspartner: E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf)

Dieses Projekt hat die Planung interferenzarmer Mobilfunknetze zum Thema. Führt man über ein Mobiltelefon ein Gespräch, so wird es mittels Funksignalen an eine nahegelegene stationäre Basisstation übermittelt und von dort aus zum Gesprächspartner übertragen. Diese Übertragung nutzt das oben erwähnte Festnetz von E-Plus.

Während die Basisstationen ähnlich einem Radiosender eine feste Frequenz verwenden, können sich die Mobiltelefone gleich einem Radioempfänger auf die Frequenzen der verschiedenen Basisstationen einstellen. Ein zentrales Problem ist, daß nahegelegene Basisstationen sich gegenseitig stören, wenn sie Frequenzen verwenden, die sehr dicht beieinander liegen.

E-Plus stehen 75 Frequenzen zur Verfügung, um mehrere tausend Basisstationen zu betreiben. Unter einer Reihe von technischen und rechtlichen Einschränkungen

ist jeder Basisstation eine Frequenz zuzuweisen mit dem Ziel, möglichst wenige störende Interferenzen zu erzeugen.

Im ersten Jahr der Projektlaufzeit wurden überwiegend *primale Heuristiken* zur schnellen Berechnung interferenzarmer Zuweisungen entworfen und implementiert. Im Vergleich zu den bisher genutzten Verfahren werden deutliche Verbesserungen erzielt. Seit Sommer 1995 wird an der Entwicklung eines *Branch&Cut-Verfahrens* für dieses Problem gearbeitet, mit dem kleine Probleme bereits optimal gelöst werden können.

Dimensionierung von ACD-Systemen mit ungeduldigen Kunden

Bearbeitet von: M. Brandt

Kooperationspartner: A. Brandt (Humboldt-Universität zu Berlin), Siemens AG (München)

Förderung: Berliner Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur

ACD steht für Automatic Call Distribution. Betrachtet wird das folgende ACD-System bestehend aus einer Gruppe von s Agenten und einer endlichen Anzahl von Warteplätzen: Am System kommen Anrufe von außerhalb gemäß einem Poisson-Prozeß an (inbound Calls). Ein inbound Call, der keinen freien Warteplatz vorfindet, geht verloren. Ist ein Agent frei, so wird der inbound Call sofort durch einen der freien Agenten bedient, sonst belegt er einen der freien Warteplätze. Die Wartedisziplin ist FCFS. Die inbound Calls sind ungeduldig mit einer beliebigen Ungeduldverteilung. Die Bedienzeiten durch die Agenten sind exponentiell verteilt. Sobald mehr als eine vorgegebene Anzahl von Agenten (Outbound-Parameter) frei ist, wird durch einen der freien Agenten ein outbound Call abgewickelt, vgl. [3, 5].

Das beschriebene System läßt sich durch ein $M(n)/M(m)/s+GI$ Warteschlangensystem mathematisch modellieren. Für dieses Warteschlangensystem wurde ein System von Integralgleichungen für den Vektor der Restgeduldszeiten und maximalen Geduldszeiten aufgestellt und explizit gelöst, wodurch bekannte Ergebnisse in [7] für das genannte Warteschlangensystem erheblich verallgemeinert werden konnten. Die Lösung liefert für das Warteschlangensystem die stationäre Anzahlverteilung sowie verschiedene Wartezeitverteilungen. Für das ACD-System lassen sich hieraus die interessierenden Performance-Größen herleiten (Blockierungswahrscheinlichkeit, Abbruchwahrscheinlichkeit akzeptierter inbound Calls, Wartezeitverteilungen akzeptierter inbound Calls, Rate der outbound Calls).

Die erreichte effiziente Berechenbarkeit der Performance-Größen ermöglicht eine Kosten-Optimierung des ACD-Systems bzgl. der Anzahlen der Agenten und Warteplätze sowie des Outbound-Parameters unter Berücksichtigung zahlreicher Restriktionen. Ein entsprechendes Optimierungsverfahren wird in einem Softwarepaket (in C für Windows) implementiert. Mit Hilfe einer Approximationstech-

nik (Fitting von Performance-Maßen mittels warteplatzabhängiger Ungeduldsraten) wird die Analyse des $M(n)/M(m)/s+GI$ Warteschlangen-Systems auch für die Untersuchung komplizierterer ACD-Systeme als des oben beschriebenen (mit Zwangsansage, Integration eines Voice-Mail-Servers) genutzt.

Publikationen

1. D. Alevras, M. Grötschel, P. Jonas, U. Paul und R. Wessälly. Survivable mobile phone network architectures: Models and solution methods. ZIB Preprint SC 96-48
2. D. Alevras, M. Grötschel und R. Wessälly. A Network Dimensioning Tool. ZIB Preprint SC 96-49
3. A. Brandt und M. Brandt. Bericht zum Thema "ACD-Systeme I-IV". Technical Report, Siemens AG, München, 1994-1996
4. A. Brandt, M. Brandt und H. Pohl. Bericht zum Thema "Approximation der Überlaufströme bei Systemen mit selektiver Trunk-Reservation für heterogene Quellen". Technical Report, TELEKOM AG FTZ, Darmstadt (1996)
5. A. Brandt, M. Brandt, G. Spahl und D. Weber. Modelling of Optimal Call Distribution Systems. In *15th Int. Teletraffic Cong.* (eingereicht) (1997)
6. G. Dahl, A. Martin und M. Stoer. Routing through virtual paths in layered telecommunication networks. Research Note N 78/95, Telenor Research and Development, Kjeller, Norway (1995)
7. O. M. Jurkevič. Über mehrlinige Systeme mit stochastischen Schranken für die Wartezeit. *Izv. Akad. Nauk SSSR Techniceskaja kibernetika*, 4:39-46, 1971. In russisch.
8. J. Roberts. Teletraffic models for the telecom 1 integrated services network. In *10th Int. Teletraffic Cong.*, Montreal (1983)

2.2.15 Computeralgebra

Im Berichtszeitraum lag das Hauptaugenmerk der Arbeiten im Bereich der Forschung und der Entwicklung von Produkten auf der Integration des Internet (insbesondere des World Wide Webs). Durch die Verwendung der Dienste des WWW können die neuesten Forschungsergebnisse, z.B. Algorithmen für orthogonale Polynome, sofort weltweit zur Verfügung gestellt werden. Auf einigen Serversystemen werden Implementierungen dieser Algorithmen als Subsystem bereitgestellt und sind dann für Interessenten verwendbar. Für die Produkte der Abteilung Symbolik bietet das WWW darüberhinaus die Möglichkeit einer Präsentation sowie eines automatischen Systems der Verteilung neuer Module bzw. von Korrekturen.

Algorithmen für orthogonale Polynome und spezielle Funktionen

Bearbeitet von: W. Koepf, H. Böing

Kooperationspartner: D. Schmersau, Freie Universität Berlin, R. Swarttouw, T. Koornwinder, Universität Amsterdam, P. Paule, RISC Linz

Durch die Algorithmen von Zeilberger zur Bestimmung von Differential- und Rekursionsgleichungen für hypergeometrische Reihen ist in den letzten Jahren ein Durchbruch bei der Verifikation hypergeometrischer und insbesondere kombinatorischer Identitäten gelungen. Diese Algorithmen wurden am Konrad-Zuse-Zentrum weiterentwickelt [1]. Im Rahmen des Buchprojekts [2] entstanden übersichtliche Implementierungen der Algorithmen von Gosper (unbestimmte Summation), von Zeilberger (bestimmte Summation) sowie von Petkovšek (Lösung holonomer Rekursionsgleichungen durch hypergeometrische Terme) in Maple, mit denen sich diese Verifikationen vornehmen lassen. In der Arbeit [3] wurde diese Implementierung verwendet, um durch Angabe expliziter Gegenbeispiele eine Fragestellung über die rationale Darstellbarkeit hypergeometrischer Reihen von Koornwinder zu lösen.

Diese Implementierungen wurden ferner in einem ersten Schritt in Zusammenarbeit mit René Swarttouw in eine Online-Version des Askey-Wilson-Schemas integriert (<http://www.can.nl/~demo/CAOP/CAOP.html>). Auf dieser URL kann der Benutzer ein Polynomsystem dieser Klasse auswählen, kann einen beliebigen Normierungsfaktor eingeben und schließlich die zugehörige Differential/Differenzen- bzw. Rekursionsgleichung online berechnen lassen.

Eine Mathematica-Implementierung wurde in [4] vorgestellt.

Kurz vor der Fertigstellung sind Implementierungen analoger Algorithmen für Mehrfachsummen/integrale und für q -hypergeometrische Summen.

Völlig neue algorithmische Methoden wurden in [3] entwickelt, mit denen es möglich ist, das "inverse Problem" zu lösen, nämlich zu entscheiden, ob sich hinter einer gegebenen Dreitermrekursion ein (klassisches) orthogonales Polynomsystem verbirgt, und wenn ja, herauszufinden, welches.

Weiterentwicklung von REDUCE

Bearbeitet von: H. Melenk, W. Neun, W. Koepf

Kooperationspartner: A. C. Hearn (Leitung des Projekts, RAND, Santa Monica, Californien, USA), J. H. Davenport, J. P. 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.

REDUCE ist ein Programmsystem für die symbolische Bearbeitung mathematischer Formeln, anwendbar primär in Ingenieur- und Naturwissenschaften. Der Schwerpunkt von REDUCE liegt bei qualitativ hochwertigen Algorithmen für schwierige und umfangreiche Anwendungsfälle. Eine der an der Entwicklung von REDUCE beteiligten Gruppen ist die Abteilung 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 weltweitem Update). Es wird derzeit an der Umstellung des Systems zu einem weltweit verteilten Computeralgebrasystem gearbeitet (Arbeitsname „WebREDUCE“). Dieses Entwicklungs- und Distributionsverfahren ist web-orientiert und wesentlich flexibler als das traditionelle, ftp-basierte, nicht automatische Verfahren. Es ermöglicht insbesondere, daß neue Algorithmen und Korrekturen 'sofort' automatisch und weltweit verteilt werden können.

Ein Zugang von REDUCE zu Java ist ebenfalls in Entwicklung.

Die *Präsentation des Systems im World Wide Web* (WWW) ist an vielen Serversystemen zugänglich. Einige REDUCE URLs sind:

<http://www.uni-koeln.de/REDUCE>

http://www.rand.org/software_and_data/reduce/

oder <http://www.zib.de/Symbolik/reduce> .

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.

Als *Testserver im WWW* wurde am ZIB eine spezielle Maschine installiert, so daß Interessenten die Möglichkeit zum Testen des Systems gegeben wird. Dabei sind über das WWW zugleich die Online-Dokumentation sowie Anwendungsbeispiele einsehbar.

Im Rahmen des von der Europäischen Union geförderten Projekts *OpenMath* wurde an der Integration von REDUCE in dieses system- und plattformübergreifende Softwaremodell gearbeitet. Erste Prototypen (einschließlich eines REDUCE-OM Prototyps) wurden in Zusammenarbeit mit INRIA Sophia-Antipolis erstellt und auf den OpenMath Workshops präsentiert. Eine erste Version eines OpenMath Standards wird für Anfang 1997 erwartet.

Aus dem Verkauf von REDUCE werden voraussichtlich im Berichtsjahr Umsätze von 110.000,- DM erzielt. Einen nicht unerheblichen Anteil daran hat neben

den Upgrades für die neue Version (ab Herbst 1995) 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.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Seit dem Beginn des Berichtsjahres ist W. Koepf gewähltes Mitglied der Fachgruppenleitung der Fachgruppe Computeralgebra der DMV/GI/GAMM. In Zusammenarbeit mit der Gruppe von V. Weispfenning (Universität Passau) wurde eine wesentliche Erweiterung des Gröbnerbasis Moduls von REDUCE (Comprehensive GB) erstellt.

1. W. Koepf: *Algorithms for m-fold hypergeometric summation*. Journal of Symbolic Computation 20, 399–417 (1995)
2. W. Koepf: *Algorithmic Summation and Special Function Identities with Maple*. Buchmanuskript (1996)
3. W. Koepf: *On a Problem of Koornwinder*. ZIB Preprint, SC 96–52
4. W. Koepf: *A Package on Orthogonal Polynomials and Special Functions*. ZIB Preprint, SC 96–53
5. W. Koepf, D. Schmersau: *Algorithms for Classical Orthogonal Polynomials*. ZIB Preprint, SC 96–23
6. A. C. Hearn: REDUCE User's Manual, Version 3.6, 2.nd ed., 1996, RAND Publication CP78 (Rev. 9/96), authorized reprint by ZIB Berlin
7. OpenMath HomePage im WWW at
URL: <http://www.can.nl/~abbott/OpenMath/index.html>
8. REDUCE HomePage im WWW at
URL: <http://www.uni-koeln.de/REDUCE/index.html>

3 Wissenschaftliche Dienstleistungen

3.1 Überblick

Zur Orientierung innerhalb der Fülle von Projekten soll hier vorab ein Überblick über die Schwerpunkte unserer Arbeit im Berichtszeitraum gegeben werden.

Information und Kommunikation im Wissenschaftsbereich: Die Abteilung “Wissenschaftliche Informationssysteme” arbeitet an der Schnittstelle von Mathematik, Informationstechnik und anderen Wissenschaften. Sie beteiligt sich in enger Kooperation mit der Leitung des ZIB aktiv an der Diskussion, der Gestaltung und der Einführung neuer globaler, Internet-orientierter Technologien und Systeme der Information und Kommunikation (IuK) auf

lokaler Ebene: in mathematischen Fachbereichen der Universitäten und in mathematischen Forschungsinstitutionen,

nationaler Ebene: in der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV) und ihren Fachgruppen, aber auch in anderen wissenschaftlichen Fachgesellschaften, in Institutionen der wissenschaftlichen Infrastruktur (wie Universitätsbibliotheken, -rechenzentren und Fachinformationszentren), im Verlagswesen und in Gremien der DFG und des BMBF,

internationaler Ebene: in der *International Mathematical Union* (IMU) und in der *European Mathematical Society* (EMS) in Zusammenarbeit mit anderen internationalen Kompetenzzentren.

Im Dezember 1996 wurde das ZIB von der Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur beauftragt, sich an der Modernisierung der Bibliothekssysteme in Berlin-Brandenburg zu beteiligen und die zentrale Suchmaschine des (in Zukunft durch das Internet elektronisch verknüpften) kooperativen Bibliotheksverbundes Berlin-Brandenburg zu entwerfen und zu implementieren.

Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net): Die technischen Arbeiten der Abteilung konzentrierten sich auf den weiteren Ausbau ihrer elektronischen Informationsangebote für die Mathematik und deren Anwender, (wie z.B. auf den WWW-Server der IMU und des mathematischen Weltkongresses ICM'98). Weitere Entwicklungsthemen waren die hierarchische Navigation in umfangreichen Mengen von Softwarebibliotheken (wie z.B. in der *netlib*), die Erschließung mathematischer Informationsangebote mittels spezieller Internet-Werkzeuge zum Indexieren und Suchen (wie z.B. *Harvest*) und die testweise Implementierung von Metadaten-Schemata.

Im Berichtszeitraum hat das ZIB in Zusammenarbeit mit der DMV und verschiedenen mathematischen Fachbereichen und Bibliotheken in Deutschland mehrere Projektanträge erstellt und die geplanten Projekte vorbereitet. Im Dezember

1996 erhielt das ZIB die Zusage des DFN-Vereins und der Deutschen Telekom AG, in Kooperation mit acht mathematischen Fachbereichen mit dem systematischen (organisatorischen und technischen) Aufbau von "Informationsdiensten für die Mathematik im Internet" beginnen zu können. Dieses Forschungsprojekt mit der Kurzbezeichnung "Math-Net" hat eine Laufzeit von zwei Jahren.

Informationstechnische Werkzeuge für Museen: Im Mittelpunkt der technischen Weiterentwicklung des bereits seit Mitte 1981 vom ZIB zur Durchführung zahlreicher Dokumentationsprojekte im Museumsbereich benutzten Programmsystems GOS stand 1996 die Anbindung an das WWW. Dazu mußten die Abfragemöglichkeiten des Programms vollständig verändert werden, da bei der potentiellen Zielgruppe einer im Internet verfügbaren Datenbank weder eine dokumentarische Grundausbildung noch die Bereitschaft zu einer entsprechenden Schulung vorausgesetzt werden kann. Eine Überarbeitung der vorliegenden Inventarisationsdaten scheidet aus zeitlichen Gründen ebenfalls aus.

Als augenblicklicher Arbeitsstand dieser Entwicklung ist auf dem WWW-Server des Deutschen Historischen Museums eine Testdatenbank mit Text- und Bilddaten zu etwa 4.000 Objekten unter <http://www.dhm.de/datenbank> verfügbar.

3.2 Schwerpunkte

3.2.1 Information und Kommunikation im Wissenschaftsbereich

Die Diskussion um den beginnenden Aufbruch in die Informationsgesellschaft durchdringt heute weite Teile der Gesellschaft. Die Wurzeln dafür liegen in den radikalen Veränderungen, die von den neuen Technologien der Information und der Kommunikation, insbesondere von der weltweiten Vernetzung durch das Internet und die nationalen und globalen Datenautobahnen erwartet werden. Diese Entwicklungen, die ursprünglich von speziellen Gebieten der Forschung ausgingen, treffen nun weite Bereiche von Wissenschaft und Gesellschaft, die zum Teil unvorbereitet sind, mit großer Kraft. Insbesondere die traditionellen Informationsversorger stehen heute vor einer Fülle neuartiger und immer dringlicher werdender Fragen und komplexen Problemen.

- Welche Aufgaben verbleiben ihnen noch, fragen sich Verleger, wenn Wissenschaftler ihre eigenen Journale elektronisch betreiben und in der Lage sind, ihre Artikel und andere Forschungsergebnisse selbst über das Internet zu vertreiben?
- Was wird ihre Rolle sein, fragen sich wissenschaftliche Bibliotheken, wenn große Verlage und wissenschaftliche Fachgesellschaften keine Journale mit Heften und Bänden mehr anbieten, sondern nur noch "logische Informationsströme" in Datenbanken, deren Dokumente Wissenschaftler direkt von ihrem Arbeitsplatz aus recherchieren und bestellen?
- Welche Gewinne gibt es noch, fragt sich der Buchhandel, bei Journalen, wenn Dokumentenlieferer und Bibliotheken sie durch elektronischen Direktversand übergehen?
- Wie, fragen sich die Wissenschaftler, sind elektronische Arbeiten, wie z.B. digitale Dissertationen, oder andere Ergebnisse der aktuellen Forschung, in Multimediaform überhaupt langfristig elektronisch zu speichern und zu bewahren?

Es entstehen Defizite neuer Art: Eine Informationsflut, hervorgerufen durch die Dynamik der wissenschaftlich-technischen Forschungsprozesse und ihr ungebremstes Wachstum, und - simultan - ein Informationsmangel, verursacht durch schrumpfende Bibliotheksetats und drastisch steigende Kosten für wissenschaftliche Literatur. Zu den traditionellen wissenschaftlichen Artikeln treten außerdem völlig neue Informationsarten hinzu, wie große Softwarebibliotheken und umfangreiche Datensammlungen, Visualisierungen und Animationen, dynamische Simulationen, Sprache und Musik, Videos und jetzt sogar Live-Übertragungen

von Vorlesungen im Internet (d.h. dynamische Multimediainformation), vernetzt in globalen Hypertexten - jeweils mit Problemen eigener Art.

Das ZIB nahm an diesen Entwicklungsprozessen von Beginn an teil und entwickelte entsprechende Konzepte. Es initiierte und moderierte die Diskussion nicht nur in der Mathematik und in Deutschland, sondern national auch in anderen Bereichen der Wissenschaften und international in der Mathematik (z.B. in der IuK-Kommission der wissenschaftlichen Fachgesellschaften und in Kommissionen der IMU, EMS, DFG, BMBF etc.).

Verlage und Buchhandel, Wissenschaften und Bibliotheken

Bearbeitet von: M. Grötschel, J. Lügger

Auf Einladung des Börsenvereins, der Bundesvereinigung Deutscher Bibliotheksverbände und der Deutschen Bibliothek [1] leistete das ZIB einen Beitrag zur Bestimmung der Rolle und Verantwortung der Wissenschaften im elektronischen Publikationsprozeß. Dieser diskutiert die Charakteristiken der neuen Produkte der kommenden *Globalen Digitalen Bibliothek*. Das Papier hat seine "Systemgrenzen" erreicht und gleichzeitig hat das Internet bereits heute die Struktur der wissenschaftlichen Kommunikation verändert. Diese befindet sich im Umbruch. Es entstehen verteilte Informationsstrukturen, die - in offenen Systemen und in digitaler Form - über die ganze Welt verteilt sind [2].

Der durch die neuen Technologien eingeleitete Strukturwandel bringt nicht nur Risiken mit sich, sondern auch neue Chancen, die Bedürfnisse und Interessen der Wissenschaften auf neue Art zu erfüllen: Einen freien und ungehinderten Austausch wissenschaftlicher Information zu fairen Kosten. Allerdings sind die Wissenschaftler auch vor eine neue Verantwortung gestellt. Sie müssen in der elektronischen Welt Kompetenz entwickeln und wahren. Es gilt, die bewährten Methoden und Verfahren der Qualitätssicherung, der Authentizität und der langfristigen Archivierbarkeit auch in die digitale Welt zu übertragen. Der Wandel kann durch Selbstorganisation und Kooperation gemeistert werden. Insbesondere soll das Zusammenspiel zwischen den Wissenschaften mit ihren Bibliotheken, den Verlagen und Softwarehäusern, dem Buchhandel und den Zentren der Fachinformation neu gestaltet und den zukünftigen Verhältnissen gerecht werden [3].

Ein Beitrag zur Debatte der Implikationen in den Bildungswissenschaften untersucht die Natur des Wandels des Informationsbegriffs vor dem Hintergrund der Geschichte der Entwicklung der Schrift, des Buchdrucks und - jetzt - der neuen Medien zur Distribution von Information, dem Internet und dem World Wide Web. Viele der aktuell erscheinenden Themen und Probleme, z.B. der effektiven Verbreitung von Information und ihre Archivierung, traten bereits sehr viel früher auf, im Grunde schon zu Beginn unserer "schriftlichen" Zivilisation. Der Beitrag ist selbst ein Hypertext im Internet und belegt seine Aussagen mit vielen "lebenden" Beispielen (URL's). In der Mathematik beginnen Fachgesellschaften und

Fachgruppen, Fachbereiche an Universitäten und Forschungsinstitute, Spezialbibliotheken und Fachinformationszentren die neuen Mittel zu erproben. Sie bauen eigene WWW-Server, E-Journale und Preprint-Archive, umfangreiche Softwarebibliotheken und elektronische Dienste mit mathematischem Spezialwissen auf. Dabei entstehen auch neue virtuelle Zentren, Schwerpunkte der mathematischen Forschung, im Internet [4].

Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin–Brandenburg (KOBV)

Bearbeitet von: M. Grötschel, J. Lügger

Kooperationspartner: Universitätsbibliotheken der Universitäten von Berlin
Die wissenschaftlichen Bibliotheken in Berlin und in Brandenburg arbeiten z.Z. noch mit technischen Mitteln aus einer Zeit, in der das Retrieval in zeilenorientierten Dialogen und nur für einfache bibliographische Daten (“Karteikarten”) üblich war. Moderne Datenbanken mit grafischen Benutzerschnittstellen (in Client-Server-Technologie) lassen heute aber bereits die Suche und auch die Auslieferung von Volltexten und von Multimediadokumenten (Ton-, Bild- und Videoinformation) über das Internet (an jedes dort angeschlossene Arbeitsplatzsystem) zu. Im Dezember 1996 beauftragte die Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur das ZIB, sich an der dringend notwendigen Modernisierung der Bibliothekssysteme in der Region Berlin-Brandenburg zu beteiligen und die zentrale Suchmaschine des (in Zukunft durch das Internet elektronisch verknüpften) kooperativen Bibliotheksverbundes Berlin-Brandenburg zu entwerfen und zu implementieren.

Kooperation wissenschaftlicher Fachgesellschaften

Bearbeitet von: M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber

Kooperationspartner: Deutsche Mathematiker-Vereinigung (DMV), Deutsche Gesellschaft für Erziehungswissenschaften (DGfE), Deutsche Physikalische Gesellschaft (DPG), Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh), European Mathematical Society (EMS), Gesellschaft für Informatik (GI), International Mathematical Union(IMU), Staats- und Universitätsbibliothek Göttingen (SUB-Göttingen), SUBITO und Subito.2 Bund-Länder-Initiative, Zentralblatt für Mathematik (Abteilung Mathematik des FIZ-Karlsruhe), Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung e.V. (ZKI-Verein)

Förderung: Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (teilweise)

Wie bereits im vergangenen Jahr dargelegt, führte die breit angelegte Diskussion u.a. zu einer (durch das ZIB initiierten) Kooperationsvereinbarung von vier Fachgesellschaften (DMV, DPG, GDCh und GI) bezüglich der elektronischen Information und Kommunikation (IuK). Kooperation ist nicht nur auf lokaler Ebene notwendig (innerhalb der Universitäten zwischen den verschiedenen Fachdiszipli-

nen), sondern auch national und international [5]. Konzepte der Mathematik, formuliert durch DMV und ZIB, fanden ferner Eingang in ein neues Förderprogramm der Bundesregierung [6] und in Strukturkonzepte der DFG zum Thema "IuK" [8]. Inzwischen gab es nicht nur erste gemeinsame Workshops, die IuK-Kooperation entwickelte ihre eigene Dynamik. Weitere Fachgesellschaften, wie die Deutsche Gesellschaft für Erziehungswissenschaften (DGfE) oder die Deutsche Gesellschaft für Soziologie (DGS), schlossen sich an, oder sie assoziierten sich, wie die Gesellschaft für Didaktik der Mathematik und die Schweizer Gesellschaft für Informatik.

Das ZIB hat von Anfang an besonderen Wert darauf gelegt, den Strukturwandel in engem Kontakt mit Bibliotheken und Rechenzentren zu moderieren. Es beteiligte sich deshalb nicht nur durch mehrere Vorträge an ihren Veranstaltungen, sondern es nahm auch aktiv an ihrer Gremienarbeit teil, so z.B. im Rahmen der Bund-Länder-Initiative SUBITO.

In der Mathematik hat die Kooperation auch internationalen Charakter. Das ZIB steht mit der IMU in enger Verbindung und ist in ihrem *Committee on Electronic Publishing* aktiv. Auch mit der EMS pflegt das ZIB durch das *Electronic Publishing Committee (EPC-EMS)* Beziehungen, insbesondere unterstützt und berät es das "Zentralblatt für Mathematik", die Berliner Abteilung des Fachinformationszentrums Karlsruhe (FIZ-Karlsruhe), beim Aufbau einer *Electronic Library* von wissenschaftlichen E-Journalen für die EMS. Kürzlich hat das ZIB ferner kooperative Kontakte zu einem internationalen Kreis von Forschungsprojekten der *Digital Library Research* und von Bibliotheken aufgenommen, die mit dem *Dublin Core* und dem *Warwick Framework* an der Definition eines weltweit gültigen Satzes von Metadaten arbeiten.

1. *Die unendliche Bibliothek: Digitale Information in Wissenschaft, Verlag und Bibliothek.* Börsenverein des Deutschen Buchhandels e.V., Die Deutsche Bibliothek, Bundesvereinigung Deutscher Bibliotheksverbände; Harrassowitz Verlag, Wiesbaden 1996; Internet:
<ftp://ftp.ddb.de/pub/unendbib>
2. M. Grötschel, J. Lügger: *Neue Produkte für die digitale Bibliothek: Die Rolle der Wissenschaften.* Eingeladener Vortrag zum Symposium "Die unendliche Bibliothek"; Erschienen in [1], S. 38-76; auch: ZIB TR 96-05, Internet:
<http://elib.zib.de/math.org.softinf.pub.produkte>
3. M. Grötschel, J. Lügger: *Wissenschaftliche Information und Kommunikation im Umbruch - über das Internet zu neuen wissenschaftlichen Kommunikationsstrukturen.* Forschung & Lehre, Heft 1, 1996, S. 194-198; auch ZIB TR 96-07, Internet:
<http://elib.zib.de/math.org.softinf.pub.wiukiu>

4. M. Grötschel, J. Lügger: *Neueste Entwicklungen der Informations- und Kommunikationstechnik und ihre Auswirkungen auf den Wissenschaftsbetrieb*. Eingeladener Vortrag zur Fachtagung "Implikationen der Informationsgesellschaft für die Bildung" der Gesellschaft Information Bildung (GIB), 10.-11. Okt. 1996, Humboldt-Universität zu Berlin; A. Botte, D. Rusch-Feja, B. Christopher (Hrsg.), Gesellschaft Information Bildung, Berlin 1996; auch ZIB TR 96-12, Internet:
<http://elib.zib.de:88/edu/gib/gas.html>
5. M. Grötschel: *Neues zum Thema IuK - mit: 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, Heft 3, 1995, S. 6-11; Internet:
<http://elib.zib.de/math.org.softinf.pub.koop>
6. *Information als Rohstoff für Innovation*. Programm der Bundesregierung 1996 - 2000; Bonn, Juli 1996
7. J. Lügger: *On Changing Patterns of Mathematical Communication*. ZIB TR 96-06; Internet:
<ftp://ftp.zib.de/pub/zib-publications/reports/TR-96-06.ps>
8. *Neue Informationsinfrastrukturen für Forschung und Lehre*. Empfehlungen der Deutschen Forschungsgemeinschaft. Zeitschrift für Bibliothekswesen und Bibliographie (ZfBB) 43 (1996) 2

3.2.2 Informationsdienste für die Mathematik im Internet

Bearbeitet von: W. Dalitz, M. Grötschel, G. Heyer, J. Lügger, W. Sperber
Kooperationspartner: Deutsche Mathematiker-Vereinigung (DMV), die Fachgruppen “Numerische Software”, “Optimierung” und “Stochastik” der DMV, Fachinformationszentrum Karlsruhe (FIZ-Karlsruhe) mit dem “Zentralblatt für Mathematik”, International Mathematical Union (IMU), Mathematische Fachbereiche an Universitäten und Mathematische Forschungsinstitute in Deutschland, Konferenz der mathematischen Fachbereiche (KMathF), Bell Labs. (Murray Hill, USA), National Institute of Standards and Technology (NIST), USA

Das ZIB und die DMV haben bereits recht früh Ideen und Konzepte für ein verteiltes Informationssystem der Mathematik entwickelt, propagiert und mit den mathematischen Fachbereichen in Deutschland abgestimmt, siehe den Abschlußbericht der DMV-Projekte “Fachinformation”[4] und die Sammlung der Artikel von DMV und ZIB zum elektronischen Publizieren

<http://elib.zib.de/math.org.softinf.pub> .

Wenn auch der entsprechende Projektentwurf beim BMBF keine uneingeschränkte Gegenliebe fand, und folglich auch keine Fördermittel (auch weil die DMV nicht willens war, Forderungen des BMBF, wie z.B. die Entwicklung von Abrechnungssystemen für Verlage, zu realisieren) konnten - bei Moderation durch das ZIB - in Deutschland trotz fehlender externer Finanzierung eine Reihe der geplanten Projektbestandteile realisiert werden.

Alle deutschen mathematischen Fachbereiche (bis auf zwei) und Forschungsinstitute, mehrere Sonderforschungsbereiche und Forschungsschwerpunkte, die DMV selbst und vier ihrer Fachgruppen, und das FIZ-Karlsruhe haben eigene WWW-Server aufgebaut. An der Universität Bielefeld hat die DMV ein vollreferiertes universelles mathematisches E-Journal installiert, die *Documenta Mathematica*. Die EMS betreibt an der Abteilung Mathematik des FIZ-Karlsruhe einen Informationsserver mit einer (an anderer Stelle bereits genannten) elektronischen Bibliothek von E-Journalen. Der Arbeitskreis “Technik” der DMV hat an der Universität Osnabrück auf der Basis des Internet-Werkzeuges *Harvest* einen experimentellen Broker - jetzt mit Metadaten-Erfassungs- und Abfrage-Schemata - für mathematische Preprints und technische Berichte (in Deutschland) realisiert [6]. Die Aktivitäten des ZIB für das verteilte Informationssystem der Mathematik sind unten ausgeführt.

Im Dezember 1996 erhielten das ZIB und acht mathematische Fachbereiche vom DFN-Verein die Zusage, im Rahmen eines Förderprogramms der Deutschen Telekom AG einen kommunikationstechnischen Kernbestandteil des verteilten Informationssystems zu realisieren, die “Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)”, ein kooperatives Projekt unter der Leitung des ZIB mit einer Laufzeit von zwei Jahren [3].

Informationsserver der IMU, des ICM'98 und der Math-Net Links

Bearbeitet von: W. Dalitz, M. Grötschel, G. Heyer, J. Lügger

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

Förderung: International Mathematical Union (IMU) (teilweise)

Sowohl der Informationsserver der *International Mathematical Union* (IMU)

<http://elib.zib.de/IMU>

als auch der für den 1998 in Berlin stattfindenden *International Congress of Mathematicians* (ICM'98)

<http://elib.zib.de/ICM98>

sind im Berichtszeitraum erheblich aktualisiert worden. Beide Server basieren auf der Hyper-G-Server-Software, die eine funktionale Erweiterung gängiger WWW-Server darstellt (mit automatischer Suche nach Stichworten in Titeln und im Volltext, konsistenter Verwaltung der Hyperlinks, integrierter Datenbank).

Insbesondere der IMU-Server ist auch als globaler Einstiegspunkt zu elektronischen mathematischen Informationsangeboten in aller Welt gedacht und beinhaltet nun in einem ersten Prototyp die bisher noch als HTML-Text erstellten *Math-Net Links to the Mathematical World*

<http://elib.zib.de:88/Math-Net/Links/math.html> ,

eine virtuelle Bibliothek mathematischer Verweise im Internet. Damit ist eine hierarchische Suche und Navigation innerhalb dieser Ressourcensammlung gegeben.

Eine Diplomarbeit untersucht in diesem Zusammenhang die Möglichkeiten der automatischen Umsetzung von einfachen HTML-Texten in hierarchisch gegliederte (suchbare) Ressourcenmengen und strebt an, die Pflege solcher in Hyper-G zentralisierten Informationsmengen "remote" bzw. offline (per E-Mail) vorzunehmen.

Elektronische Informationsangebote der Mathematik

Bearbeitet von: W. Dalitz, J. Lügger

Kooperationspartner: R. F. Boisvert (NIST), E. Grosse (Bell Labs, Murray Hill, USA), Fachgruppen "Numerische Software", "Optimierung" und "Stochastik" der DMV

Mit der elektronischen Bibliothek eLib, einem inzwischen sehr umfangreichen Angebot von aktueller Forschungssoftware, Datensammlungen und Dokumenten aus allen Bereichen der Mathematik, stellt die Abteilung wissenschaftliche Informationssysteme einen Service für die Mathematiker und deren Anwender bereit. Weiterhin verfolgen wir das Prinzip der Offenheit bzgl. des Zugriffs im Internet, so daß alle Angebote mit möglichst allen etablierten Internet-Zugriffswerkzeugen

und deren Protokollen erreichbar sind, auch wenn sich Darstellung und Bedienung systembedingt deutlich unterscheiden.

Die eLib ist auf der Basis von Hyper-G/HyperWave implementiert und enthält auch die Server der IMU und des ICM'98 (siehe die gesonderten Projektbeschreibungen). Jetzt ist auch die (mit 1,5 Gigabyte und über 25.000 Softwaremodulen) sehr umfangreiche Netzbibliothek *netlib* mathematischer Softwarebibliotheken erstmals in einem Hyper-G-Server integriert und damit ebenfalls hierarchisch absuchbar

<http://elib.zib.de/netlib/> .

Zwischen den Navigationsmodi Browsen und Suchen kann der Benutzer nun auf jeder Hierarchieebene umschalten. Damit läßt sich auch die Suche inhaltlich präzisieren.

Die Errichtung eines Berlin-Brandenburger-Brokers (BBB)

<http://elib.zib.de:88/Harvest/brokers/Berlin/> ,

ermöglicht nunmehr die Suche über die in dieser Region vorhandenen mathematischen online-Ressourcen im WWW bzw. im Internet. Aufbauend auf der *Harvest*-Software, mit der die entsprechenden Informationen gesammelt und zusammengeführt werden, ist dies auch ein erster "regionaler" Schritt in Richtung auf ein nationales Orientierungs- und Suchsystem für die Mathematik.

Der Einsatz des Mailverteilers *Majordomo* und seine Intergration in den eLib-Server erlauben die Einrichtung und effiziente Betreuung von moderierten elektronischen Diskussionslisten

<http://elib.zib.de/Math.econf/>

für eine Reihe von Fachgruppen der DMV, deren Beiträge automatisch in absuchbaren Archiven abgelegt werden.

Hyper-G/HyperWave: Server und Lehrbuch

Bearbeitet von: W. Dalitz, G. Heyer

Kooperationspartner: Institute for Information Processing and Computer Supported New Media (IICM) der Technischen Universität Graz, Österreich, Hyper-G Consortium

Wegen der überzeugenden Konzepte von Hyper-G [1],[2],[5] setzt die Abteilung Wissenschaftliche Informationssysteme für den Aufbau verschiedener Informationsangebote (IMU, ICM'98, Math-Net Links, netlib) die in Graz entwickelte Server-Software ein. Im Gegensatz zu anderen WWW-Servern erlaubt Hyper-G eine hierarchische Strukturierung des Informationsangebotes, das simultan in eine objektorientierte Datenbank integriert wird. Es stellt dabei die Struktur und die Abhängigkeit eines Dokumentes sowohl dem Ersteller wie auch dem Leser graphisch dar und bietet viele weitere Orientierungshilfen. Alle Dokumente werden automatisch in der integrierten Datenbank nach Titeln, Stichworten und im

Volltext indexiert und sind damit auf vielfältige Art und Weise suchbar. Dieselbe Datenbank verwaltet auch die Hyperlinks zwischen den Dokumenten und bewahrt somit deren Konsistenz bei Umstrukturierungen, so daß es z.B. keine "hängenden Links" mehr gibt.

Die Erfahrungen beim Aufbau der eigenen, umfangreichen Informationsangebote der Abteilung, insbesondere der für die *International Mathematical Union (IMU)* mit Hyper-G sind in ein Lehrbuch [1] eingeflossen, das auch im Internet frei verfügbar ist

<http://elib.zib.de/math.publ.books.hyper-g> .

Das im letzten Berichtszeitraum beim dpunkt-Verlag, Heidelberg, erschienene Buch liegt jetzt in einer aktualisierten Version in englischer Sprache vor [2].

Das ZIB ist Mitglied des Hyper-G-Konsortiums, das die weitere Entwicklung von Hyper-G bzw. seiner internationalen Version HyperWave und der zugrundeliegenden Software koordiniert. Die Abteilung hat die weitere Entwicklung von Hyper-G/HyperWave und deren Implementierung kritisch und intensiv mit dem IICM diskutiert und wesentliche Verbesserungen erreicht.

1. W. Dalitz, G. Heyer: *Hyper-G - das Internet-Informationssystem der 2. Generation*. dpunkt Verlag, Heidelberg, 1995. Internet:
<http://elib.zib.de/math.publ.books.hyper-g>
2. W. Dalitz, G. Heyer: *HyperWave - The New Generation Internet Information System based on Hyper-G*. dpunkt Verlag, Heidelberg, 1996
3. W. Dalitz, M. Grötschel, G. Heyer, J. Lügger, W. Sperber (Redaktion): *Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)*. Vorhabenbeschreibung des DFN-Projektes DT11, ZIB TR 96-13. Internet:
<http://elib.zib.de/math.org.softinf.pub.math-net.vorhabenbeschreibung>
4. M. Grötschel, J. Lügger, W. Sperber: *DMV-Vorhaben "Verbesserung des benutzerorientierten Zugriffs auf fachspezifische Online-Datenbanken und CD-ROM für Mathematische Institute in der Bundesrepublik Deutschland"* - Abschlußbericht. ZIB TR 96-02, 1996; Internet:
<ftp://ftp.zib.de/pub/zib-publications/reports/TR-96-02.ps>
5. G. Heyer, W. Dalitz: *Internet-Informationssysteme der zweiten Generation*. UnixOpen 4/96, S. 118-122
6. J. Plümer, R. Schwänzl: *Harvesting Mathematics*, ZIB TR 96-01, Internet:
<ftp://ftp.zib.de/pub/zib-publications/reports/TR-96-01.ps>

3.2.3 Informationstechnische Werkzeuge für Museen

Bearbeitet von: C. Saro, B. Schröder, K. Mader, K. Volkmann

Kooperationspartner: Institut für Museumskunde (Staatliche Museen zu Berlin), Bayerisches Nationalmuseum, Deutsches Historisches Museum, Robert-Bosch-Stiftung

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.

Weiterhin hat das ZIB direkte Kooperationsverträge mit größeren Museen (Deutsches Historisches Museum seit 1991, Bayerisches Nationalmuseum seit 1995).

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.

Neben der Weiterentwicklung des Datenbankprogramms GOS zur Unterstützung der konventionellen Dokumentation in den Museen wurde 1996 an der Anbindung von GOS-Datenbanken an das Internet (WWW) gearbeitet. Seit April ist ein (kleiner) Teil der bei der „normalen“ Inventarisierung erfaßten Daten des Deutschen Historischen Museums über das WWW zugreifbar

<http://www.dhm.de/datenbank>.

Das Angebot wird pro Woche von über 100 Teilnehmern genutzt.

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.
- Forschungs- und Entwicklungsarbeiten auf dem Gebiet der angewandten Informatik.

Forschungs- und Entwicklungsarbeiten des Rechenzentrums sind grundsätzlich an die Serviceaufgaben gebunden. Ihr Anteil an den Aktivitäten des Rechenzentrums ist in den letzten Jahren stetig gewachsen.

Entsprechend der forschungspolitischen Schwerpunktsetzung des Landes Berlin im IuK-Bereich bildet das High Performance Scientific Computing (HPSC) einen wichtigen Arbeitsschwerpunkt im ZIB. Teilgebiete sind die Rechnernetztechnik, die wissenschaftliche Visualisierung, die Algorithmen zur Behandlung komplexer mathematischer Modelle, die Modellierung, die Programmierung und Programmoptimierung für Höchstleistungsrechner und der Betrieb von (verteilten) Höchstleistungssystemen. In allen diesen Teilgebieten leistet das ZIB eigene Beiträge und arbeitet national und international mit anderen Institutionen und Forschern zusammen. In diesem Kapitel wird lediglich über den Anteil des Rechenzentrums an den HPSC-Aktivitäten des ZIB berichtet.

4.2 Ausbau und Betrieb des Landeshöchstleistungsrechners

Der „Berliner Landeshöchstleistungsrechner“ ist ein verteiltes System aus diversen Komponenten für Berechnungen und Datenhaltung. Er besteht zur Zeit aus einem Parallelrechner und einem Vektorrechner im ZIB sowie den Berliner Anteilen an den Höchstleistungsrechnern im Norddeutschen Vektorrechnerverbund der Länder Berlin, Niedersachsen und Schleswig-Holstein (NVV). Das gesamte verteilte System wird durch ein gemeinsames Zulassungsverfahren, ein gemeinsames Zugangssystem (NQE) und einheitliche Benutzer- und Projektkennungen zusammengehalten. Alle Komponenten des Landeshöchstleistungsrechners einschließlich des Parallelrechners sind seit ihrer jeweiligen Installation voll ausgelastet. Durch Verbesserungen an dem vom ZIB entwickelten Queue-Scheduling konnte der Anteil der an Benutzer abgebbaren Rechenzeit des Parallelrechners

von durchschnittlich etwa 75% (erste Jahreshälfte 1996) auf etwa 85% (zweite Jahreshälfte 1996) gesteigert werden. Der Anteil der (ca. 50) vom Zulassungsausschuß empfohlenen Projekte an der an Benutzer abgegebenen Gesamtkapazität beträgt zur Zeit über 90%, ohne daß die direkt von den Universitäten oder vom ZIB zugelassenen kleineren Projekte dadurch beeinträchtigt werden. Diese kleineren Projekte dienen der Lehre, der Methodenforschung oder der Vorbereitung von Großprojekten.

Die Systemkonfiguration im ZIB ist aus der Abbildung auf der folgenden Seite zu entnehmen. Wesentliche Änderungen hat es 1996 im Bereich der Datenhaltung gegeben: Die für die Datenhaltung am Vektorrechner Cray J932 eingesetzten Bandkassetten in 36-Spur-Technik (Kapazität 1,5 GByte/Kassette) wurden einschließlich der zugehörigen Bandgeräte gegen D3-Bandkassetten (Kapazität 50 – 100 GByte/Kassette, sog. "Redwood-Technik" der Firma STK) ausgetauscht. Die Schreib- und Lesegeschwindigkeit der neuen Bandgeräte ist in der Praxis etwa eine Größenordnung höher als die der alten Geräte. Die Plattenkapazität konnte dem Bedarf angepaßt werden, ohne allerdings die I/O-Bandbreite entsprechend zu erhöhen. Der gestiegene Speicherbedarf ist in erster Linie durch die größere Funktionsvielfalt der angebotenen Software zu erklären (siehe "Tätigkeit der Fachberater") und durch ein Projekt der Umweltforschung (Simulation von Stofftransporten in der Atmosphäre).

Das Software-Angebot konnte unter Berücksichtigung des Benutzerbedarfs durch die engagierte Mitarbeit der Fachberater weiter ausgebaut werden, wobei die Arbeiten im Systembereich zur Sicherung eines stabilen und reibungslosen Rechenbetriebes beitrugen. So wurden in den Bereichen Betriebssystem, System-Software, Compiler und Bibliotheken jeweils die aktuellen Produktversionen installiert. Für den Parallelrechner wurde ein eigenes Scheduling-System entworfen, welches die besonderen Bedürfnisse der Großprojektbenutzer berücksichtigt. Aus der Kooperation mit dem Forschungszentrum Jülich (KFA) wurden die Programmierwerkzeuge TOP², PARvis und VAMPIR für den Parallelrechner CRAY T3D bereitgestellt. Für den Anwendungsbereich Chemie konnte zusätzlich zur Portierung von Forschungscode für den Parallelrechner das Angebot an Anwendungs-Software für den Vektorrechner durch das Produkt MOLPRO 96 und durch neue Versionen von ACES II und Gaussian 94 ergänzt werden.

Gleichzeitig mit der Installation des Parallelrechners CRAY T3E im 1. Quartal 1997 werden die bestehenden dynamischen Engpässe bei der Plattenperipherie (siehe oben) durch Lieferung eines zusätzlichen Ein/Ausgabesystems mit den erforderlichen Anschlußkomponenten für Platten-, Band- und Netzperipherie beseitigt. Dieser Rechner wird bereits die neueren, 25% leistungstärkeren Prozessoren haben. Mit dem Einsatz des auf einer Microkernel-Architektur basierenden Betriebssystems UNICOS/mk ist eine Verbreiterung des Softwareangebotes im Anwendungsbereich auch für den Parallelrechner zu erwarten.

Die geschilderte Rechnerausstattung des ZIB ist ein technisches Gesamtsystem, in das ein Rechner der HPSC-Leistungskategorie, wie er in den neueren 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. Trotzdem ist der weitere Ausbau des Parallelrechners im ZIB durch die noch unklare Situation bei den Investitionsmitteln akut gefährdet. Langfristig hat sich zwar das Land Berlin zur Beteiligung an einem „Verteilten Höchstleistungsrechner Nord“ bereit erklärt und wird demnach auch die erforderlichen Investitionsmittel in die Planung einstellen. Es darf aber nicht übersehen werden, daß durch die Unterlassung von Investitionen in der Gegenwart der politische Wille für die Zukunft äußerst wirksam unterlaufen wird.

Am RRZN wurde der Vektorrechner durch einen VPP300 der Firma Fujitsu ersetzt und ein kleiner Parallelrechner Cray T3E (für die Programmentwicklung) installiert.

In Kiel ist inzwischen die Vektorrechnerkapazität durch Installation eines Vektorrechners Cray T94 etwa verfünffacht worden.

4.3 Großprojekte und Fachberatung

Die vom Zulassungsausschuß empfohlenen Großprojekte verteilen sich wie folgt auf die Fachgebiete (Stand September 1996):

Herkunft	Chemie	Geowissenschaften	Ingenieurwissenschaften	Physik	Summe
FU Berlin	3	5		1	9
HU Berlin	6	1		4	11
TU Berlin	10		5	5	20
Dresden	1				1
Halle	1				1
Leipzig	3				3
Potsdam	2			1	3
Zeuthen				1	1
	26	6	5	12	49

Der Rechenzeitverbrauch durch die einzelnen Fachgebiete entspricht im wesentlichen den zugewiesenen Rechenzeitkontingenten. Auf dem Parallelrechner war im dritten Quartal 1996 das Fachgebiet mit dem größten Rechenzeitverbrauch das Gebiet der Ingenieurwissenschaften (46%) gefolgt vom Gebiet Physik (21%) und dem Gebiet Chemie (20%), während das Gebiet Geowissenschaften (13%) den „kleinsten“ Rechenzeitanteil in Anspruch nahm. Diese Verteilung weicht durch-

aus von der Verteilung im Vorjahr ab, bei der die Physik mit 53% den größten Rechenzeitanteil in Anspruch nehmen konnte.

Großprojekte sind in der Regel keine reinen Berliner Projekte, sondern werden von Forschern vorangetrieben, die aus jeweils verschiedenen nationalen und internationalen wissenschaftlichen Einrichtungen kommen. Insoweit wird die Unterscheidung zwischen Projekten, die von „Einrichtungen im Lande Berlin“ getragen werden und Projekten, die von „anderen Einrichtungen“ getragen werden, immer fragwürdiger. Hingegen ist im Bereich der Großprojekte die Unterscheidung zwischen öffentlich geförderten Projekten und Industrieprojekten nach wie vor in der Regel einfach und klar. Diesen Umständen soll die Entgeltordnung des ZIB künftig Rechnung tragen.

Im Vergleich zum Vorjahr fällt die starke Zunahme der T3D-Projekte aus dem Bereich der Chemie auf. Hier hat der Fachberater des ZIB, gemeinsam mit Software-Herstellern besonders erfolgreiche Arbeit geleistet. Die ebenfalls neuen Projekte aus dem Bereich der Geowissenschaften betreffen die Untersuchung von Stofftransporten in der Atmosphäre und nutzen – nicht zuletzt durch die Tätigkeit des Fachberaters – den Parallelrechner besonders effizient aus. Die Projekte aus den Ingenieurwissenschaften sind überwiegend (4 von 5) eingebettet in die europaweit koordinierte Arbeit auf dem Gebiet der Luft- und Raumfahrt und behandeln spezielle Großprobleme der Computational Fluid Dynamics.

Als Vorbereitung auf den neuen Parallelrechner T3E wurden vier besonders große, in der Produktion befindliche Projekte bereits für den T3E angepaßt und können sofort nach Installation des T3E dort die Produktion aufnehmen. Für diese Umstellungsarbeiten wurden T3E-Rechner in Eagan (USA) und Jülich eingesetzt. Der Einfluß der am ZIB bearbeiteten Probleme auf die Entwicklung des HPSC, insbesondere auf die Erschließung von Software (nicht zuletzt für die Höchstleistungsrechner in Stuttgart und Jülich) ist kaum zu unterschätzen, wurde doch für mehr als anderthalb Jahre im ZIB der leistungsstärkste Parallelrechner Deutschlands betrieben, was bedeutet, daß einige Probleme überhaupt nur am ZIB behandelt werden konnten. Die hier erarbeiteten Lösungen, Dokumentationen und Programme können nun an anderer Stelle auf den dort inzwischen vorhandenen größeren Maschinen weiter behandelt werden. Dies zeigt, daß eine deutschlandweite Koordination der Beschaffung und der Nutzung von Höchstleistungsrechnern sinnvoll und wirtschaftlich erforderlich ist.

Fachberatung: Jedem vom Zulassungsausschuß empfohlenen Projekt ist ein Fachberater des ZIB zugeordnet. Zur Zeit werden die Fachgebiete wie folgt betreut: Dr. Wolfgang Baumann (Ingenieurwissenschaften), Dr. Thomas Steinke (Chemie), Dr. Peter Strauch (Geowissenschaften) und Dr. Hinnerk Stüben (Physik). Bei der Programmportierung und –optimierung wird von Dipl.-Ing. Klaus Ketelsen (Cray Research GmbH) wesentliche Arbeit geleistet. Für Fragen der angewandten Mathematik, der Informatik und der Visualisierung werden in der

Regel andere Fachberater sowie der Forschungsbereich des ZIB einbezogen. Die Fachberater pflegen Kontakte zu den Anwendern und beteiligen sich darüber hinaus an der Forschung in einschlägigen Gruppen. Konkrete Aufgaben der Fachberater sind:

- Hilfe bei der Auswahl des geeigneten Rechners für gegebene Programme. Dabei werden auch die Höchstleistungsrechner in Jülich, Zeuthen und Stuttgart berücksichtigt.
- Diskussion der zugrundeliegenden Modelle
- Diskussion der eingesetzten Software
- Mitarbeit bei der Entwicklung neuer Programme und Diskussion der zugrundeliegenden Algorithmen
- Optimierung der Programme für die verwendeten Systeme
- Auswahl, Installation und Pflege sowie Dokumentation von Software.

Die Beratung hat neben dem Tagesgeschäft je nach Fachgebiet unterschiedliche Schwerpunkte. So werden in der Chemie überwiegend und in den Ingenieurwissenschaften teilweise kommerzielle bzw. akademische Software-Pakete eingesetzt. Hier sind die Fachberater Ansprechpartner für Software-Probleme (einschließlich Analyse und Behebung von Software-Fehlern) bzw. Kontaktpersonen zwischen Nutzern und Software-Anbietern.

Das ZIB kann im NVV den größten Umfang an aktueller Chemie-Software anbieten. Zur Zeit sind alle wichtigen kommerziellen und akademischen Pakete verfügbar (siehe URL

<http://www.zib.de/ZIBdoc/Anwendungssoftware/Chemie/>).

Bedingt durch das beschränkte Angebot an kommerzieller Chemie-Software für MPP-Systeme wird auch heute noch der größte Teil der Chemie-Produktion auf dem Vektorrechner Cray J90 durchgeführt. Die am häufigsten benutzten Pakete sind hierbei *Gaussian*, *DGauss*, *MOLPRO* und *MNDO*, etwas seltener werden *GAMESS (UK)*, *CADPAC* und *ACESII* zur Problemlösung eingesetzt. Kraftfeldprogramme spielen praktisch keine Rolle. In Zusammenarbeit mit der Cray Research GmbH konnte die vorfristige Bereitstellungen von *DGauss* und *Turbomole* für einen begrenzten Benutzerkreis auf dem Cray T3D erreicht werden. Zum gegenwärtigen Zeitpunkt laufen daneben auf dem T3D *Car-Parinello*-Codes und QMD-Programme, die entweder selbst und/oder in Zusammenarbeit mit dem ZIB erstellt wurden bzw. aus Kooperationen der Berliner Institute stammen.

In den anderen Bereichen liegt der Schwerpunkt der Beratungstätigkeit auf der Portierung der in der Anwenderschaft geschriebenen Programme auf den Parallelrechner des ZIB. Die Parallelisierung von Programmen ist eine anspruchsvolle und aufwendige Aufgabe, die in der Regel nicht mehr in angemessener Zeit vom Anwender selbst durchgeführt werden kann. Dieses Problem wird durch die Zusammenarbeit zwischen Anwendern und Fachberatern erfolgreich gelöst. Diese

Zusammenarbeit ist unterschiedlich eng. Sie reicht von der Erörterung von Parallelisierungsstrategien über Hilfe im Falle des Auftretens von Problemen bei der Implementierung bis hin zur vollständigen Portierung durch das ZIB.

Ein großer Teil der in der Anwenderschaft geschriebenen Programme ist bereits auf die in der Zukunft immer bedeutender werdende parallele Rechnerarchitektur gebracht worden. Als Beispiele seien folgende Programme genannt, die alle am ZIB portiert worden sind:

Astrophysik: Aus dem Institut für Astronomie und Astrophysik der TU Berlin wurde das Programm RADTRAF parallelisiert. Das Programm berechnet Strahlungstransport in zirkumstellaren Staubhüllen. In einem weiteren Schritt soll RADTRAF an das Programm HYDRO gekoppelt werden. HYDRO simuliert die Hydro- und Thermodynamik in Sternhüllen. Da HYDRO nicht parallelisierbar ist, wird diese Anwendung als verteilte Hochleistungsrechneranwendung zwischen einem Vektor- und einem Parallelrechner realisiert.

Chemie: Aus dem Institut für Theoretische Physik der Universität Dresden wurde das Dichtefunktional-Programm DDLCAO parallelisiert. Ein approximatives Schema ermöglicht die schnelle Berechnung der Kräfte auf die Atome. Damit sind moleküldynamische Simulationen auf quantenmechanischem Niveau an relativ großen Systemen (Metallclustern, Makromoleküle) bei Verwendung von über 3000 Basisfunktionen durchführbar.

Klimaforschung: Aus dem Institut für Meteorologie der FU Berlin wurden die Programme STRATO und KSP parallelisiert. STRATO ist ein „mechanistisches“ Modell der Tropo-, Strato- und Mesosphäre. Mit STRATO werden u.a. Simulationen zur Analyse und Diagnose der Austauschvorgänge (insbesondere der dynamisch bedingten Ozonschwankungen) bei gestörter Stratosphäre mit einem hochaufgelösten räumlichen Modell für die polare winterliche Stratosphäre durchgeführt. KSP wird im Rahmen eines vom Umweltbundesamt (UBA) geförderten Forschungs- und Entwicklungsvorhabens eingesetzt. Das Umweltbundesamt will mit diesem F&E-Vorhaben einen substantiellen Beitrag zur Harmonisierung der Ausbreitungsrechnung für Genehmigungsverfahren im Rahmen der EU leisten.

Polymerphysik: Aus dem Institut für Theoretische Physik der TU Berlin (Sonderforschungsbereich 335, Anisotrope Fluide) wurde das Programm MDP parallelisiert. Das Programm simuliert Polymerschmelzen in Scher- und Dehnströmungen mit der Methode der Nichtgleichgewichts-Molekulardynamik.

Strömungsmechanik: Aus dem Hermann-Föttinger-Institut der TU Berlin (HFI) wurde das Programm MLET parallelisiert. MLET ist ein CFD Programm, das iterativ Lösungen der Navier-Stokes-Gleichungen für instationäre turbulente Strömungen durch Large-Eddy-Simulation bestimmt. Auf dem T3D des ZIB ist es erstmals möglich, ein Problem mit etwa 100 Mio. Gitterpunkten zu rechnen. Es belegt wegen des großen Arbeitsspeicherbedarfs den gesamten T3D (256 Prozessoren).

Projektschwerpunkt Chemie

Fachberater: Thomas Steinke

Wissenschaftliche Aktivitäten

Umgebungseinflüsse: In Kooperation mit T. Clark (Computer-Chemie-Centrum Erlangen) wird das gemeinsame DFG-Projekt „*Umgebungseinflüsse*“ im 3. Quartal beendet. Gegenstand des Projektes ist die Implementierung von verbesserten Verfahren zur Behandlung der Dispersions-Wechselwirkung eines Moleküls mit umgebenden Lösungsmittelmolekülen. Das schlechte Konvergenzverhalten bisheriger Entwicklungen bei unsymmetrischen Molekülen wurde durch einen atomzentrierten Ansatz modifiziert [1]. Testrechnungen an einer Vielzahl von Molekülen erbrachten, daß Trends richtig wiedergegeben werden. Gegenwärtig steht die Entwicklung eines atomzentrierten Ansatzes unter Verwendung der pre-NAOs im Vordergrund. Aus dem Zusammenhang zwischen Hybridisierungsgrad und Polarisierbarkeit eines sp^n -Hybridorbitals soll die Atompolarisierbarkeit direkt berechnet werden. Die Implementierung und Tests dieses Ansatzes stehen noch an. Das Projekt wurde von der DFG bis Ende 1997 verlängert.

RAMAN-Spektreninterpretation: In diesem Jahr wurde die Zusammenarbeit mit dem Max-Born-Institut für nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie (MBI) intensiviert. Gegenstand der Kooperation ist die Untersuchung der Dynamik von photoinduzierten intramolekularen Protonen-Transfer-Reaktionen in heterocyclischen Aromaten. Das Verständnis der Kopplung von Protonen-Transfer-Freiheitsgraden mit der elektronischen Anregung setzt die genaue Zuordnung der Raman-Schwingungsbanden voraus. Dazu wurden Raman-Schwingungsspektren der obigen Verbindungen auf NDDO-Niveau berechnet. Durch Vergleich der experimentell gewonnenen mit den theoretisch ermittelten Spektren konnten anhand der auffälligsten Deuterium-Verschiebungen die Schwingungsmoden eindeutig zugeordnet werden [3]. Die Kooperation mit dem MBI wird im nächsten Jahr fortgesetzt. Von aktuellem Interesse ist die Modellierung des Schwingungsverhaltens im angeregten Zustand mit unterschiedlichen theoretischen Ansätzen (semi- und nicht-empirische Verfahren).

1. G. Rauhut, A. Alex, J. Chandrasekhar, Th. Steinke, W. Sauer, B. Beck, M. Hutter, P. Gedeck, T. Clark: *VAMP rel. 6.0.0*, Erlangen 1996
2. D. Stalling, Th. Steinke: *Visualization of Vector Fields in Quantum Chemistry*, ZIB Preprint, SC 96-01
3. M. Pfeiffer, K. Lenz, A. Lau, T. Elsaesser, Th. Steinke: *Analysis of the Vibrational Spectra of Heterocyclic Aromatic Molecules Showing Internal Proton and Deuterium Transfer*, J. of Raman Spect., 28, (1997)
4. Th. Steinke, Th. Heine, G. Seifert: *Porting the Non-empirical Molecular Dynamics Code DDLCAO on Cray T3D, A Status Report*, in Vorbereitung

Projektschwerpunkt Ingenieurwissenschaften

Fachberater: Wolfgang Baumann

Wissenschaftliche Aktivitäten

Der Fachberater arbeitet wissenschaftlich in enger Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Prof. Thiele, (Hermann-Föttinger-Institut der TU Berlin (HFI)) auf dem Gebiet Computational Fluid Dynamics mit dem Schwerpunkt Modellierung und Berechnung der Austauschvorgänge in Mehrphasen-/Mehrkomponentenströmungen (Wärme, Stoff, Impuls, Turbulenz).

Daneben gilt derzeit das besondere Interesse des Fachberaters der Unterstützung der Projekte durch Nutzbarmachung neuerer Methoden und Konzepte wie z.B. die interaktive Simulation, um damit die verfügbaren Ressourcen möglichst nah an den Arbeitsplatz der Benutzer zu bringen und effektiv zu nutzen. In Zusammenarbeit mit dem HFI arbeitet der Fachberater an der Entwicklung von Hilfsmitteln zur interaktiven, netzverteilten Visualisierung und Simulation. Eine grafische Oberfläche mit integriertem Pre- und Postprocessing ermöglicht es, von der Workstation des Bearbeiters aus jederzeit den momentanen Zustand der Simulation und die Ergebnisse zu beurteilen und die Simulation interaktiv zu steuern und im Ablauf zu beeinflussen [1].

Die im BRTB begonnenen Arbeiten [2] werden gegenwärtig innerhalb des BMBF-geförderten Gemeinschaftsprojektes EFENDA fortgesetzt. Dort soll die gesamte Prozeßkette zum aerodynamischen Entwurf von Flugzeugen bestehend aus Preprocessing, Simulation und Postprocessing in die einheitliche multimediale kooperative Benutzeroberfläche COVISE integriert werden, die damit eine verteilte kooperative Prozeßvisualisierung und -steuerung durch ein Entwicklerteam gestattet. Weiterführende Konzepte zur interaktiven Simulation sollen im Rahmen eines Gemeinschaftsprojektes von HFI und ZIB umgesetzt werden, für das ein Förderantrag beim DFN-Verein gestellt wurde.

1. W. W. Baumann, K. Grunert: *An interactive Distributed Simulation and Visualisation Environment, Non-classical Material Models in Machine Design*, Politechnika Poznanska, Poznan, Polen (1996) pp. 21-28.
2. W. Baumann, H.-C. Hege, U. Schwarz und H. Stüben: *Netzverteilte Visualisierung und Simulation*, ZIB Technical Report, TR 96-08

Projektschwerpunkt Physik

Fachberater: Hinnerk Stüben

Wissenschaftliche Aktivitäten

Das wissenschaftliche Arbeitsgebiet des Fachberaters Physik ist die Gitterfeldtheorie. In diesem Gebiet werden Untersuchungen zur Theorie der Elementarteilchen mithilfe von Computersimulationen durchgeführt. Derartige Untersuchungen gehören zu den Grand-Challenges des Supercomputings. Der Fachberater

gehört derzeit zwei Arbeitsgruppen an, der Gruppe von Prof. Linke (Freie Universität Berlin) und Prof. Schierholz (DESY-IfH Zeuthen) sowie der Gruppe von Prof. Müller-Preussker (Humboldt-Universität zu Berlin).

Beide Arbeitsgruppen untersuchen die Quantenelektrodynamik (QED) mit dynamischen Fermionen. Im Gegensatz zur Quantenchromodynamik (QCD), die zum Ziel hat, berechnete Teilcheneigenschaften mit experimentellen Ergebnissen zu vergleichen, stehen beim Studium der QED allgemeine Fragen zur Struktur von Gitterfeldtheorien im Vordergrund. Untersucht werden verschiedene Formulierungen der QED auf dem Gitter sowie die bisher unbewiesene Frage ihrer mathematischen Konsistenz.

Letztere Frage wird von der Gruppe Linke/Schierholz untersucht. Der Gruppe ist es für die nicht-kompakte QED mit *staggered* Fermionen gelungen, die Abhängigkeit des Ordnungsparameters von der Gittergröße quantitativ zu beschreiben und damit die Zustandsgleichung der Theorie im unendlichen Gittervolumen zu studieren. Diese Untersuchungen festigen das Bild, daß die QED eine *triviale* Theorie ist, d.h., daß die Theorie im Limes unendlich kleinen Gitterabstandes keine wechselwirkenden Teilchen beschreibt. Damit konnte diese seit Jahrzehnten offene Frage der QED mit numerischen Methoden beantwortet werden. Dieser Schluß wurde durch die direkte numerische Berechnung der (renormierten) Kopplungskonstanten der Theorie weiter gefestigt (ein entsprechendes Papier ist in Vorbereitung).

Die Gruppe von Prof. Müller-Preussker untersucht verschiedene Formulierungen der kompakten QED mit Wilson-Fermionen. Ziel der Untersuchungen ist, die im Vergleich zu den *staggered* Fermionen kompliziertere Phasenstruktur zu verstehen. Von zentraler Bedeutung ist das Auffinden des chiralen Limes. Es wurde eine neue Methode zur Bestimmung der Masse des pseudoskalaren Teilchens entwickelt, mit deren Hilfe das Problem des chiralen Limes wesentlich genauer studiert werden konnte als mit Standardmethoden. Aufgrund der kompakten Eichfelder ergeben sich interessante Analogien zur QCD.

Die erwähnten Rechnungen zur QED erfordern 64 Bit Rechengenauigkeit und können aus diesem Grunde nicht auf dem Spezialrechner *Quadrics* am DESY-IfH in Zeuthen durchgeführt werden. Beide Arbeitsgruppen rechnen daher auf dem T3D des ZIB. Die entsprechenden Programme sind am ZIB portiert worden.

1. M. Göckeler, R. Horsley, V. Linke, P. Rakow, G. Schierholz, H. Stüben: *Seeking the Equation of State of Non-Compact Lattice QED*, ZIB Preprint, SC 96-15, erscheint in Nuclear Physics B.
2. A. Hofericher, V.K. Mitrjushkin, M. Müller-Preussker, H. Stüben: *Dynamical Wilson Fermions, the Problem of the Chiral Limit in Compact Lattice QED*, Preprint, DESY 96-207, HU Berlin EP-96/36 (1996)

4.4 Software-Ausbau im Berichtszeitraum

Auch im Jahre 1996 konnte das Software-Angebot zur Versorgung der Anwendungsbereiche weiter ausgebaut und um neue Produkte ergänzt werden. Im Bereich Betriebssysteme, System-Software und Compiler wurden die aktuellen Versionen installiert. Das Angebot an kommerziell verfügbarer Software für den Parallelrechner CRAY T3D ist weiterhin gering, so daß in den Großprojekten vorwiegend selbst entwickelte Software eingesetzt wird, wobei die Portierung der Anwendungen für den Parallelrechner CRAY T3D durch einen Mitarbeiter der Cray Research GmbH unterstützt wurde.

Wie schon bereits im Vorjahr wird der Vektorrechner CRAY Y-MP4E überwiegend in seiner Vorrechnerfunktion für den Parallelrechner CRAY T3D eingesetzt. Die auf dem Vorrechner verfügbare Anwendungs-Software wird daher in den Tabellen nicht gesondert ausgewiesen.

Betriebssysteme

Auf dem Vektorrechner CRAY J90 und dem Vorrechner CRAY Y-MP wurden die Version 9.0 des Betriebssystems UNICOS und die aktuelle Version 2.4 der Data Migration Facility (DMF) bereitgestellt. Auf dem SPARCserver *ufer* wurde die Betriebssystemversion Solaris 2.5 installiert.

Tabelle 1: Betriebssysteme

CRAY T3D	CRAY J90	SPARCserver <i>ufer</i>
UNICOS 9.0 UNICOS MAX 1.3	UNICOS 9.0	Solaris 2.5
DMF 2.4	DMF 2.4	
NQX 9.0	NQX 9.0	NQE 3.0

Der Berliner Landeshöchstleistungsrechner bildet gemeinsam mit den Höchstleistungsrechnern der Länder Niedersachsen und Schleswig-Holstein in Hannover und Kiel ein Verbundsystem, das über NQS betrieben wird.

Für den Parallelrechner CRAY T3D wurde ein eigenes Scheduling-Verfahren entwickelt, das in Abhängigkeit von der aktuellen Tageszeit automatisch unterschiedliche Betriebsarten zur Verfügung stellt:

- volle Auslastung des Parallelrechners mit Batchjobs bei Nacht, wobei Anwendungen, die den gesamten Parallelrechner belegen, nur in bestimmten Nächten gestartet werden,
- Freihalten von Knoten für interaktive Entwicklungsarbeiten bei Tage,
- Möglichkeit zur Reservierung von Blockzeiten für Großprojekte an Wochenenden.

Um im Bedarfsfall ein Anhalten der Anwendungen und Wiederaufsetzen zu ermöglichen, wurde ein Verfahren entwickelt, das es gestattet, laufende T3D-Anwendungen auf einen reservierten Plattenbereich auszulagern und später von dort

in den Parallelrechner zurückzuladen, um sie an der Unterbrechungsstelle wieder aufsetzen zu können (MPP-Rollout und -Rollin mit Checkpointing).

Compiler

Nach wie vor ist Fortran die wichtigste Programmiersprache im naturwissenschaftlich-technischen Bereich, wobei Fortran 90 zunehmend an Bedeutung gewinnt und mittelfristig Fortran 77 verdrängen wird. Dementsprechend finden beim Cray CF77 Compiler keine Neuentwicklungen mehr statt. Der Cray CF90 Compiler ist bzgl. der Code-Optimierung seinem Vorgänger CF77 inzwischen überlegen. Bei Anwendungen aus dem Bereich Informatik ist ein Trend in Richtung C++ erkennbar.

Tabelle 2: Compiler

CRAY T3D	CRAY J90	SPARCserver <i>ufer</i>
CF77_M 6.0	CF77 6.0	Sun F77 4.0
CF90_M 2.0	CF90 2.0	NAGWare f90 2.2
SCC_M 5.0	SCC 4.0	Sun ANSI C 4.0 GNU C 2.7
C++ 2.0	C++ 2.0	Sun C++ 4.1 GNU C++ 2.7

Programmierwerkzeuge

Für die Parallelisierung von Anwendungen für den Parallelrechner CRAY T3D bietet die Cray Shared Memory Library eine leistungsfähige und leicht verständliche Programmierschnittstelle. Für Anwendungen, die auf unterschiedlichen Plattformen ablauffähig und damit portabel sein müssen, wird zunehmend PVM durch das standardisierte Message Passing Interface (MPI) ersetzt. Dem wurde durch die Bereitstellung von MPICH auf allen Plattformen Rechnung getragen. Die über eine Kooperation mit dem Forschungszentrum Jülich (KFA) bereitgestellten Optimierungswerkzeuge TOP² und PARvis wurden um das Tool VAM-PIR zur Laufzeitanalyse von MPI-Anwendungen ergänzt.

Tabelle 3: Programmierwerkzeuge

CRAY T3D	CRAY J90	SPARCserver <i>ufer</i>
CrayTools 2.0	CrayTools 2.0	SPARCworks 3.1
	AIT 2.1	
FM 1.1		
CRI/EPCC MPI 1.5a		
MPICH 1.0 MPE	MPICH 1.0 MPE	MPICH 1.0 MPE
PARMACS 6.0		
Cray MPP PVM-3 Cray Network PVM-3	Cray Network PVM-3	PVM 3.3
Cray Shmem Library		
TOP ²		
PARvis		
VAMPIR		

Numerische Software

Auf dem Landeshöchstleistungsrechner wurde die aktuelle Version 2.0 der Cray-Libs bereitgestellt. Über den NAG-Landesvertrag steht die NAG Libray in Fortran 77, Fortran 90 und ANSI C landesweit zur Verfügung. Sie wurde ergänzt um die parallele NAG Numerical PVM Library für den Parallelrechner CRAY T3D. Für die Programmentwicklung wurden auf dem SPARCserver *ufer* ScaLAPACK und BLACS bereitgestellt.

Tabelle 4: Numerische Software

CRAY T3D	CRAY J90	SPARCserver <i>ufer</i>
CrayLibs 2.0 (BLAS, BLACS, FFT, LAPACK, ScaLAPACK)	CrayLibs 2.0 (BLAS, FFT, LINPACK, EISPACK, LAPACK)	BLAS, BLACS, LAPACK, ScaLAPACK
	IMSL Parallel Libraries 3.0	
	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 17
		NAG Fortran 90 Library Release 1
NAG Numerical PVM Library		
		NAG On-line Supplement

Grafik und Visualisierung

Grafik- und Visualisierungsanwendungen werden zunehmend auf leistungsfähige dedizierte Grafikworkstations ausgelagert. Dementsprechend wurde das Angebot an Grafik- und Visualisierungs-Software auf dem Landeshöchstleistungsrechner nicht weiter ausgebaut. Ebenso wurde der Campusvertrag für AVS nicht verlängert.

Tabelle 5: Grafikbibliotheken und Plotprogramme

CRAY J90	SPARCserver <i>ufer</i>
CVT 3.1 (X11R6, Motif, OpenGL, Tcl, Tk)	OpenWindows 3.5
GKS, XGKS	GKS, XGKS
NAG Graphics Library Mark 3	NAG Graphics Library Mark 3
NCAR Graphics 3.2	NCAR Graphics 3.2
	SuperMongo

Tabelle 6: Visualisierungsumgebungen

CRAY T3D	CRAY Y-MP	CRAY J90	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

Für den Chemie-Bereich wurden MOLPRO96 als neues Produkt und aktuelle Versionen von GAUSSIAN 94 und ACES II bereitgestellt. Hier nicht aufgeführt sind jene Forschungs-codes, die in Zusammenarbeit mit den Anwendern für den Parallelrechner CRAY T3D portiert wurden.

Tabelle 7: Chemie-Pakete

CRAY T3D	CRAY J90		
Ab-initio-Programme	Ab-initio-Programme	Semiempirische Programme	Kraftfeld-Programme
GAMESS-US	ACES II	AMPAC 2.1	AMBER 3.0 A
SUPERMOLECULE	CADPAC 5.2	MNDO 94	GROMOS
	CRYSTAL 92	MOPAC 6.02	
	DGauss 3.0		
	GAMESS-UK 5.1		
	GAMESS-US		
	GAUSSIAN 94		
	MOLPRO 96		
	UniChem 3.0		

Strukturmechanik

Im Bereich Strukturmechanik werden wie bisher die Finite-Elemente-Systeme ABAQUS und ADINA eingesetzt.

4.5 Weitere Projekte des Rechenzentrums

Außer den Projekten der Benutzer und den damit zusammenhängenden Aktivitäten und eigenen Projekten der Fachberater, folgen aus den Dienstleistungsaufgaben des Rechenzentrums Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten auf dem Gebiet der angewandten Informatik, die unabhängig von den Fachgebieten der Anwender die Nutzung der Höchstleistungsrechner des ZIB erleichtern bzw. in vielen Fällen überhaupt erst ermöglichen. Unter den Projekten, die in diesem Zusammenhang entstanden sind, sind im folgenden zwei besonders dargestellt: das „Berlin Regional Testbed BRTB“ und das Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN. Neben diesen anspruchsvollen technischen Großprojekten ist das Rechenzentrum an kleineren Projekten, Kooperationen und Drittmittelaktivitäten beteiligt, die hier nicht weiter beschrieben werden sollen.

4.5.1 Berlin Regional Testbed BRTB (Hochgeschwindigkeitsnetz)

Das Berlin Regional Testbed (BRTB) mit einer Laufzeit vom 1. Oktober 1994 bis zum 30. September 1996 ist der regionale Berliner Teil des im Jahre 1993 vom Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes (DFN-Verein) mit Mitteln des BMBF ausgeschriebenen Projektes „Regional Testbed – RTB“. Ziel dieses Gesamtprojektes war, mit Förderung von regionalen Infrastrukturen und Anwendungen die Vernetzung einer beschränkten Anzahl von Institutionen (Universitäten, Fachhochschulen und Forschungseinrichtungen) einer jeweiligen Region zu erreichen und dadurch den Einstieg in ein deutschlandweites Hochgeschwindigkeitsnetz zu realisieren.

In Berlin lag die Koordinierung dieses Projekts beim ZIB. Im Rahmen dieses Projekts wurden die drei Berliner Universitäten, das Hahn-Meitner-Institut Berlin, das Institut für Software- und Systemtechnik (ISST) der Fraunhofer-Gesellschaft und das ZIB untereinander breitbandig auf der Basis der vom Land Berlin über das Landesamt für Informationstechnik (LIT) bereitgestellten Glasfaserleitungen mit vom DFN-Verein bzw. dem BMBF finanzierten Netzgeräten verbunden. Ohne Berücksichtigung der Kosten für Glasfaserleitungen und Netzgeräte betragen die übrigen Kosten ca. 5.8 Mio DM, davon entfielen ca. 2.3 Mio DM auf die vom ZIB realisierten Teilprojekte sowie auf die zentrale Projektleitung. Im Rahmen des BRTB wurden die folgenden fünf Anwendungsprojekte durchgeführt (in Klammern jeweils die federführende Einrichtung):

- Einheitliche Datenumgebung auf heterogenen Rechnersystemen (ZIB)
- Ein Hotline und Consulting System im Regionalen Testbed (ISST)
- Hypermediale-Lehreinheiten in der Studentenausbildung (FUB)
- Medizinische Bildverarbeitung (FUB)
- Visualisierung wissenschaftlicher Daten (ZIB).

Teilprojekt Einheitliche Datenumgebung auf heterogenen Rechnersystemen

In diesem Teilprojekt wurde der Einsatz des „Andrew File Systems“ (AFS) sowie des „Distributed Computing Environment / Distributed File Service“ (DCE/DFS) auf verschiedenen Rechnerplattformen über das Breitbandnetz im BRTB und darauf aufbauend mit der „Berliner Software Distribution“ (BeSD) ein System zur „Lastverteilung des Arbeitsaufwands“ beim Anbieten einer einheitlichen Benutzenumgebung auf vernetzten heterogenen Plattformen erprobt.

Aus Projektmitteln wurden zeitweise zwei wissenschaftliche Mitarbeiter finanziert. Folgende Mitarbeiter des ZIB waren an der Durchführung des Projektes beteiligt (* bedeutet zeitweise):

Leitung: G. Maierhöfer

Wissenschaftliche Mitarbeiter: M. Beier*, P. Müller

1. P. Müller: *Handbuch der Software Distribution (BeSD)*, ZIB Technical Report TR 96-4, 46 Seiten (1996)

Teilprojekt Visualisierung wissenschaftlicher Daten

Das Rechenzentrum des ZIB hat in Zusammenarbeit mit der Abteilung *Wissenschaftliche Visualisierung* das Projekt „Visualisierung wissenschaftlicher Daten“ durchgeführt. In dem Projekt wurden allgemeine Werkzeuge zur netzverteilten Visualisierung und Simulation sowie spezielle Pilotanwendungen für ausgewählte

Berliner Forschergruppen erstellt. Die Fachberater des ZIB haben insbesondere bei der Erstellung der Pilotanwendungen mitgewirkt.

Der im Rahmen dieses Projektes erstellte Film „Visualisierung der intramolekularen Cyclisierung in Lactamen“ ist in lokale Fernsehproduktionen eingegangen und von der Fa. TARGET (München) für eine Filmproduktion verwendet worden. Im Rahmen der Mitarbeit im Visualisierungsprojekt des BRTB entstand eine anwendungsspezifische Arbeitsumgebung für den Bereich CFD (vgl. Abschnitt 5.3.2). Erkenntnisse und Erfahrungen aus diesem Projekt führten außerhalb des BRTB u.a. zur Entwicklung einer verteilten Visualisierungsumgebung für Strömungssimulationen auf dem Massivparallelrechner im Rahmen einer Diplomarbeit. Die Anwendung wurde 1995 und 1996 auf der CeBit präsentiert.

Aus Projektmitteln wurden zwei wissenschaftliche und sechs studentische Mitarbeiter finanziert. Folgende Mitarbeiter des ZIB waren an der Durchführung des Projektes beteiligt (* bedeutet zeitweise):

Leitung: H.-C. Hege, H. Stüben

Wissenschaftliche Mitarbeiter: J.-C. Bachmann*, W. Baumann*, U. Schwarz, Th. Steinke*

Studentische Mitarbeiter: J. Becker*, A. Friedrich, R. Holzlöhner*, J. v. Kattché*, D. Limbach, F. Meißner*, A. Merzky*, J. Schmidt-Ehrenberg, M. Zöckler

1. W. Baumann, H.-C. Hege, U. Schwarz, H. Stüben: *Netzverteilte Visualisierung und Simulation*, ZIB Technical Report, TR 96-08

Betriebsaufnahme des Netzes

Mit der Betriebsaufnahme des Netzes zum 1. Juli 1995 zwischen HMI, FUB, ZIB, TUB und HUB werden neben den BRTB-Anwendungen auch der gesamte Netzverkehr zwischen diesen Einrichtungen ohne Beeinflussung der breitbandigen Anwendungen durchgeführt. Im Januar 1996 ist auch die zweite Verbindung von der FUB zur HUB über das LIT in Betrieb gegangen, so daß zwischen den fünf Hauptstandorten ringförmig ATM-Verbindungen geschaltet sind. Das ISST konnte erst im Sommer 1996 angeschlossen werden. Dieses ATM-Netz wird mit einer Grenzleistung von 155 Mb/s betrieben. Messungen im Rahmen des Projekts „Visualisierung wissenschaftlicher Daten“ ergaben, daß der einzelne Benutzer bei Verwendung geeigneter Hardware davon bis zu 24 Mb/s erhalten kann. Damit lassen sich z.B. Videofilme komprimiert (3 MByte je Sekunde Film) in Realzeit übertragen.

Das regionale Testbed Projekt Berlin hat ebenso wie die entsprechenden Projekte in anderen Bundesländern sein Ziel, neue Dienste und Kommunikationstechniken auf breitbandigen Kommunikationswegen zu entwickeln und gleichzeitig den Aufbau breitbandiger Netzstrukturen mit den Entwicklungen und Nutzung neuartiger Anwendungen zu verknüpfen, erreicht und war damit einer der

Wegbereiter für die schnelle und erfolgreiche Freigabe des deutschen Breitband-Wissenschaftsnetzes (B-WiN) im April 1996.

Die Abschlußberichte des BRTB-Projekts finden sich im WWW-Server des ZIB:

<http://www.zib.de/German/BRTB/Afs/Sb/index.html>

<http://www.zib.de/German/BRTB/Hotcon/Sb/index.html>

<http://www.zib.de/German/BRTB/Medbild/Sb/index.html>

<http://www.zib.de/German/BRTB/Mmserv/Sb/index.html>

<http://www.zib.de/German/BRTB/Visual/Sb/index.html>

Aus Projektmitteln wurde eine wissenschaftliche Mitarbeiterin finanziert.

Zentrale Projektleitung: H. Busch, S. Schulz

4.5.2 Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN

Nach umfangreichen Vorarbeiten und Verhandlungen wurde zum Jahreswechsel 1995/1996 die Überlassung von zehn Glasfasern aus dem Verwaltungsnetz für den Wissenschaftsbereich vertraglich zwischen den Senatsverwaltungen für Inneres (vertreten durch das LIT) und für Wissenschaft, Forschung und Kultur (vertreten durch das ZIB) geregelt. Bereits im Jahre 1995 war auf diesem Glasfasernetz der Betrieb des Berliner Wissenschaftsnetzes BRAIN zwischen den Universitäten, dem HMI und dem ZIB im Rahmen des DFN-Projekt „Berlin Regional Testbed“ (BRTB) aufgenommen worden. Insoweit war die Schaffung des Glasfasernetzes durch das LIT die materielle Basis für das im vorigen Abschnitt geschilderte Projekt BRTB, während das Projekt BRTB seinerseits die materielle Basis für das heutige Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN bildet.

Herausragende Ereignisse und wichtige Ergebnisse des Jahres 1996 waren:

- a) Inbetriebnahme des Breitband-Wissenschaftsnetzes (B-WiN) durch den DFN-Verein einschließlich der Anbindung einiger Berliner Wissenschaftseinrichtungen
- b) Schaffung eines Berliner Gemeinschaftsanschlusses an das B-WiN und Abschluß der entsprechenden Verträge zwischen den Wissenschaftseinrichtungen und dem DFN-Verein
- c) Vorbereitung der Inbetriebnahme des B-WiN-Hauptanschlusses mit 155 Mb/s
- d) Erweiterungen des Glasfasernetzes in Zusammenarbeit mit dem LIT

- e) Interesse aus der gewerblichen Wirtschaft
- f) Verknüpfungen des Berliner Wissenschaftsnetzes mit dem Potsdamer Wissenschaftsnetz

zu a):

Am 18. März 1996 wurde auf der CeBIT in Hannover in Anwesenheit des Bundesforschungsministers das mit ca. 70 Mio DM aus BMBF-Mitteln geförderte B-WiN eröffnet. Als eine von zwei demonstrierten Anwendungen erläuterte der Präsident des ZIB sein Projekt „HyperPlan – ein Planungssystem für die Krebstherapie“. Netzseitig wurde während der Demonstration eine ständige Verbindung zwischen einer Workstation auf dem CeBIT-Gelände über das B-WiN, dem Berliner Anschluß in der FUB und BRAIN zum ZIB in den CRAY T3D mit 10 Mb/s geschaltet. Die Demonstration verlief technisch einwandfrei und zur allgemeinen Zufriedenheit. Anfang April wurde das B-WiN für den Betrieb freigegeben. Die bereits über das BRTB verbundenen Einrichtungen wurden in einer Interims-Lösung angeschlossen.

zu b):

Die Verträge der Wissenschaftseinrichtungen mit dem DFN-Verein basieren auf dem Modell des Gemeinschaftsanschlusses. Folgende Einrichtungen beteiligen sich an dem Gemeinschaftsanschluß mit Teilbandbreiten von 2 Mb/s bis 34 Mb/s: Freie Universität Berlin, Humboldt-Universität zu Berlin, Technische Universität Berlin, Max-Planck-Gesellschaft (mit ihren Einrichtungen in Berlin und Potsdam), Hahn-Meitner-Institut Berlin, Fraunhofer-Gesellschaft (mit ihren Einrichtungen in Berlin), Fachhochschule für Technik und Wirtschaft, Technische Fachhochschule, Biomedizinischer Forschungscampus Berlin-Buch (einschließlich Max-Delbrück-Zentrum), Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung (mit ihren Einrichtungen in Berlin), Forschungsverbund Berlin e.V. sowie der DFN-Verein selbst mit seiner Geschäftsstelle in Berlin. Ein weiterer Teilnehmer am Gemeinschaftsanschluß ist die Forschungsabteilung der Fa. Schering. Weitere Einrichtungen nehmen Teilkapazitäten bis zu 128 Kb/s nach dem Modell des Sammelanschlusses ab. Jede beteiligte Einrichtung finanziert ihren Anteil an der Bandbreite gemäß den Kostentabellen des DFN-Vereins. In einer Ergänzung zum Standard-Vertrag werden die Verantwortlichkeit für Zuleitungen von der jeweiligen Einrichtung zum Hauptanschluß in der Freien Universität Berlin unter Hinweis auf die Infrastruktur des Berliner Wissenschaftsnetzes BRAIN sowie der Netzbetrieb innerhalb Berlins einschließlich einer Umlage der Kosten für Geräte und Management geregelt. Für Planung und Betreuung dieser Zugänge wird auf die BRAIN-Planungsgruppe verwiesen; die zugehörige Geschäftsstelle ist im ZIB eingerichtet worden.

zu c):

Vorgesehen ist die Aufrüstung des Gemeinschaftsanschlusses in der FUB auf 155 Mb/s. Diese Kapazität ist bereits durch die genannten Einrichtungen sowie einige, bei denen der Lichtwellenleiter-Anschluß noch in Arbeit ist, fast vollständig

verteilt; es ist eine „Warteliste“ für weitere Interessenten aufgestellt worden. Nach den Planungen des DFN-Vereins und der DeTeSystem (Telekom) werden im Januar 1997 die notwendigen neuen leistungsfähigeren Netzgeräte ausgeliefert und in den Einrichtungen installiert werden.

zu d):

Die technische Grundlage von BRAIN ist, wie oben dargelegt, das Lichtwellenleiter-Netz des Landes Berlin, welches vom LIT für die Behördenstandorte sowie – in Zusammenarbeit mit den Wissenschaftseinrichtungen – für die Wissenschaftseinrichtungen in weitgehend vorhandene Kabelschächte im öffentlichen Straßenland verlegt ist. 1996 sind die Anschlüsse der Fachhochschulen, der Fa. Schering, der Geschäftsstelle des DFN-Vereins sowie des Neubaus des ZIB in Dahlem in Betrieb gegangen. Vornehmlich durch neue Abstimmungen zwischen dem LIT und dem Besitzer der Kanalanlagen, der Berliner Feuerwehr, sowie durch einen „Auftragsstau“ beim LIT ergaben sich Verzögerungen bei der Erweiterung des Netzes für Wissenschaftseinrichtungen, insbesondere in den Bereichen Dahlem (BAM, DIW, FUB, HUB, MPG und ZIB) sowie Schöneberg (DBI, FHW). Der Biomedizinische Forschungscampus Berlin-Buch wird direkt über eine Datenverbindung der Deutschen Telekom mit dem Hauptanschluß verbunden. Das derzeitige Netz ist in Abbildung 2 dargestellt.

zu e):

Eine Reihe von Interessenten aus dem Bereich der gewerblichen Wirtschaft mit einem Kommunikationsbedarf zu wissenschaftlichen Einrichtungen sind ebenfalls an der Nutzung von BRAIN und am Zugang zum Wissenschaftsnetz interessiert. Die BRAIN-Planungsgruppe sucht in Abstimmung mit dem DFN-Verein und dem LIT nach geeigneten Lösungen, insbesondere zur Kostenbeteiligung.

zu f):

Die Wissenschaftseinrichtungen in Potsdam planen unter Federführung der Universität Potsdam ein „Wissenschaftsnetz Potsdam“ auf privaten LWL-Strecken mit gemeinsamer Nutzung eines B-WiN-Anschlusses mit 34 Mb/s. In ersten Gesprächen wird die Möglichkeit der Verbindung des Potsdamer Netzes mit BRAIN im örtlichen Bereich HMI – Babelsberg erörtert. Eine solche direkte Verbindung würde die verfügbare Bandbreite zwischen Berliner und Potsdamer Einrichtungen kostengünstig verbessern und eine flexiblere Auslastung beider B-WiN-Anschlüsse ermöglichen. Die Finanzierung dieser Verbindung ist noch nicht gesichert.

Zusammenfassend ist festzuhalten, daß nur durch die gemeinschaftliche Nutzung des B-WiN-Anschlusses und die gemeinschaftliche Nutzung des kostengünstigen landeseigenen Glasfasernetzes alle Berliner Wissenschaftseinrichtungen in der Lage sind, mit Kosten, die nur wenig höher sind als in den letzten Jahren für die schmalbandigen Netzverbindungen, die heute notwendigen breitbandigen Netzverbindungen zu finanzieren. Andere Bundesländer müssen in diesem Bereich erheblich mehr Mittel als früher einsetzen, durchaus 200% bis 500%. Man beachte jedoch, daß eine solche Gemeinschaftsfinanzierung für alle zusammenbrechen

kann, wenn einzelne Partner ihre Beiträge erheblich reduzieren müssen.

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

4.6 Zusammenarbeit mit anderen HPSC-Zentren

Der einzige weitere Leistungsanbieter für Höchstleistungsrechnerkapazität neben dem ZIB in der erweiterten Region Berlin-Brandenburg ist DESY-IfH Zeuthen. Der dortige, massiv parallele Rechner wurde insbesondere durch eine Arbeitsgruppe der Universität Rom für spezielle Anwendungen der Physik entwickelt. Für diese Anwendungen bietet der Rechner etwa die halbe bis ganze derzeitige Leistung des T3D im ZIB und trägt somit stark zur Entlastung des Landeshöchstleistungsrechners bei. Die Zusammenarbeit der HPSC-Zentren in der Region ist durch die Institutionalisierung des „Regionalen HPC Forum Berlin – Brandenburg“ und durch einen Kooperationsvertrag zwischen DESY und dem ZIB langfristig gesichert. Insbesondere werden die Planungen der Zentren regelmäßig untereinander ausgetauscht und aufeinander abgestimmt.

Am Regionalen HPC Forum nimmt auch das Institut für Klimafolgenforschung Potsdam (PIK) teil, obwohl dort zur Zeit keine direkten HPC-Aktivitäten stattfinden. Das Institut verfügt aber über einen Rechner derselben Leistungsklasse wie beim ZIB oder DESY-IfH, der in erster Linie für die Unterhaltung großer Datenbasen genutzt wird. Das hierbei aufgebaute spezielle Wissen wird ohne Zweifel demnächst auch in den „traditionellen“ HPC-Zentren benötigt werden. Umgekehrt wird das PIK in Zukunft noch mehr als bisher das bei DESY und im ZIB aufgebaute HPSC-Wissen nutzen.

Mit dem HLRZ Jülich ist das ZIB nicht nur durch die Projekte verbunden, die sowohl am HLRZ als auch am ZIB bearbeitet werden. Es wurde vielmehr – wie bereits berichtet – die Installation des neuen Parallelrechners am HLRZ im ZIB auf dem T3D vorbereitet, das ZIB profitiert seinerseits direkt von den in Jülich entwickelten Programmanpassungswerkzeugen.

Gemeinsam mit dem HLRZ Jülich, dem Rechenzentrum der Universität Stuttgart und dem Leibniz-Rechenzentrum München wird eine Studie im Auftrag des BMBF erstellt, die die Machbarkeit eines Metacomputingverbundes zwischen diesen vier Zentren unter Einbeziehung der vom Wissenschaftsrat definierten Kompetenzzentren darstellen soll. Unabhängig von dieser Studie, die für die nationale Weiterentwicklung des HPSC richtungweisend sein soll, wurden bereits erste praktische Schritte der Zusammenarbeit eingeleitet (gegenseitige Information der Zulassungsausschüsse, organisatorische und technische Vereinbarungen zur Verbesserung der Zusammenarbeit). Insbesondere wurden die Projektleiter der Großprojekte über den aktuellen Stand am Bundesrechenzentrum in Stuttgart unterrichtet und davon in Kenntnis gesetzt, daß das ZIB bei Bedarf auch Berliner Projekte am Bundesrechenzentrum unterstützen wird.

Die Gründung einer „Central European School of Supercomputing“ gemeinsam mit Zentren aus Tschechien, Polen, Finnland und der Schweiz aus europäischen Fördermitteln unter Federführung des ZIB ist im ersten Anlauf gescheitert. Die Partner aus Prag werden allerdings aufgrund der Kommentare aus Brüssel einen neuen Versuch wagen und das ZIB zu gegebener Zeit fragen, ob es wieder daran teilnehmen will. Eine derartige verteilte Organisation, die das Supercomputing fördert, wäre äußerst nützlich, weil sie ein gemeinsames Dach für die ohnehin vorhandenen Aktivitäten in Zentraleuropa böte. Internationale Veranstaltungen, wie sie jetzt in den genannten Ländern und im ZIB gemeinsam organisiert werden, könnten dann leichter in gemeinsamen Programmen und Publikationen einheitlich und für den Interessenten übersichtlich dargestellt werden.

Die zahlreichen Kooperationen, die den Forschungsbereich des ZIB mit anderen HPSC-Aktivitäten verbinden, werden an dieser Stelle nicht dargestellt, obwohl sie die ideelle Basis der hervorragenden Stellung des ZIB auf dem Gebiet des HPSC sind. Über diese Aktivitäten wird im Zusammenhang mit den Forschungsarbeiten des ZIB berichtet.

4.7 Sonstige Dienstleistungen des Rechenzentrums

4.7.1 Informationsdienste

Die Informationsdienste der Rechenzentren nehmen von Jahr zu Jahr an Bedeutung zu. Es ist abzusehen, daß in einem Institut von der Größe des ZIB in absehbarer Zeit ein einheitliches Informationsmanagement eingeführt werden muß, an dem das Rechenzentrum vielfältigen Anteil haben wird. Einige Aktivitäten aus dem Berichtszeitraum werden hier geschildert.

Zur Versorgung der Mitarbeiter des ZIB mit Informationen, für die Darstellung des ZIB nach außen und für die Bereitstellung der Dokumentation zum Landeshöchstleistungsrechner betreibt das ZIB einen World-Wide-Web-Server.

Wegen der strategischen Bedeutung des Informationswesens wurde im Berichtszeitraum ein dedizierter WWW-Server in Betrieb genommen. Der WWW Server bietet gleichzeitig auch einen Proxy-Cache für die Zwischenspeicherung von Informationen, die häufig für das ZIB von externen WWW Servern angefordert werden.

Für den Betrieb des WWW-Servers (SUN SPARCstation 20, 160 MB Hauptspeicher) wurde der Netscape HTTP-Server beschafft und installiert. Als Proxy-Server wird der Netscape Proxy Server 1.2 für die Zwischenspeicherung externer Dokumente eingesetzt. Für WWW-basierte Datenbankanwendungen wurde Postgres 95 installiert. Als HTML Browser wurde ZIB-weit der Netscape Navigator 3.0 Gold bereitgestellt.

Auf Basis von Postgres 95 wurden folgende *Anwendungen* implementiert:

- MATHCAL 2.2: ein Veranstaltungskalender für den Bereich Mathematik und Informatik in Berlin und Potsdam

- PaperWeb: Bereitstellung von Publikationen des ZIB (Preprints und Technical Reports) im WWW; PaperWeb bietet Suchmöglichkeiten nach Autoren und Suchbegriffen in Titeln und Kurzfassungen
- PERSONALDB 1.0: ein elektronisches Mitarbeiterverzeichnis

Wegen des hohen Pflegeaufwandes wurde der Betrieb eines eigenen News Servers im ZIB eingestellt, es wird auf den gut erreichbaren News-Server der Freien Universität Berlin verwiesen. Ankündigungen von Software für die Workstations des ZIB werden hausintern im elektronischen Workbook des Rechenzentrums über WWW bereitgestellt.

4.7.2 Planung und Bezug des Neubaus

Im Berichtszeitraum nahm die Realisierung der in den Vorjahren erstellten technischen Planung des Institutsneubaus und die Inbetriebnahme des Neubaus die Kräfte des Rechenzentrums stark in Anspruch.

- Die alljährlich vorzunehmende Modernisierung des Workstationbestandes wurde mit der Einrichtung des Neubaus verbunden. Allerdings stand wegen der Kürzungen im Beschaffungsetat die Modernisierung der Server und Drucker im Vordergrund, während der Bereich der Arbeitsplatzrechner teilweise zurückstehen mußte.
- Die strukturierte Verkabelung des Neubaus wurde in Zusammenarbeit mit der Senatsbauverwaltung und den von ihr beauftragten Planungsfirmen ausgeschrieben und die Fertigstellung überwacht. Das strukturierte Kabelnetz besteht aus einer nach Wirtschaftlichkeitsgesichtspunkten ausgewogenen Mischung aus Kupfer- und Glasfaserleitungen unterschiedlicher Qualität. Prinzipiell führt zu jedem Arbeitsraum ein Glasfaserpaar, so daß die physikalische Grundlage für Datenübertragungsraten im Gigabitbereich gegeben ist.
- Die bereits im Vorjahr erstellte Planung des Rechnernetzes wurde spezifiziert und realisiert. Ausgehend von der erprobten und bewährten Netzstruktur (IP-Subnetze, ETHERNET und FDDI) wurden virtuelle Netze (VLANs) eingeführt. Die aktiven Netzkomponenten in den einzelnen (Halb-) Etagen des Neubaus sind untereinander durch ein ATM-Netzwerk verbunden. Die einzelnen Arbeitsplätze sind je nach den individuellen Erfordernissen auf der Basis von 10 Mb/s Ethernet (exklusiv oder shared), 100 Mb/s Ethernet, in Einzelfällen auch FDDI oder ATM an das Netz angeschlossen, während für die Server und Großrechner grundsätzlich Netzanschlüsse von 100Mb/s oder mehr realisiert wurden.
- Um einen reibungslosen Übergang des Instituts vom Altbau in den Neubau zu ermöglichen, wurden beide Gebäude durch Glasfasern aus dem

BRAIN vorübergehend verbunden und in einer IP-Domain zusammengefaßt. Hierdurch konnte aus Sicht des Rechnerbetriebes der Unterschied zwischen Altbau und Neubau des ZIB aufgehoben werden und der Umzug der Geräte jeweils einzeln erfolgen, ohne den Gesamtbetrieb zu unterbrechen. Die mehrfach vorhandenen Server (z.B. Nameserver) konnten ohne Betriebsunterbrechung oder Einschränkung der Funktionalität nach und nach verlagert werden, während für die wenigen, nur einmal vorhandenen Server kurzfristige Betriebsunterbrechungen unvermeidbar waren.

- Die Datenhaltung für die Höchstleistungsrechner konnte unmittelbar vor dem Umzug von 12.000 Kassetten mit einer Gesamtkapazität von maximal 18 Terabyte durch Einführung der D3-Bandtechnik auf etwa die halbe Kassettenzahl verdichtet werden. Hierdurch und durch die Installation von Leihgeräten der Firma STK war es sowohl möglich, die Datenbestände im selben Zeitraum wie die Rechner in den Neubau zu bringen, als auch eine erweiterte Kapazität in der perspektivischen Größenordnung von etwa 1000 Terabyte (1 Petabyte) zu schaffen.
- Die knappe Terminplanung, der andauernde Winter 1995/96 und Liquiditätsprobleme der öffentlichen Hand im Frühjahr 1996 erzeugten einen hohen Termindruck für die Fertigstellung und den Bezug des Neubaus. Um finanziellen Schaden vom Land Berlin und vom ZIB abzuwenden, mußten trotz gründlicher Vorbereitung die am Umzug beteiligten Rechenzentrumsmitarbeiter während der Umzugswochen einen außergewöhnlichen hohen Arbeitseinsatz erbringen. Der reibungslose Umzug und der Dank von Kollegen und Geschäftsleitung zeigen, daß dieser hohe Einsatz für eine gute Sache geleistet wurde.

5 Publikationen und Auszeichnungen

Die Veröffentlichungen sind abrufbar über:

`ftp://ftp.zib.de/pub/zib-publications`

oder

`http://www.zib.de/ZIBbib/Publications/`

5.1 Preprints

SC 96-01. Detlev Stalling; Thomas Steinke. *Visualisation of Vector Fields in Quantum Chemistry*. **Abstract:** Many interesting phenomena in molecular systems like interactions between macro-molecules, protein-substrate docking, or channeling processes in membranes are governed to a high degree by classical Coulomb or van-der-Waals forces. The visualization of these force fields is important for verifying numerical simulations. Moreover, by inspecting the forces visually we can gain deeper insight into the molecular processes. Up to now the visualization of vector fields is quite unusual in computational chemistry. In fact many commercial software packages do not support this topic at all. The reason is not that vector fields are considered unimportant, but mainly because of the lack of adequate visualization methods. In this paper we survey a number of methods for vector field visualization, ranging from well-known concepts like arrow or streamline plots to more advanced techniques like line integral convolution, and show how these can be applied to computational chemistry.

A combination of the most meaningful methods in an interactive 3D visualization environment can provide a powerful tool box for analysing simulations in molecular dynamics.

SC 96-02. Peter Deuffhard; Tilmann Friese; Frank Schmidt; Reinhard März; Hans-Peter Nolting. *Effiziente Eigenmodenberechnung für den Entwurf integrierter optischer Chips*. **Abstract:** *Efficient eigenmode computation for the design of integrated optical chips*. The paper deals with adaptive multigrid methods for 2D Helmholtz eigenvalue problems arising in the design of integrated optical chips. Typical features of the technological problem are its geometric complexity, its multiscale structure, the possible occurrence of eigenvalue clusters, and the necessity of quite stringent required relative error tolerances. For reasons of sheer computational complexity, multigrid methods must be used to solve the discretized eigenvalue problems and adaptive grids must be automatically constructed to avoid an undesirable blow-up of the required number of nodes for these accuracies. In view of the problem specifications, an adaptive multigrid method based on Rayleigh quotient minimization, simultaneous eigenspace iteration, and conjugate gradient method as smoother is carefully selected. Its performance in the numerical simulation of a component of a rather recent optical chip (heterodyne receiver of HHI) is documented.

SC 96-03. Darinka Dentcheva; Andris Möller; Peter Reeh; Werner Römisch; Rüdiger Schultz; Gert Schwarzbach; Jörg Thomas. *Optimale Blockauswahl bei der Kraft-*

werkseinsatzplanung. **Abstract:** The paper addresses the unit commitment problem in power plant operation planning. For a real power system comprising coal and gas fired thermal as well as pumped storage hydro plants a large-scale mixed integer optimization model for unit commitment is developed. Then primal and dual approaches to solving the optimization problem are presented and results of test runs are reported.

- SC 96-04.** Sebastian Reich. *Smoothed Langevin dynamics of highly oscillatory systems*. **Abstract:** In this paper we generalize a result by Rubin and Ungar on Hamiltonian systems containing a strong constraining potential to Langevin dynamics. Such highly oscillatory systems arise, for example, in the context of molecular dynamics. We derive constrained equations of motion for the slowly varying solution components. This includes in particular the derivation of a correcting force-term that stands for the coupling of the slow and fast degrees of motion. We will identify two limiting cases: (i) the correcting force becomes, over a finite interval of time, almost identical to the force term suggested by Rubin and Ungar (weak thermal coupling) and (ii) the correcting force can be approximated by the gradient of the Fixman potential as used in statistical mechanics (strong thermal coupling). The discussion will shed some light on the question which of the two correcting potentials is more appropriate under which circumstances for molecular dynamics. In Sec. 7, we also discuss smoothing in the context of constant temperature molecular dynamics.
- SC 96-05.** Jochen Fröhlich; Jens Lang. *Twodimensional Cascadic Finite Element Computations of Combustion Problems*. **Abstract:** We present an integrated time-space adaptive finite element method for solving systems of twodimensional nonlinear parabolic systems in complex geometry. The partial differential system is first discretized in time using a singly linearly implicit Runge-Kutta method of order three. Local time errors for the step size control are defined by an embedding strategy. These errors are used to propose a new time step by a PI controller algorithm. A multilevel finite element method with piecewise linear functions on unstructured triangular meshes is subsequently applied for the discretization in space. The local error estimate of the finite element solution steering the adaptive mesh refinement is obtained solving local problems with quadratic trial functions located essentially at the edges of the triangulation. This two-fold adaptivity successfully ensures an a priori prescribed tolerance of the solution. The devised method is applied to laminar gaseous combustion and to solid-solid alloying reactions. We demonstrate that for such demanding applications the employed error estimation and adaption strategies generate an efficient and versatile algorithm.
- SC 96-06.** Wolfram Koepf; Dieter Schmersau. *Weinstein's Functions and the Askey-Gasper Identity*. **Abstract:** In his 1984 proof of the Bieberbach and Milin conjectures de Branges used a positivity result of special functions which follows from an identity about Jacobi polynomial sums that was found by Askey and Gasper in 1973, published in 1976. In 1991 Weinstein presented another proof of the Bieberbach and Milin conjectures, also using a special function system

which (by Todorov and Wilf) was realized to be the same as de Branges'. In this article, we show how a variant of the Askey-Gasper identity can be deduced by a straightforward examination of Weinstein's functions which intimately are related with a Löwner chain of the Koebe function, and therefore with univalent functions.

SC 96-07. Andreas Löbel. *Solving Large-Scale Real-World Minimum-Cost Flow Problems by a Network Simplex Method.* **Abstract:** This paper presents a large-scale real-world application of the minimum-cost flow problem, describes some details of a new implementation of the network simplex algorithm, and reports on computational comparisons.

The real-world test sets include minimum-cost flow problems that are based on single-depot vehicle scheduling problems and on a Lagrangean relaxation of multiple-depot vehicle scheduling problems. Some of the problems are extremely large with up to 42,000 nodes and 20,000,000 arcs. The standard test problems are generated with NETGEN and include parts of the DIMACS standard problems. Our network simplex code is compared with RELAX-IV, Cost Scaling 2 version 3.4, and CPLEX's network solver NETOPT.

SC 96-08. Martin Grötschel; Andreas Löbel; Manfred Völker. *Optimierung des Fahrzeugumlaufs im Öffentlichen Nahverkehr.* **Abstract:** This paper addresses the problem of scheduling vehicles in a public mass transportation system. We show how this problem can be modelled as a special multicommodity flow problem and outline the solution methodology we have developed. Based on polyhedral investigations, we have designed and implemented a branch&cut algorithm and various heuristics with which real vehicle scheduling problems of truly large scale can be solved to optimality. We describe some implementation issues and report computational results.

SC 96-09. Raúl Rojas. *Sixty Years of Computation – The Machines of Konrad Zuse.* **Abstract:** This paper provides the *first* detailed description of the architecture of the computing machines Z1 and Z3 designed by Konrad Zuse in Berlin between 1936 to 1941. The necessary information was obtained from a careful evaluation of the patent application filed by Zuse in 1941. Additional insight was gained from a software simulation of the machine's logic. The Z1 was built using purely mechanical components, the Z3 using electromechanical relays. However, both machines shared a common logical structure and the programming model was exactly the same. We argue that both the Z1 and the Z3 possessed features akin to those of modern computers: memory and processor were separate units, the processor could handle floating-point numbers and compute the four basic arithmetical operations as well as the square root of a number. The program was stored on punched tape and was read sequentially. In the last section of this paper we bring the architecture of the Z1 and Z3 into historical perspective by offering a comparison with computing machines built in other countries.

SC 96-10. Christoph Helmberg; Franz Rendl; Robert Weismantel. *A Semidefinite Programming Approach to the Quadratic Knapsack Problem.*

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 96-11. Jochen Fröhlich; Kai Schneider. *Computation of Decaying Turbulence in an Adaptive Wavelet Basis.* **Abstract:** The paper presents computations of decaying two-dimensional turbulence in an adaptive wavelet basis. At each time step the vorticity is represented by an adaptively selected set of wavelet functions which adjusts to the instantaneous distribution of vorticity. The results of this new algorithm are compared to a classical Fourier method and a Fourier method supplemented with wavelet compression in each time step.

SC 96-12. Martin Henk; Robert Weismantel. *On Hilbert bases of polyhedral cones.* **Abstract:** For a polyhedral cone $C = \text{pos} \{a^1, \dots, a^m\} \subset \mathbf{R}^d$, $a^i \in \mathbf{Z}^d$, a subset of integral vectors $H(C) \subset C \cap \mathbf{Z}^d$ is called a Hilbert basis of C iff (i) each element of $C \cap \mathbf{Z}^d$ can be written as a non-negative integer combination of elements of $H(C)$ and (ii) $H(C)$ has minimal cardinality with respect to all subsets of $C \cap \mathbf{Z}^d$ for which (i) holds.

We show that various problems related to Hilbert bases are hard in terms of computational complexity. However, if the dimension and the number of elements of the Hilbert basis are fixed, a Hilbert basis can always be computed in polynomial time.

Furthermore we introduce a (practical) algorithm for computing the Hilbert basis of a polyhedral cone. The finiteness of this method is deduced from a result about the height of a Hilbert basis which, in particular, improves on former estimates.

SC 96-13. U. Nowak; U. Pöhle; R. Roitzsch. *Eine graphische Oberfläche für numerische Programme.* **Abstract:** Der Entwurf und die Implementierung des auf Tcl/Tk basierenden Werkzeugkastens ZGUI wird beschrieben und an einigen Beispielen erläutert. ZGUI unterstützt die Entwicklung einer graphischen Benutzeroberfläche (GUI) für die am ZIB erstellte numerische Software. Es sollen folgende Ziele erreicht werden:

- einfaches Ausprobieren anhand vordefinierter Testprobleme,
- Kennenlernen numerischer Steuergrößen und Verfahrensvarianten,
- einfache Eingabe neuer Probleme,
- einfache Nutzung graphischer Ausgabemöglichkeiten und
- einheitliche Darstellung gleicher oder ähnlicher Optionen.

SC 96-14. Hans Stephani; Thomas Wolf. *Spherically symmetric perfect fluids in shearfree motion - the symmetry approach.* **Abstract:** In General Relativity, the motion of expanding shearfree perfect fluids is governed by the ordinary differential equation $y'' = F(x) y^2$, where F is an arbitrary function from which the equation of state can be computed. A complete symmetry analysis of this differential equation is given; its solutions are classified according to this scheme, and in particular the relation to Wyman's Painlevé analysis is clarified.

- SC 96-15.** M. Göckeler; R. Horsley; V. Linke; P.E.L. Rakow; G. Schierholz; H. Stüben. *Seeking the Equation of State of Non-Compact Lattice QED.* **Abstract:** We perform a high statistics calculation of the equation of state for non-compact QED on large lattices. The calculation extends to fermionic correlation lengths of ≈ 8 , and it is combined with a finite size scaling analysis of the lattice data.
- SC 96-16.** Jochen Fröhlich; Jens Lang; Rainer Roitzsch. *Selfadaptive Finite Element Computations with Smooth Time Controller and Anisotropic Refinement.* **Abstract:** We present Multilevel Finite Element computations for twodimensional reaction-diffusion systems modelling laminar flames. These systems are prototypes for extreme stiffness in time and space. The first of these two rather general features is accounted for by an improved control mechanism for the time step. The second one is reflected through very thin travelling reaction fronts for which we propose an anisotropic discretization by local directional refinement.
- SC 96-17.** Frank Schmidt; David Yevick. *Discrete Transparent Boundary Conditions for Schrödinger-Type Equations.* **Abstract:** We present a general technique for constructing nonlocal transparent boundary conditions for one-dimensional Schrödinger-type equations. Our method supplies boundary conditions for the θ -family of implicit one-step discretizations of Schrödinger's equation in time. The use of Mikusiński's operator approach in time avoids direct and inverse transforms between time and frequency domains and thus implements the boundary conditions in a direct manner.
- SC 96-18.** H. Niemann; D. Schmidt; U. Maas. *An Efficient Storage Scheme for Reduced Chemical Kinetics Based on Orthogonal Polynomials.* **Abstract:** Simplified chemical kinetic schemes are a crucial prerequisite for the simulation of complex three-dimensional turbulent flows, and various methods for the generation of reduced mechanisms have been developed in the past. The method of intrinsic low-dimensional manifolds (ILDM), e.g., provides a mathematical tool for the automatic simplification of chemical kinetics, but one problem of this method is the fact that the information which comes out of the mechanism reduction procedure has to be stored for subsequent use in reacting flow calculations. In most cases tabulation procedures are used which store the relevant data (such as reduced reaction rates) in terms of the reaction progress variables, followed by table look-up during the reacting flow calculations. This can result in huge amounts of storage needed for the multi-dimensional tabulation. In order to overcome this problem we present a storage scheme which is based on orthogonal polynomials. Instead of using small tabulation cells and local mesh refinement, the thermochemical state space is divided into a small number of coarse cells. Within these coarse cells polynomial approximations are used instead of frequently used multi-linear interpolation. This leads to a considerable decrease of needed storage. The hydrogen-oxygen system is considered as an example. Even for this small chemical system we obtain a decrease of the needed storage requirement by a factor of 100.
- SC 96-19.** Folkmar A. Bornemann; Christoph Schütte. *A Mathematical Investiga-*

tion of the Car-Parrinello Method. **Abstract:** The Car-Parrinello method for ab-initio molecular dynamics avoids the explicit minimization of energy functionals given by functional density theory in the context of the quantum adiabatic approximation (time-dependent Born-Oppenheimer approximation). Instead, it introduces a fictitious classical dynamics for the electronic orbitals. For many realistic systems this concept allowed first-principle computer simulations for the first time. In this paper we study the *quantitative* influence of the involved parameter μ , the fictitious electronic mass of the method. In particular, we prove by use of a carefully chosen two-time-scale asymptotics that the deviation of the Car-Parrinello method from the adiabatic model is of order $\mathcal{O}(\mu^{1/2})$ — provided one starts in the ground state of the electronic system and the electronic excitation spectrum satisfies a certain non-degeneracy condition. Analyzing a two-level model problem we prove that our result cannot be improved in general. Finally, we show how to use the gained quantitative insight for an automatic control of the unphysical “fake” kinetic energy of the method.

- SC 96-20.** Folkmar A. Bornemann; Christof Schütte. *Adaptive Accuracy Control for Microcanonical Car-Parrinello Simulations.* **Abstract:** The Car-Parrinello (CP) approach to ab initio molecular dynamics serves as an approximation to time-dependent Born-Oppenheimer (BO) calculations. It replaces the explicit minimization of the energy functional by a fictitious Newtonian dynamics and therefore introduces an artificial mass parameter μ which controls the electronic motion. A recent theoretical investigation shows that the CP-error, i.e., the deviation of the CP-solution from the BO-solution *decreases* like $\mu^{1/2}$ asymptotically. Since the computational effort *increases* like $\mu^{-1/2}$, the choice of μ has to find a compromise between efficiency and accuracy. The asymptotical result is used in this paper to construct an easily implemented algorithm which automatically controls μ : the parameter μ is repeatedly adapted during the simulation by choosing μ as large as possible while pushing an error measure below a user-given tolerance. The performance and reliability of the algorithm is illustrated by a typical example.
- SC 96-21.** Sebastian Reich. *Backward error analysis for numerical integrators.* **Abstract:** We consider backward error analysis of numerical approximations to ordinary differential equations, i.e., the numerical solution is formally interpreted as the exact solution of a modified differential equation. A simple recursive definition of the modified equation is stated. This recursion is used to give a new proof of the exponentially closeness of the numerical solutions and the solutions to an appropriate truncation of the modified equation. We also discuss qualitative properties of the modified equation and apply these results to the symplectic variable step-size integration of Hamiltonian systems, the conservation of adiabatic invariants, and numerical chaos associated to homoclinic orbits.
- SC 96-22.** Andreas Kokott; Andreas Löbel. *Lagrangian Relaxations and Subgradient Methods for Multiple-Depot Vehicle Scheduling Problems.* **Abstract:** This paper presents two Lagrangian relaxation approaches for the *NP*-hard multiple-depot vehicle scheduling problem in public mass transit and reports on computational

investigations. Our Lagrangean relaxation approaches can be applied to generate very tight lower bounds and to compute feasible solutions efficiently. A further application is to use the Lagrangean relaxations as new pricing strategies for a delayed column generation of a branch-and-cut approach.

The computational investigations are based on real-world test sets from the cities of Berlin and Hamburg having up to 25 thousand timetabled trips and 70 million dead-head trips.

SC-96-23. Wolfram Koepf; Dieter Schmersau. *Algorithms for Classical Orthogonal Polynomials.*

Abstract: In this article explicit formulas for the recurrence equation

$$p_{n+1}(x) = (A_n x + B_n) p_n(x) - C_n p_{n-1}(x)$$

and the derivative rules

$$\sigma(x) p'_n(x) = \alpha_n p_{n+1}(x) + \beta_n p_n(x) + \gamma_n p_{n-1}(x)$$

and

$$\sigma(x) p'_n(x) = (\tilde{\alpha}_n x + \tilde{\beta}_n) p_n(x) + \tilde{\gamma}_n p_{n-1}(x)$$

respectively which are valid for the orthogonal polynomial solutions $p_n(x)$ of the differential equation

$$\sigma(x) y''(x) + \tau(x) y'(x) + \lambda_n y(x) = 0$$

of hypergeometric type are developed that depend *only* on the coefficients $\sigma(x)$ and $\tau(x)$ which themselves are polynomials w.r.t. x of degrees not larger than 2 and 1, respectively. Partial solutions of this problem had been previously published by Tricomi, and recently by Yáñez, Dehesa and Nikiforov. Our formulas yield an algorithm with which it can be decided whether a given holonomic recurrence equation (i.e. one with polynomial coefficients) generates a family of classical orthogonal polynomials, and returns the corresponding data (density function, interval) including the standardization data in the affirmative case. In a similar way, explicit formulas for the coefficients of the recurrence equation and the difference rule

$$\sigma(x) \nabla p_n(x) = \alpha_n p_{n+1}(x) + \beta_n p_n(x) + \gamma_n p_{n-1}(x)$$

of the classical orthogonal polynomials of a discrete variable are given that depend only on the coefficients $\sigma(x)$ and $\tau(x)$ of their difference equation

$$\sigma(x) \Delta \nabla y(x) + \tau(x) \Delta y(x) + \lambda_n y(x) = 0 .$$

Here

$$\Delta y(x) = y(x+1) - y(x) \quad \text{and} \quad \nabla y(x) = y(x) - y(x-1)$$

denote the forward and backward difference operators, respectively. In particular this solves the corresponding inverse problem to find the classical discrete orthogonal polynomial solutions of a given holonomic recurrence equation.

SC 96-24. Wolfram Koepf. *Gröbner Bases and Triangles*. **Abstract:** It is well-known that by polynomial elimination methods, in particular by the computation of Gröbner bases, proofs for geometric theorems can be automatically generated. On the other hand, it is much less known that Gröbner bases, in combination with rational factorization, can be even used to *find* new geometric theorems. In this article such a method is described, and some new theorems on plane triangles are deduced.

SC 96-25. Folkmar A. Bornemann; Rolf Krause. *Classical and Cascadic Multigrid - A Methodical Comparison*. **Abstract:** Using the full multigrid method *without* any coarse grid correction steps but with an a posteriori control of the number of smoothing iterations was shown by Bornemann and Deuffhard [1996] to be an optimal iteration method with respect to the energy norm. They named this new kind of multigrid iteration the *cascadic multigrid method*. However, numerical examples with *linear* finite elements raised serious doubts whether the cascadic multigrid method can be made optimal with respect to the L^2 -norm. In this paper we prove that the cascadic multigrid method cannot be optimal for linear finite elements and show that the case might be different for higher order elements. We present a careful analysis of the two grid variant of the cascadic multigrid method providing a setting where one can understand the methodical difference between the cascadic multigrid method and the classical multigrid V-cycle almost immediately. As a rule of thumb we get that whenever the cascadic multigrid works the classical multigrid will work too but not vice versa.

SC 96-26. Andreas Löbel. *Solving the LP-Relaxations of Large-Scale Multiple-Depot Vehicle Scheduling Problems Exactly*. **Abstract:** This paper presents a delayed column generation approach for the linear programming (LP) relaxation of NP-hard multiple-depot vehicle scheduling problems in public mass transit and reports on computational investigations that are based on real-world test sets from the cities of Berlin and Hamburg having up to 25 thousand timetabled trips and 70 million dead-head trips.

We shall present new delayed column generation techniques, which are based on two different Lagrangean relaxation approaches, and describe in detail all basic ingredients of our approach that are indispensable to solve truly large-scale problem instances. We shall relate our work to approximation algorithms for multicommodity flow (feasibility) problems, which have become very popular in the last years.

SC-96-27. Peter Deuffhard; Jörg Heroth; Ulrich Maas. *Towards Dynamic Dimension Reduction in Reactive Flow Problems*. **Abstract:** The paper addresses the possibilities of reducing the overall number of degrees of freedom in large scale reactive flow computations. Attention focusses on the dimension reduction technique ILDM due to MAAS AND POPE, which treats certain automatically detected fast dynamic components as algebraic equations (so-called slow manifold). In earlier papers, the dimension of the reduction had been kept constant throughout each computation. Recently, a mathematically sound and nevertheless cheap dimension monitor for the chemistry part only has been suggested by

DEUFLHARD AND HEROTH. The present paper reports about first steps taken towards the implementation of that monitor into a flame code. Moreover, a sparse grid storage scheme is advocated and analyzed in view of the construction of efficient table look-ups for nested manifolds.

SC-96-28. Jens Lang. *Adaptive FEM for Reaction-Diffusion Equations.* **Abstract:**

An integrated time-space adaptive finite element method for solving mixed systems of nonlinear parabolic, elliptic, and differential algebraic equations is presented. The approach is independent of the spatial dimension. For the discretization in time we use singly diagonally linearly implicit Runge-Kutta methods of Rosenbrock type. Local time errors for the step size control are defined by an embedded strategy. A multilevel finite element Galerkin method is subsequently applied for the discretization in space. A posteriori estimates of local spatial discretization errors are obtained solving local problems with higher order approximation. Superconvergence arguments allow to simplify the required computations. Two different strategies to obtain the start grid of the multilevel process are compared. The devised method is applied to a solid-solid combustion problem.

SC-96-29. Peter Deuffhard; Martin Weiser. *Local Inexact Newton Multilevel FEM*

for Nonlinear Elliptic Problems. **Abstract:** The finite element setting for nonlinear elliptic PDEs directly leads to the minimization of convex functionals. Uniform ellipticity of the underlying PDE shows up as strict convexity of the arising nonlinear functional. The paper analyzes computational variants of Newton's method for convex optimization in an *affine conjugate* setting, which reflects the appropriate affine transformation behavior for this class of problems. First, an affine conjugate Newton-Mysovskikh type theorem on the local quadratic convergence of the *exact* Newton method in Hilbert spaces is given. It can be easily extended to *inexact* Newton methods, where the inner iteration is only approximately solved. For fixed finite dimension, a special implementation of a Newton-PCG algorithm is worked out. In this case, the suggested monitor for the inner iteration guarantees *quadratic* convergence of the outer iteration. In infinite dimensional problems, the PCG method may be just formally replaced by any Galerkin method such as FEM for linear elliptic problems. Instead of the algebraic inner iteration errors we now have to control the FE discretization errors, which is a standard task performed within any *adaptive* multilevel method. A careful study of the information gain per computational effort leads to the result that the quadratic convergence mode of the Newton-Galerkin algorithm is the best mode for the fixed dimensional case, whereas for an adaptive variable dimensional code a special *linear* convergence mode of the algorithm is definitely preferable. The theoretical results are then illustrated by numerical experiments with a NEWTON-KASKADE algorithm.

SC 96-30. Peter Deuffhard. *Affine Invariant Least Change Update Quasi-Newton*

Methods. (In preparation) **Abstract:** The paper strongly addresses the aspect of affine invariance in nonlinear systems of equations (in both domain and image space) and its inheritance to quasi-Newton methods. Among the least change

updates treated are: a) the affine covariant good old Broyden rank-1 updates, b) a residual oriented affine contravariant rank-1 update, c) an energy oriented affine conjugate rank-2 update for convex optimization problems, which inherits positive definiteness and satisfies a discrete H^1 modification in lieu of the classical secant condition. For all three cases convergence theorems in the associated affine invariant terms are given. Within the proofs, Frobenius norm arguments are deliberately avoided to permit extensions to the appropriate *continuous* cases. Recursive versions of all algorithms are given together with cheap condition number monitors designed to detect possibly hidden occurrence of ill-conditioning in the only implicitly defined Jacobian updates.

SC-96-31. Christof Schütte; Folkmar A. Bornemann. *Homogenization Approach to Smoothed Molecular Dynamics*. **Abstract:** In classical Molecular Dynamics a molecular system is modelled by classical Hamiltonian equations of motion. The potential part of the corresponding energy function of the system includes contributions of several types of atomic interaction. Among these, some interactions represent the bond structure of the molecule. Particularly these interactions lead to extremely stiff potentials which force 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) via increasing the stiffness of the strong part of the potential to infinity. However, the naive way of doing this via holonomic constraints mistakenly ignores the energy contribution of the fast oscillations. The paper presents a mathematically rigorous discussion of the limit situation of infinite stiffness. 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 via a careful inspection of the limit energy of the fast oscillations. Unfortunately, the theory is valid only as long as the system does not run into certain resonances of the fast motions. Behind those resonances, there is no unique limit solution but a kind of chaotic scenario for which the notion “Takens chaos” was coined. For demonstrating the relevance of this observation for MD, the theory is applied to a realistic, but still simple system: a single butane molecule. The appearance of “Takens chaos” in smoothed MD is illustrated and the consequences are discussed.

SC-96-32. Rüdiger Schultz. *A Note on Preprocessing via Fourier - Motzkin Elimination in Two-Stage Stochastic Programming*. **Abstract:** Preprocessing in two-stage stochastic programming is considered from the viewpoint of Fourier-Motzkin elimination. Although of exponential complexity in general, Fourier-Motzkin elimination is shown to provide valuable insights into specific topics such as solving integer recourse stochastic programs or verifying stability conditions. Test runs with the computer code PORTA [1994] are reported.

SC 96-33. Peter Deuffhard; Martin Weiser. *Global Inexact Newton Multilevel FEM for Nonlinear Elliptic Problems*. **Abstract:** The paper deals with the multi-

level solution of *elliptic* partial differential equations (PDEs) in a *finite element* setting: *uniform ellipticity* of the PDE then goes with *strict monotonicity* of the derivative of a nonlinear convex functional. A *Newton multigrid method* is advocated, wherein *linear residuals* are evaluated within the multigrid method for the computation of the Newton corrections. The globalization is performed by some *damping* of the ordinary Newton corrections. The convergence results and the algorithm may be regarded as an extension of those for *local* Newton methods presented recently by the authors. An *affine conjugate* global convergence theory is given, which covers both the *exact* Newton method (neglecting the occurrence of approximation errors) and *inexact* Newton–Galerkin methods addressing the crucial issue of accuracy matching between discretization and iteration errors. The obtained theoretical results are directly applied for the construction of adaptive algorithms. Finally, illustrative numerical experiments with a NEWTON–KASKADE code are documented.

- SC-96-34.** Georg Ch. Pflug; Andrzej Ruszczyński; Rüdiger Schultz. *On the Glivenko-Cantelli Problem in Stochastic Programming: Linear Recourse and Extensions.* **Abstract:** Integrals of optimal values of random optimization problems depending on a finite dimensional parameter are approximated by using empirical distributions instead of the original measure. Under fairly broad conditions, it is proved that uniform convergence of empirical approximations of the right hand sides of the constraints implies uniform convergence of the optimal values in the linear and convex case.
- SC 96-35.** Michael Dellnitz; Oliver Lange. *On the Approximation of Complicated Dynamical Behaviour.* **Abstract:** We present efficient techniques for the numerical approximation of complicated dynamical behavior. In particular, we develop numerical methods which allow to approximate SBR-measures as well as (almost) cyclic behavior of a dynamical system. The methods are based on an appropriate discretization of the Frobenius-Perron operator, and two essentially different mathematical concepts are used: the idea is to combine classical convergence results for finite dimensional approximations of compact operators with results from Ergodic Theory concerning the approximation of SBR-measures by invariant measures of stochastically perturbed systems. The efficiency of the methods is illustrated by several numerical examples.
- SC 96-36.** Michael Dellnitz; Oliver Junge. *An Adaptive Box Refinement in Subdivision Techniques for the Approximation of Dynamical Behavior.* **Abstract:** Recently subdivision techniques have been introduced in the numerical investigation of complicated temporal behavior of dynamical systems. In this article we intertwine the subdivision process with the computation of invariant measures and propose an adaptive scheme for the box refinement which is based on the combination of these methods. Using this new algorithm the numerical effort for the computation of box coverings is in general significantly reduced, and we illustrate this fact by several numerical examples.
- SC 96-37.** Karin Gatermann; Frederic Guyard. *Gröbner bases, invariant theory*

and equivariant dynamics. **Abstract:** This paper is about algorithmic invariant theory as it is required within equivariant dynamical systems. The question of generic bifurcation equations requires the knowledge of fundamental invariants and equivariants. We discuss computations which are related to this for finite groups and semisimple Lie groups. We consider questions such as the completeness of invariants and equivariants. Efficient computations are gained by the Hilbert series driven Buchberger algorithm. Applications such as orbit space reduction are presented.

SC 96-38. Ralf Kornhuber. *On Robust Multigrid Methods for Piecewise Smooth Variational Problems.* **Abstract:** We consider the fast solution of large, piecewise smooth minimization problems as resulting from the approximation of elliptic free boundary problems. The most delicate question in constructing a multigrid method for a nonlinear, non-smooth problem is how to represent the nonlinearity on the coarse grids. This process usually involves some kind of linearization. The basic idea of monotone multigrid methods to be presented here is first to select a neighborhood of the actual smoothed iterate in which a linearization is possible and then to constrain the coarse grid correction to this neighborhood. Such a local linearization allows to control the local corrections at each coarse grid node in such a way that the energy functional is monotonically decreasing. This approach leads to globally convergent schemes which are robust with respect to local singularities of the given problem. The numerical performance is illustrated by approximating the well-known Barenblatt solution of the porous medium equation.

SC 96-39. Folkmar A. Bornemann; Martin Schemann. *Adaptive Rothe's Method for the 2D Wave Equation.* **Abstract:** The adaptive Rothe method approaches a time-dependent PDE as an ODE in function space. This ODE is solved virtually using an adaptive state-of-the-art integrator. The actual realization of each time-step requires the numerical solution of an elliptic boundary value problem, thus perturbing the virtual function space method. The admissible size of that perturbation can be computed a priori and is prescribed as a tolerance to an adaptive multilevel finite element code, which provides each time-step with an individually adapted spatial mesh. In this way, the method avoids the well-known difficulties of the method of lines in higher space dimensions. During the last few years the adaptive Rothe method has been applied successfully to various problems with infinite speed of propagation of information. The present study concerns the adaptive Rothe method for hyperbolic equations in the model situation of the wave equation. All steps of the construction are given in detail and a numerical example (diffraction at a corner) is provided for the 2D wave equation. This example clearly indicates that the adaptive Rothe method is appropriate for problems which can generally benefit from mesh adaptation. This should be even more pronounced in the 3D case because of the strong Huygens principle.

SC-96-40. Ralf Borndörfer; Martin Grötschel; Christian Küttner; Fridolin Klostermeier. *Telebus Berlin - Mobilität für Behinderte.* **Abstract:** Steigendes Mobi-

litätsbedürfnis der Behinderten bei angespannter Haushaltslage — diese Situation ergab vor drei Jahren beim Berliner Behindertenfahrdienst *Telebus* Handlungsbedarf. Gleichzeitig stieß die verwendete manuelle (Fahrzeug-)Tourenplanung mit damals etwa 1.000 Fahrtwünschen pro Tag an ihre Grenzen. Zur Lösung dieser Probleme war der effiziente Einsatz von Computern und von *mathematischen Optimierungsverfahren* erforderlich.

Ergebnis des daraufhin gestarteten *Telebus-Projektes* ist die Entwicklung eines neuen, alle Arbeitsabläufe unterstützenden Computersystems, das seit über einem Jahr im Einsatz ist. Herzstück dieses Systems ist ein auf mathematischen Methoden der ganzzahligen Optimierung basierendes Verfahren zur Tourenplanung. Ziel dieses Artikels ist die Beschreibung dieses Verfahrens und seiner Verwendung bei der Behindertenbeförderung. Das Beispiel *Telebus* zeigt, daß der Einsatz mathematischer Optimierungstechniken neue Möglichkeiten für Kosteneinsparungen bei gleichzeitiger Serviceverbesserung auch in anderen Bereichen des ÖPNV eröffnet.

SC-96-41. Ralf Borndörfer; Martin Grötschel; Werner Herzog; Fridolin Klostermeier; Wilhelm Konsek; Christian Küttner. *Kürzen muß nicht Kahlschlag heißen — das Beispiel Telebus-Behindertenfahrdienst Berlin.* **Abstract:** Müssen Etatkürzungen bei staatlichen Dienstleistungseinrichtungen notwendig zu Leistungseinschränkungen oder Gebührenerhöhungen führen? Wir zeigen am Beispiel des Berliner Behindertenfahrdienstes *Telebus*, daß Sparzwang auch als Chance zur Verbesserung der eigenen Verwaltungs- und Arbeitsabläufe genutzt werden kann. Durch stärkere Dienstleistungsorientierung, Vereinfachung der Arbeitsabläufe und durch den Einsatz von moderner EDV und von mathematischen Optimierungsmethoden zur Fahrzeugeinsatzplanung werden bei *Telebus* heute staatliche Leistungen trotz geringeren Etats besser erbracht als vorher.

SC 96-42. Thorsten Koch; Alexander Martin. *Solving Steiner Tree Problems in Graphs to Optimality.* **Abstract:** In this paper we present the implementation of a branch-and-cut algorithm for solving Steiner tree problems in graphs. Our algorithm is based on an integer programming formulation for directed graphs and comprises preprocessing, separation algorithms and primal heuristics. We are able to solve all problem instances discussed in literature to optimality, including one to our knowledge not yet solved problem. We also report on our computational experiences with some very large Steiner tree problems arising from the design of electronic circuits. All test problems are gathered in a newly introduced library called SteinLib that is accessible via World Wide Web.

SC 96-43. Christoph Helmberg. *Fixing Variables in Semidefinite Relaxations.* **Abstract:** The standard technique of reduced cost fixing from linear programming is not trivially extensible to semidefinite relaxations as the corresponding Lagrange multipliers are usually not available. We propose a general technique for computing reasonable Lagrange multipliers to constraints which are not part of the problem description. Its specialization to the semidefinite $\{-1, 1\}$ relaxation of quadratic 0-1 programming yields an efficient routine for fixing variables. The routine offers the possibility to exploit problem structure. We extend the

traditional bijective map between $\{0, 1\}$ and $\{-1, 1\}$ formulations to the constraints such that the dual variables remain the same and structural properties are preserved. In consequence the fixing routine can efficiently be applied to optimal solutions of the semidefinite $\{0, 1\}$ relaxation of constrained quadratic 0-1 programming, as well. We provide numerical results showing the efficacy of the approach.

- SC 96-44.** Poh Wah Awyong; Martin Henk; Paul R. Scott. *Note on lattice-point-free convex bodies.* **Abstract:** We prove inequalities relating the inradius of a convex body with interior containing no point of the integral lattice, with the volume or surface area of the body. These inequalities are tight and generalize previous results.
- SC 96-45.** P. Deuffhard; M. Dellnitz; O. Junge; Ch. Schütte. *Computation of Essential Molecular Dynamics by Subdivision Techniques I. Basic Concept.* **Abstract:** The paper presents the concept of a new type of algorithm for the numerical computation of what the authors call the *essential dynamics* of molecular systems. Mathematically speaking, such systems are described by Hamiltonian differential equations. In the bulk of applications, individual trajectories are of no specific interest. Rather, time averages of physical observables or relaxation times of conformational changes need to be actually computed. In the language of dynamical systems, such information is contained in the natural invariant measure (infinite relaxation time) or in almost invariant sets (large" finite relaxation times). The paper suggests the direct computation of these objects via eigenmodes of the associated Frobenius-Perron operator by means of a multilevel subdivision algorithm. The advocated approach is different to both Monte-Carlo techniques on the one hand and long term trajectory simulation on the other hand: in our setup long term trajectories are replaced by short term sub-trajectories, Monte-Carlo techniques are just structurally connected via the underlying Frobenius-Perron theory. Numerical experiments with a first version of our suggested algorithm are included to illustrate certain distinguishing properties. A more advanced version of the algorithm will be presented in a second part of this paper.
- SC 96-46.** Claus C. Carøe; Rüdiger Schultz. *Dual decomposition in stochastic integer programming.* **Abstract:** We present an algorithm for solving stochastic integer programming problems with recourse, based on a dual decomposition scheme and Lagrangian relaxation. The approach can be applied to multi-stage problems with mixed-integer variables in each time stage. Numerical experience is presented for some two-stage test problems.
- SC 96-47.** P. Nettesheim; W. Huisinga; Ch. Schuette; F.A. Bornemann. *Chebyshev-Approximation for Wavepacket-Dynamics: better than expected.* **Abstract:** The aim of this work is to study the accuracy and stability of the Chebyshev-approximation method as a time-discretization for wavepacket dynamics. For this frequently used discretization we introduce estimates of the approximation and round-off error. These estimates mathematically confirm the stability of the Chebyshev-approximation with respect to round-off errors, especially for

very large stepsizes. But the results also disclose threads to the stability due to large spatial dimensions. All theoretical statements are illustrated by numerical simulations of an analytically solvable example, the harmonic quantum oscillator.

SC 96-48. Dimitris Alevras; Martin Grötschel; Peter Jonas; Ulrich Paul; Roland Wessäly. *Survivable Mobile Phone Architectures: Models and Solution Methods.*

Abstract: In the highly competitive area of telecommunications, cost, quality, and network management are among the most important aspects to be considered when designing a network. We study the problem of dimensioning a telecommunication network that is still operating in case of a failure of a network component.

Given a demand between each pair of nodes of a telecommunication network and a finite set of possible capacities for each edge of the network, we consider the problem of deciding what capacity to install on each edge of the network in order to minimize the building cost of the network and to satisfy the demand between each pair of nodes, even if a network component fails.

The routing of the demands must satisfy the following additional restrictions: (a) there is a maximum number of nodes allowed in each path between any pair of nodes (path length restriction), and (b) there is a maximum percentage of the demand between each pair of nodes that can be routed through any network component (diversification restriction). Moreover, the chosen capacities must be such that, for every single node or single edge failure, a certain percentage of the demand between any pair of nodes is reroutable (i.e. it “survives” the particular failure).

We formulate the problem as a mixed integer linear programming problem and present a cutting plane algorithm as well as several heuristics for its solution. Furthermore, we discuss several ways to implement survivability into a telecommunication network.

SC 96-49. Dimitris Alevras; Martin Grötschel; Roland Wessäly. *A Network Dimensioning Tool.* **Abstract:**

Designing low cost networks that survive certain failure situations belongs to one of the prime tasks in the telecommunications industry. In this paper we describe a mathematical model combining several aspects of survivability that are elsewhere treated in a hierarchical fashion. We present mathematical investigations of this integrated model, a cutting plane algorithm, as well as several heuristics for its solution. Moreover, we report computational results with real world data.

The problem we address is the following. Suppose, between each pair of nodes in a region, a communication demand is given. We want to determine the topology of a telecommunication network connecting the given nodes and to dimension all potential physical links. For each link, the possible capacities are restricted to a given finite set. The capacities must be chosen such that the communication demands are satisfied, even if certain network components fail, and such that the network building costs are as small as possible.

Moreover, for each pair of nodes and each failure situation, we want to determine the paths on which the demand between the nodes is routed.

SC-96-50. Annegret Wagler. *On Critically Perfect Graphs*. **Abstract:** A perfect graph is critical if the deletion of any edge results in an imperfect graph. We give examples of such graphs and prove some basic properties. We investigate the relationship of critically perfect graphs to well-known classes of perfect graphs and study operations preserving critical perfectness.

SC 96-51. Rudolf Beck; Ralf Hiptmair. *Multilevel Solution of the Time-Harmonic Maxwell's Equations Based on Edge Elements*. **Abstract:** A widely used approach for the computation of time-harmonic electromagnetic fields is based on the well-known double-curl equation for either \vec{E} or \vec{H} . An appealing choice for finite element discretizations are edge elements, the lowest order variant of a $H(\text{curl})$ -conforming basis.

However, the large nullspace of the curl-operator gives rise to serious drawbacks. It comprises a considerable part of all spectral modes on the finite element grid, polluting the solution with non-physical contributions and causing the deterioration of standard iterative solvers.

We tackle these problems by a nested multilevel algorithm. After every V-cycle in the $H(\text{curl})$ -conforming basis, the non-physical contributions are removed by a projection scheme. It requires the solution of Poisson's equation in the nullspace, which can be carried out efficiently by another multilevel iteration. The whole procedure yields convergence rates independent of the refinement level of the mesh.

Numerical examples demonstrate the efficiency of the method.

SC 96-52. Wolfram Koepf. *On a Problem of Koornwinder*. **Abstract:** In this note we solve a problem about the rational representability of hypergeometric terms which represent hypergeometric sums. This problem was proposed by Koornwinder, T. H.: Hypergeometric series evaluation by Zeilbergers algorithm. In: Open Problems, ed. by Walter van Assche. J. of Comput. and Appl. Math.48, 1993, 225-243.

SC 96-53. Wolfram Koepf. *A Package on Orthogonal Polynomials and Special Functions*. **Abstract:** In many applications (hypergeometric-type) special functions like orthogonal polynomials are needed. For example in more than 50% of the published solutions for the (application-oriented) questions in the Problems Section of SIAM Review special functions occur. In this article the Mathematica package SpecialFunctions which can be obtained from the

URL <http://www.zib.de/koepf>

is introduced. Algorithms to convert between power series representations and their generating functions is the main topic of this package, extending the previous package PowerSeries. As an application the fast computation of polynomial approximations of solutions of linear differential equations with polynomial coefficients is presented. This is the asymptotically fastest known algorithm for series computations, and it is much faster than Mathematica's builtin Series command

if applicable. Many more applications are considered. Finally the package includes implementations supporting the efficient computation of classical continuous and discrete orthogonal polynomials.

SC 96-54. Rudolf Beck; Peter Deuffhard; Hans-Christian Hege; Martin Seebaß; Detlev Stalling. *Numerical Algorithms and Visualization in Medical treatment Planning.* **Abstract:** After a short summary on therapy planning and the underlying technologies we discuss quantitative medicine by giving a short overview on medical image data, summarizing some applications of computer based treatment planning, and outlining requirements on medical planning systems. Then we continue with a description of our medical planning system HyperPlan. It supports typical working steps in therapy planning, like data acquisition, segmentation, grid generation, numerical simulation and optimization, accompanying these with powerful visualization and interaction techniques.

SC 96-55. Andreas Brandt; Manfred Brandt. *A Note on the Stability of the Many-Queue Head-of-the-Line Processor-Sharing System with Permanent Customers.* **Abstract:** We consider a single server system consisting of n queues with different types of customers 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). By means of Loynes' monotonicity method a stationary work load process is constructed and using sample path analysis general stability conditions are derived. They allow to decide which queues are stable and moreover to compute the fraction of processor capacity devoted to the permanent customers. In case of a stable system the constructed stationary state process is the only one and for any initial state the system converges pathwise to the steady state.

SC 96-56. Ulrich Maas; Ulrich Nowak. *An adaptive method of lines for the simulation of complex laminar combustion processes.* **Abstract:** For the simulation of one-dimensional flame configurations reliable numerical tools are needed which have to be both highly efficient (large number of parametric calculations) and at the same time accurate (in order to avoid numerical errors). This can only be accomplished using fully adaptive discretization techniques both in space and time together with a control of the discretization error.

We present a method which accomplishes this task. It is based on an adaptive MOL (method of lines) treatment. Space discretization is done by means of finite difference approximations on non-uniform grids. Time is discretized by the linearly-implicit Euler method. In order to control the discretization errors an extrapolation procedure is used in space and time.

Results are presented for simple laser-induced ignition processes. The method, however, can be applied to other combustion processes, too.

SC 96-57. J. Frauhammer, H. Klein; G. Eigenberger; U. Nowak. *Solution of a moving boundary problem using an adaptive grid method – Rotary heat exchangers with condensation and evaporation and examples.* **Abstract:** In many areas of chemical engineering models with spatial discontinuities arise. Sometimes the

location of the discontinuity is known in advance and fixed for all times. A typical example is a fixed bed reactor with different thermodynamic or structural properties of the solid bed. However, quite often the point where the model equations switch moves in time and depends on the dynamic behaviour of the system. As an example we consider a regenerative air to air heat exchanger.

In order to simulate a one-dimensional system of parabolic partial differential equations with moving spatial discontinuities we present an extension of a fully adaptive solution method for problems with no or non-moving discontinuities. The method uses an extrapolation principle to control time-stepping and grid adaptation. By using appropriate conditions to attach the computational grid to the moving discontinuities we allow the grid to follow smoothly the critical points. We present several challenging problems where the new method works very reliable and efficient.

SC 96-58. Detlev Stalling, Malte Zöckler, Hans-Christian Hege. *Fast Display of Illuminated Field Lines*. **Abstract:** A new technique for interactive vector field visualization using largenumbers of properly illuminated field lines is presented. Taking into account ambient, diffuse, and specular reflection terms as well as transparency and depth cueing, we employ a realistic shading model which significantly increases quality and realism of the resulting images. While many graphics workstations offer hardware support for illuminating surface primitives, usually no means for an accurate shading of line primitives are provided. However, we show that proper illumination of lines can be implemented by exploiting the texture mapping capabilities of modern graphics hardware. In this way high rendering performance with interactive frame rates can be achieved. We apply the technique to render large numbers of integral curves of a vector field. The impression of the resulting images can be further improved by a number of visual enhancements, like transparency and depth-cueing. We also describe methods for controlling the distribution of field lines in space. These methods enable us to use illuminated field lines for interactive exploration of vector fields.

SC 96-59. Henrik Battke, Detlev Stalling, Hans-Christian Hege. *Fast Line Integral Convolution for Arbitrary Surfaces in 3D*. **Abstract:** We describe an extension of the line integral convolution method (LIC) for imaging of vector fields on arbitrary surfaces in 3D space. Previous approaches were limited to curvilinear surfaces, i.e. surfaces which can be parametrized globally using 2D-coordinates. By contrast our method also handles the case of general, possibly multiply connected surfaces. The method works by tessellating a given surface with triangles. For each triangle local euclidean coordinates are defined and a local LIC texture is computed. No scaling or distortion is involved when mapping the texture onto the surface. The characteristic length of the texture remains constant.

In order to exploit the texture hardware of modern graphics computers we have developed a tiling strategy for arranging a large number of triangular texture pieces within a single rectangular texture image. In this way texture memory is utilized optimally and even large textured surfaces can be explored interactively.

5.2 Technical Reports

TR 96-01. Judith Plümer; Roland Schwänzl. *Harvesting Mathematics*. **Abstract:** Nahezu flächendeckend sind die mathematischen Fachbereiche der BRD zum Jahresende '95 im WWW vertreten. Durch die relative hohe Zahl von Servern entstehen Schwierigkeiten bei der Sichtung der angebotenen Information. Wir besprechen "Harvest" als brauchbares und gebrauchsfähiges Hilfsmittel zur Dokumentation.

TR 96-02. Martin Grötschel; Joachim Lügger; Wolfram Sperber. *DMV-Vorhaben. "Verbesserung des benutzerorientierten Zugriffs auf fachspezifische Online-Datenbanken und CD-ROM für Mathematische Institute der Bundesrepublik Deutschland"*. **Abstract:** Der Report analysiert die Ergebnisse des Projektes "Verbesserung des benutzerorientierten Zugriffs auf fachspezifische Online und CD-ROM Datenbanken für Mathematische Institute der Bundesrepublik Deutschland" der Deutschen Mathematiker-Vereinigung. An dem Projekt, das vom ZIB geleitet und koordiniert worden ist, haben mehr als 50 mathematische Fachbereiche und Forschungsinstitute teilgenommen.

Dieses vom damaligen BMFT (einem Teil des jetzigen Bundesministeriums für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie) geförderte Projekt hat wesentlich dazu beigetragen, daß fachspezifische Datenbanken heute in den mathematischen Fachbereichen in Deutschland zu den selbstverständlichen Arbeitsmitteln gehören. Darüber hinaus hat das Projekt die Grundlagen für eine moderne elektronische Informations- und Kommunikationsstruktur in den mathematischen Fachbereichen gelegt.

TR 96-03. Norbert Ascheuer. *Hamiltonian Path Problems in the On-line Optimization of Flexible Manufacturing Systems*. **Abstract:** In this thesis we describe a practical problem that we encountered in the on-line optimization of a complex Flexible Manufacturing System. In the considered system a stacker crane has to fulfill all transportation tasks (jobs) in a single aisled automatic storage system. The jobs have to be sequenced in such a way, that the time needed for the unloaded moves is minimized. The modelling of this question leads to the so-called on-line Hamiltonian path problem.

We computationally compare several on-line heuristics and derive lower bounds on the value obtained by an optimal on-line strategy by analyzing two off-line Combinatorial Optimization problems: the asymmetric Hamiltonian path problem with precedence constraints, also called sequential ordering problem (SOP), and the asymmetric Hamiltonian path problem with time windows (AHPPTW). We study the SOP and AHPPTW from a polyhedral point of view and derive several new classes of valid inequalities. Based on the polyhedral investigations we develop branch&cut algorithms for both problems and can achieve encouraging results on solving problem instances from real-world examples of the practical application.

TR-96-04. Peter Müller. *Handbuch der Berliner Software Distribution (BeSD)*. **Abstract:** Dieser Report beschreibt ein Konzept zur einheitlichen Bereitstellung

von Software in heterogenen Umgebungen. Software kann so kooperativ durch mehrere Beteiligten (z.B. auch über Institutsgrenzen hinweg) angeboten und genutzt werden. Die Konzepte stammen ursprünglich vom Rechenzentrum der Universität Stuttgart (RUS) und wurden im Rahmen eines vom Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes (DFN) mit Mitteln des BMBF geförderten Projekts zur Berliner Software Distribution (BeSD) weiterentwickelt.

- TR 96-05.** Martin Grötschel; Joachim Lügger. *Neue Produkte für die digitale Bibliothek: die Rolle der Wissenschaften*. Erschienen in: Die unendliche Bibliothek : digitale Information in Wissenschaft, Verlag und Bibliothek. Wiesbaden: Harrassowitz 1996, S. 38-67. **Abstract:** Der Artikel ist die ausgearbeitete und erweiterte Fassung eines eingeladenen Vortrags der Tagung "Die unendliche Bibliothek – Digitale Information in Wissenschaft, Verlag und Bibliothek". Dieses Treffen, eine Veranstaltung des Börsenvereins des Deutschen Buchhandels e.V., der Deutschen Bibliothek und der Bundesvereinigung Deutscher Bibliotheksverbände, fand im Dezember 1995 in Bonn als Beitrag zur der heute aktuellen Debatte unter Wissenschaftlern, Verlegern, Buchhändlern, Bibliothekaren und Politikern statt, wie unser Wissen und unsere Informationen digital transferiert werden können. Der Vortrag stellte das zentrale Problem des heutigen wissenschaftlichen Informationswesens dar, die gleichzeitige Existenz von Informationsflut und Informationsmangel. Nach einer knappen Bestimmung der Veränderung der Kommunikationsstrukturen in den Wissenschaften fragte er nach den essentiellen Veränderungen der Informationsarten, d.h. nach der Natur der kommenden Globalen Digitalen Bibliothek, die als ein über die ganze Welt und auf viele Institutionen verteilter globaler Speicher gesehen wird. Der Vortrag diskutierte zum Schluss die Bedürfnisse und Interessen der Wissenschaften und ihre spezifische Verantwortung beim Übergang in die elektronische Welt. Der Tagungsband ist erschienen beim Harrassowitz Verlag, Wiesbaden, 1996.

- TR 96-06.** Joachim Lügger. *On Changing Patterns of Mathematical Communication. Breakdowns in Traditional Publication*. Appeared in: Proc. EUNIS'95 Congress "Trends in Academic Information Systems in Europe", Universität Düsseldorf, 1995, pp. 31-54. **Abstract:** The Internet and the new electronic means of information and communication are transforming scientific communication fundamentally. In particular, mathematicians, physicists and other natural scientists intensify, accelerate and extend their communication by the use of the Internet and its tools, from electronic mail up to the World Wide Web. In doing so, they also exchange scientific results of a new kind and quality yet unknown to traditional information providers such as publishers, libraries, and database suppliers (e.g. in the form of current research software, scientific data collections, observations and experimental data, visualizations, animations etc.). They, on the other hand, perceive the new ways, which are passing their own field of activity, as breakdowns of traditional publishing, as it was termed by the *Association of Computing Machinery*. In addition, scientific libraries find themselves caught in a structural crisis – not only because of budget restraints. The *Deutsche Mathematiker-Vereinigung* (DMV), however, sees the new electro-

nic means as an opportunity to master a crisis of this kind rather than a threat. By discussing concrete models, which may be – in a certain technical sense – realizable already today, the article gives an introduction into the subject of a *Distributed Information- and Communication System for Mathematics*, a project prepared and planned by the DMV for the years 1996 to 1998. In the context of possible realization variants it also deals with questions of costs, resulting load of network connections, and – showing the beginnings – the (absolutely essential) solution of problems related to quality, authenticity, archival and intellectual property rights, which arise with the employment of electronic means. Obviously (even if not discussed explicitly) also computing centers, whose tasks and position are also affected by the electronic revolution, have the chance to find a new and forward-looking role in this field - in particular by new forms of cooperation with scientific libraries.

TR 96-07. Martin Grötschel; Joachim Lügger. *Wissenschaftliche Information und Kommunikation im Umbruch über das Internet zu neuen wissenschaftlichen Informationsinfrastrukturen*. Ersch. in: Forschung und Lehre Heft 1/1996, S. 194-198. **Abstract:** Steht uns das Ende des traditionellen wissenschaftlichen Publizierens bevor? Neue Technologien eröffnen neue Chancen zur Bewältigung der Informationsflut und des gleichzeitigen Informationsmangels. Doch der Einsatz von Technik allein reicht nicht aus.

TR 96-08. W. Baumann; H.-C. Hege; U. Schwarz; H. Stüben. *Netzverteilte Visualisierung und Simulation*. **Abstract:** Dieser Bericht beschreibt die Ergebnisse eines Anwendungsprojektes, das parallel zum Aufbau des Berliner Hochgeschwindigkeitsdatennetzes (Berlin Regional Testbed) am ZIB durchgeführt wurde. Es werden allgemeine Werkzeuge und anwendungsspezifische Arbeitsumgebungen zur netzverteilten Visualisierung und Simulation vorgestellt. Die allgemeinen Werkzeuge unterstützen folgende Aufgaben: Kopplung von Simulationen auf (Hochleistungs-)Rechnern an lokale Grafikarbeitsplätze, objektorientierte und verteilte Visualisierung, Remote-Videoaufzeichnung, Bilddatenkompression und digitaler Filmschnitt. Die spezifischen Arbeitsumgebungen wurden für Aufgaben aus den Bereichen Numerische Mathematik, Astrophysik, Strukturforschung, Chemie, Polymerphysik und Strömungsmechanik entwickelt.

TR 96-09. Roland Wunderling. *Paralleler und Objektorientierter Simplex*. **Abstract:** Es werden drei Implementierungen von state-of-the-art Lösern für Lineare Programme auf Basis des revidierten Simplex-Algorithmus vorgestellt. Eine davon ist für PCs oder Workstations mit nur einem Prozessor, während die anderen beiden auf unterschiedlichen Parallelrechner-Architekturen laufen. Die sequentielle Version enthält verschiedene Konzepte, die ihr bei mehreren Probleminstanzen zu Geschwindigkeitsvorteilen gegenüber CPLEX 4.07 verhilft. Dazu gehört die Nutzung einer sog. Zeilenbasis, eine andere Ausgestaltung der Phase-1, ein Gleichungssystem-Löser für besonders dünnbesetzte Matrizen und Vektoren, sowie eine dynamische Anpassung der Faktorisierungsfrequenz für die Basismatrizen. Durch den zugrundegelegten objektorientierten Software-Entwurf, vererben sich diese Eigenschaften auf die beiden parallelen Versionen. Sie nutzen mehrer

Prozessoren durch Parallelisierung verschiedener Operationen der linearen Algebra, durch den Einsatz paralleler Such-Algorithmen sowie durch das sog. Block-Pivoting, bei dem mehrerer sequentielle Iterationen zu einer parallelen Iteration zusammengezogen werden. Damit wurden mit 32 Prozessoren Beschleunigungen um den Faktor 20 erzielt. Ferner wird die parallele Lösung dünnbesetzter linearer Gleichungssysteme mit unsymmetrischen Matrizen untersucht. Das dafür entwickelte Programm für einen Cray T3D erreicht eine höhere Geschwindigkeit als eine vergleichbare Implementierung.

TR 96-10. U. Nowak; U. Pöhle; R. Roitzsch; R. Werk. *ZGUI-Handbuch*. **Abstract:** In diesem Handbuch werden die Bausteine zum Aufbau einer graphischen Benutzeroberfläche mit ZGUI beschrieben. Auf der einen Seite stehen die Tcl/Tk-Prozeduren, die die graphischen Elemente definieren. Die Beschreibung der Anwendung der Prozeduren und der Interaktionen der Elemente bildet den ersten Teil des Handbuches.

Auf der anderen Seite stehen die Anforderungen an Anwendungen, die mit einer ZGUI-Benutzeroberfläche gesteuert werden sollen. Hier findet man im Handbuch die Beschreibung der Anwendungsprogrammierschnittstelle (application programming interface, API).

TR-96-11. Rainald Ehrig; Ulrich Nowak; Peter Deuffhard. *Highly scalable parallel linearly-implicit extrapolation algorithms*. **Abstract:** We present parallel formulations of the well established extrapolation algorithms EULSIM and LIMEX and its implementation on a distributed memory architecture.

The discretization of partial differential equations by the method of lines yields large banded systems, which can efficiently be solved in parallel only by iterative methods. Polynomial preconditioning with a Neumann series expansion combined with an overlapping domain decomposition appears as a very efficient, robust and highly scalable preconditioner for different iterative solvers. A further advantage of this preconditioner is that all computation can be restricted to the overlap region as long as the subdomain problems are solved exactly. With this approach the iterative algorithms operate on very short vectors, the length of the vectors depends only on the number of gridpoints in the overlap region and the number of processors but not on the size of the linear system. As the most reliable and fast iterative methods based on this preconditioning scheme appeared GMRES or FOM and BiCGStab. To further reduce the number of iterations in GMRES or FOM we can reuse the Krylov-spaces constructed in preceding extrapolation steps.

The implementation of the method within the program LIMEX results in a highly parallel and scalable program for solving differential algebraic problems getting an almost linear speedup up to 64 processors even for medium size problems. Results are presented for a difficult application from chemical engineering simulating the formation of aerosols in industrial gas exhaust purification.

TR-96-12. Martin Grötschel, J. Lügger. *Neueste Entwicklungen der Informations- und Kommunikationstechnik und ihre Auswirkungen auf den Wissenschaftsbetrieb*. **Abstract:** Dieser Aufsatz ist die Ausarbeitung eines Vortrags auf der

4. Jahrestagung der Gesellschaft Information Bildung (GIB) am 10. und 11. Oktober 1996 an der Humboldt-Universität zu Berlin. Er enthält einen Überblick über die neuesten Entwicklungen in der Informations- und Kommunikationstechnik und beleuchtet deren Auswirkungen auf den Wissenschaftsbetrieb. Er beginnt mit historischen Anmerkungen zur Entstehung der Schrift und zur Speicherung und Übertragung von Information. Er führt, nach einer knappen Diskussion der Defizite in der gegenwärtigen Informationsversorgung und einem kurzen Ausflug in die Geschichte des Internet und des World Wide Web, zu einer Darstellung ausgewählter aktueller Aktivitäten der Wissenschaften im Bereich elektronischer Information, Kommunikation, Dokumentation und Archivierung. Dabei zeigt sich, dass sich der Begriff wissenschaftlicher Information bereits zu wandeln beginnt. Zur traditionellen papiergebundenen Information treten völlig neue Informationsarten hinzu, von Software- und Datensammlungen über multimediale Information bis hin zu Fernübertragungen von wissenschaftlichen Vorträgen und Experimenten. Eine Vielzahl von Links; (URLs bzw. anklickbaren Verweisen) soll diesen Wandel nicht nur belegen, sondern auch das rasche Auffinden wichtiger Dokumente und Quellen im Internet ermöglichen.

TR 96-13. Wolfgang Dalitz; Martin Grötschel; Gernot Heyer; Joachim Lügger; Wolfram Sperber. *Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)*. **Abstract:** Der Informationsaustausch in den Wissenschaften befindet sich in einer Umbruchsituation. Traditionelle, papiergebundene Publikationsformen werden durch elektronische Medien ergänzt und sogar abgelöst. Moderne Client/Server basierende Systeme und Zugriffswerkzeuge erlauben heute völlig neue Distributions- und Kommunikationsformen. In einem vom DFN und der Deutschen Telekom geförderten Projekt geht es in der vorliegenden Vorhabenbeschreibung um die konkrete inhaltliche und organisatorische Planung, ein umfassendes, möglichst alle mathematisch relevanten Ressourcen berücksichtigendes, Informationssystem für die Mathematik aufzubauen.

5.3 Beiträge in Zeitschriften/Tagungsbänden

1. W. Baumann, K. Grunert:
An Interactive Distributed Simulation and Visualisation Environment. In: Non-classical Material Models in Machine Design, Politechnika Poznanska, Poznan, Polen pp. 21–28 (1996)
2. R. Beck, B. Erdmann, R. Roitzsch:
KASKADE 3.x – ein objektorientierter adaptiver Finite-Element-Code. In W. Mackens, S. Rump eds. *Software Engineering in Scientific Computing*. Vieweg, 38–44 (1996)
3. R. Beck, H.-C. Hege, M. Seebaß, P. Wust, P. Deufflhard, R. Felix:
Adaptive finite element codes for numerical calculations in hyperthermia treatment planning. In: C. Franconi, G. Arcangeli, R. Cavaliere (eds), Proc. of the 7th Int. Congress on Hyperthermic Oncology, Rome, Italy,

April 1996, Vol. 2, pp. 515-517 (1996)

4. A. Ben-Israel, W. Koepf:
Making Change with DERIVE: Different Approaches. The International DERIVE Journal 2 (3), 72–78 (1995, erschienen 1996)
5. U. Betke, M. Henk:
Finite packings of spheres. Technical Report 465, TU Berlin. Erscheint in Discrete Comput. Geom. (1996)
6. U. Betke, M. Henk, L. Tsintsifa:
Inradii of simplices. Technical Report, TU Berlin. Erscheint in Discrete Comput. Geom. (1996)
7. F.A. Bornemann, P. Deuffhard:
The Cascadic Multigrid Method for Elliptic Problems. Numer. Math. **75**, pp. 135–152 (1996)
8. F.A. Bornemann, P. Deuffhard:
Cascadic Multigrid Methods. In: R. Glowinski, J. Périaux, Z. Shi, O. Widlund (eds.), Domain Decomposition Methods in Sciences and Engineering, John Wiley & Sons Ltd. (1996)
9. F.A. Bornemann, P. Nettessheim, Ch. Schütte:
Quantum-classical molecular dynamics as an approximation to full quantum dynamics. J. Chem. Phys., 105:1074–1083 (1996)
10. R. Brand, W. Freeden, J. Fröhlich:
An Adaptive Hierarchical Approximation Method on the Sphere Using Axisymmetric Locally Supported Basis Functions. Computing, 57:187–212 (1996)
11. A. Buschmann, J. Wolfrum, U. Maas, J. Warnatz:
Das Feuer im Computer und im Laserlicht. Physikalische Blätter, **52**, Nr. 3 213–218 (1996)
12. P. Deuffhard, T. Friese, F. Schmidt, R. März, H.-P. Nolting:
Effiziente Eigenmodenberechnung für den Entwurf integriert-optischer Chips. In: Proc. BMBF-Statusseminar der anwendungsorientierten Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik, pp. 267–279, Springer (1996)
13. P. Deuffhard, J. Heroth:
Dynamic Dimension Reduction in ODE Models. In: F. Keil, W. Mackens, H. Voß, J. Werther (eds.), Scientific Computing in Chemical Engineering, Springer-Verlag, pp. 29–43 (1996)
14. P. Deuffhard, J. Heroth, U. Maas:
Towards Dynamic Dimension Reduction in Reactive Flow Problems. ZIB Preprint, SC 96–27. In: Proc. 3rd Workshop on Modelling of Chemical Reaction Systems (CD-Version), Heidelberg (1996)

15. P. Deuffhard, J. Lang, U. Nowak:
Adaptive algorithms in dynamical process simulation. In: H. Neunzert (ed.), “Topics in Industrial Mathematics”, Proc. 8th Conference of the European Consortium for Mathematics in Industry (ECMI 94), Wiley & Teubner Publishers, pp. 122-137 (1996)
16. C.E. Ferreira, A. Martin, C.C. de Souza, R. Weismantel, L.A. Wolsey:
Formulations and valid inequalities for node capacitated graph partitioning. Mathematical Programming, **74**, 247–266 (1996)
17. C.E. Ferreira, A. Martin, R. Weismantel:
Solving multiple knapsack problems by cutting planes. SIAM Journal on Optimization, **6**, 858–877 (1996)
18. H.–H. Frese:
Cray User Group Directory of User-submitted Software (CUGDUS. In: 1996 Fall Proceedings, Cray User Group Inc., Charlotte, North Carolina, USA (1996)
19. J. Fröhlich, P. Deuffhard:
Moving Weight Galerkin Methods for Turbulent Reactive Flows. In: H. Neunzert (ed.), “Topics in Industrial Mathematics”, Proc. 8th Conference of the European Consortium for Mathematics in Industry (ECMI 94), Wiley & Teubner Publishers, pp. 176–184 (1996)
20. J. Fröhlich, J. Lang, R. Roitzsch:
Selfadaptive Finite Element Computations with Smooth Time Controller and Anisotropic Refinement. In: J.A. Desideri, P.Le. Tallec, E. Onate, J. Periaux, E. Stein (eds.), Numerical Methods in Engineering 523–527 John Wiley & Sons, New York (1996)
21. J. Fröhlich, K. Schneider:
Numerical Simulation of Turbulent Flows in an Adaptive Wavelet Basis. Appl. Comp. Harm. Anal., **3**, 393–397 (1996)
22. K. Gatermann:
Semi-invariants, equivariants and algorithms. Applicable Algebra in Engineering, Communication and Computing **7**, 105–124 (1996)
23. K. Gatermann:
Testing for S_n -Symmetry with a Recursive Detective. In: H.W. Broer, S.A. von Gils, I. Hoveijn, F. Takens (Eds.), Nonlinear Dynamical Systems and Chaos, Birkhäuser, Basel, Boston, Berlin, 61–78 (1996)
24. 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, 209–224, Fields Institute Communications Volume 5 (1996)

25. M. Grötschel:
Den Kohl heile rüberbringen ... – Mathematische Methoden der Transportoptimierung. Unsere Duisburger Hochschule, Ausgabe 2/95 1/96, 48. Jahrgang, 15-17 (1996)
26. M. Grötschel, J. Lügger:
Wissenschaftliche Information und Kommunikation im Umbruch. Forschung & Lehre, Mitteilungen des Deutschen Hochschulverbandes, 4/96, 194–198 (1996)
27. M. Grötschel, J. Lügger:
Neue Produkte für digitale Bibliothek: die Rolle der Wissenschaften. In: Die unendliche Bibliothek: Digitale Information in Wissenschaft, Verlag und Bibliothek, Harrassowitz Verlag, Wiesbaden, 38–67 (1996)
28. M. Grötschel, J. Lügger:
Neueste Entwicklungen der Informations- und Kommunikationstechnik und ihre Auswirkungen auf den Wissenschaftsbetrieb. Humboldt–Universität zu Berlin. A. Botte, D. Rusch–Feja, B. Christopher (Hrsg.), Gesellschaft Information Bildung, Berlin (1996)
29. M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel:
Packing Steiner Trees: Separation Algorithms. SIAM Journal on Discrete Mathematics **9**, 233–257 (1996)
30. M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel:
Packing Steiner Trees: Polyhedral Investigations. Mathematical Programming **72**, 101–123 (1996)
31. M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel:
Packing Steiner Trees: A Cutting Plane Algorithm and Computational Results. Mathematical Programming **72**, 125–145 (1996)
32. M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel:
Optimum Path Packing on Wheels: The Consecutive Case. Computers and Mathematics with Applications **31**, 23–35 (1996)
33. M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel:
Packing Steiner Trees: Further Facets. European Journal of Combinatorics **17**, 39–52 (1996)
34. H.C. Hege, T. Höllerer, D. Stalling:
Volume Rendering: Mathematical Models and Algorithmic Aspects, in: W. Nagel (Hrsg.), Partielle Differentialgleichungen, Numerik und Anwendungen, Konferenzen des Forschungszentrums Jülich GmbH, 227–255 (1996)
35. C. Helmberg, F. Rendl, R.J. Vanderbei, H. Wolkowicz:
An interior–point method for semidefinite programming. SIAM J. Opt. **6** 2, 342–361 (1996)

36. C. Helmberg, F. Rendl, R. Weismantel:
Quadratic knapsack relaxations using cutting planes and semidefinite programming. In: W.H. Cunningham, S.T. McCormick, M. Queyranne (Eds.): Integer Programming and Combinatorial Optimization, Colume 1084 der Lecture Notes in Computer Science, 175–189 Springer Verlag (1996)
37. W. Koepf:
Closed form Laurent-Puiseux series of algebraic functions. *Applicable Algebra in Engineering, Communication and Computing* **7**, 21–26 (1996)
38. W. Koepf:
Summation in Maple. *Maple Technical Newsletter* **3** 2, 26–32 (1996)
39. W. Koepf:
Symbolic computation of sums with Macsyma. Proceedings of the *Workshop on Functional-Analytic Methods in Complex Analysis and Applications to Partial Differential Equations*, Triest, Januar 1993, Herausgeber Wolfgang Tutschke, A. S. Mshimba, World Scientific Publishing Co., 277–292 (1995, erschienen 1996)
40. W. Koepf:
Schwarz-Christoffel mappings: Symbolic computation of mapping functions for symmetric polygonal domains. Proceedings of the *Workshop on Functional-Analytic Methods in Complex Analysis and Applications to Partial Differential Equations*, Triest, Januar 1993, Herausgeber Wolfgang Tutschke, A. S. Mshimba, World Scientific Publishing Co., 293–305 (1995, erschienen 1996)
41. W. Koepf:
Symbolic computation of formal power series with Macsyma. Proceedings of the *Workshop on Functional-Analytic Methods in Complex Analysis and Applications to Partial Differential Equations*, Triest, Januar 1993, Herausgeber Wolfgang Tutschke, A. S. Mshimba, World Scientific Publishing Co., 306–328 (1995, erschienen 1996)
42. W. Koepf:
Algorithms for m-fold hypergeometric summation. *Journal of Symbolic Computation* **20**, 399–417 (1995, erschienen 1996)
43. W. Koepf, D. Schmersau:
On the de Branges Theorem. *Complex Variables* **31**, 213–230 (1996)
44. M. Korzen, R. Schriever, K.-U. Ziener, O. Paetsch, G. Zumbusch:
Real-Time 3-D Visualization of Surface Temperature Field Measured by Thermocouples on Steel Structures in Fire Engineering, in: J. Ziebs et.al. (Hrsg.), Proc. Int. Symposium “Local Strain and Temperature Measurements in Non-Uniform Fields at Elevated Temperatures“, March 1996, Woodhead Publishing, Cambridge, England.

45. J. Lang:
High-Resolution Self-Adaptive Computations on Chemical Reaction-Diffusion Problems with Internal Boundaries. Chem. Engrg. Sci. 51, 1055–1070 (1996)
46. J. Lang:
Numerical Solution of Reaction-Diffusion Equations. In: F. Keil, W. Mackens, H. Voss, J. Werther (eds.), Scientific Computing in Chemical Engineering, Springer Verlag, 136–141 (1996)
47. A. Löbel, U. Strubbe:
Wagenumlaufoptimierung – Methodischer Ansatz und praktische Anwendung. In: Heureka'96: Optimierung in Verkehr und Transport, 341–355, Forschungsgesellschaft für Straßen- und Verkehrswesen, Köln (1996)
48. U. Maas:
Simplification of Chemical Kinetics Using Intrinsic Low-Dimensional Manifolds. Springer Series in Chemical Physics **61**: Gas Phase Chemical Reaction System, Experiments and Models 100 Years After Max Bodenstein, J. Wolfrum, H.-R. Volpp, R. Rannacher, J. Warnatz (Eds.), 334–342, Springer, ISBN 3-540-61662-4 (1996)
49. U. Maas, J. Warnatz:
Simulation of Ignition and Combustion of Hydrogen-Oxygen-Mixtures. Hydrogen Energy Progress XI, Proc. of the 11th World Hydrogen Energy Conference. T.N. Veziroglu, C.-J. Winter, J.P. Baselt, G. Kreysa (Eds.), International Association for Hydrogen Energy, **3**, 2497–2504 (1996)
50. J. Nadobny, P. Wust, M. Seebaß, P. Deuflhard:
A Volume-Surface Integral Method for Solving Maxwell's Equations in Electrically Inhomogeneous Media Using Tetrahedral Grids. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, **44** 4, 543–554 (1996)
51. J. Nadobny, P. Wust, W. Wlodarczyk, M. Seebaß, P. Deuflhard, R. Felix:
Simulation Studies for Combination of Hyperthermia and Magnetic Resonance Systems. In Proc. 7th International Congress on Hyperthermic Oncology, Rome, Italy, **2**, 549–551 (1996)
52. M. Nau, W. Neef, U. Maas, E. Gutheil, J. Warnatz:
26th Symposium (Intl.) on Combustion. The Combustion Institute Pittsburgh 1992, in Druck (1996)
53. P. Nettesheim, F.A. Bornemann, B. Schmidt, Ch. Schütte:
An explicit and symplectic integrator for quantum-classical molecular dynamics. Chem. Phys. Lett., **256**, 581–588 (1996)
54. U. Nowak:
A Fully Adaptive MOL-Treatment of Parabolic 1-D Problems with Extrapolation Techniques. Applied Numerical Mathematics **20**, 129–145 (1996)

55. U. Nowak:
PDEX1M - A Software Package for the Numerical Simulation of Parabolic Systems in One Space Dimension. In F. Keil, W. Mackens, H. Voß, J. Werther (eds.): *Scientific Computing in Chemical Engineering*, 163–169 (1996)
56. U. Nowak, J. Frauhammer, U. Nieken:
A Fully Adaptive Algorithm for Parabolic Partial Differential Equations in One Space Dimension. *Comput.Chem.Eng.* **20(5)**, 547–561 (1996)
57. U. Nowak, U. Pöhle, R. Roitzsch:
Eine graphische Oberfläche für numerische Programme. In W. Mackens, S. Rump eds. *Software Engineering im Scientific Computing.* Vieweg, 265–278 (1996)
58. U. Nowak, U. Pöhle, R. Roitzsch, B. Sucrow:
Formale Spezifikation des ZIB-GUI mit Hilfe von Graph-Grammatiken. In W. Mackens, S. Rump eds. *Software Engineering im Scientific Computing.* Vieweg, 290–296 (1996)
59. J. Rambau:
Projections of Polytopes and Polyhedral Subdivisions. *Berichte aus der Mathematik.* Shaker, Aachen. Dissertation TU-Berlin (1996)
60. J. Rambau, G.M. Ziegler:
Projections of Polytopes and the Generalized Baues Conjecture. *Discrete & Computational Geometry* **16**, 215–237 (1996)
61. S. Reich:
Symplectic integration of constrained Hamiltonian systems by composition methods. *SIAM J. Numer. Anal.* **33**, 475–491 (1996)
62. S. Reich:
Symplectic integration of conservative multibody systems. *Fields Institute Communications* **10**, 181–191 (1996)
63. S. Reich:
Torsion dynamics of molecular systems. *Phys. Rev. E*, **53**, 4176–4181 (1996)
64. R. Renaut, J. Fröhlich:
A Pseudospectral Chebychev method for the 2D Wave Equation with Domain Stretching and Absorbing Boundary Conditions. *J. Comp. Phys.*, **124**, 324–336 (1996)
65. J. Richter-Gebert, M. Henk, G.M. Ziegler:
Basic properties of convex polytopes. Technical Report 472, TU Berlin. Erscheint im “CRC Handbook of Discrete and Computational Geometry”, J.E. Goodman, J.O. Rourke (Eds.) (1996)

66. W. Römisch, R. Schultz:
Decomposition of a multi-stage stochastic program for power dispatch. ZAMM — Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik **76** 3, 29–32 (1996)
67. W. Römisch, R. Schultz:
Lipschitz stability for stochastic programs with complete recourse. SIAM Journal on Optimization **6** 2, 531–547 (1996)
68. F. Schmidt, R. März:
On the reference wave vector of paraxial Helmholtz equations. IEEE Journal of Lightwave Technology, **14**, 2395–2400 (1996)
69. R. Schultz:
Discontinuous optimization problems in stochastic integer programming. ZAMM — Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik **76** 3, 33–36 (1996)
70. R. Schultz:
Rates of convergence in stochastic programs with complete integer recourse. SIAM Journal on Optimization **6** 4, 1138–1152 (1996)
71. R. Schultz, L. Stougie, M.H. van der Vlerk:
Two-stage stochastic integer programming — a survey. Statistica Neerlandica **50**, 404–416 (1996)
72. M. Seebass, D. Stalling, J. Nadobny, P. Wust, R. Felix, P. Deuffhard:
Three-Dimensional Finite Elements Mesh Generation for Numerical Simulations of Hyperthermia Treatments, in C. Franconi, G. Arcangeli, R. Cavaliere (eds), Proc. of the 7th Int. Congress on Hyperthermic Oncology, Roma, Italy, **2**, 547–548 (1996)
73. D. Stalling, H.-C. Hege:
Intelligent Scissors for Medical Image Segmentation, in B. Arnolds, H. Müller, D. Saupe, T. Tolxdorff (eds), Tagungsband zum 4. Freiburger Workshop „Digitale Bildverarbeitung in der Medizin“, Freiburg, 14.-15. März, 32–36 (1996)
74. D. Stalling, M. Seebaß, H.-C. Hege, P. Wust, P. Deuffhard, R. Felix:
HyperPlan - an integrated system for treatment planning in regional hyperthermia. In: C. Franconi, G. Arcangeli, R. Cavaliere (eds), Proc. of the 7th Int. Congress on Hyperthermic Oncology, Rome, Italy, April 1996, **2**, 552–554 (1996)
75. J. Verschelde, K. Gatermann, R. Cools:
Mixed Volume Computation by Dynamic Lifting applied to Polynomial System Solving. Journal of Discrete & Computational Geometry **16**, 69–112 (1996)

76. R. Weismantel:
Hilbert bases and the facets of special knapsack polytopes. Mathematics of Operations Research, **21** 4, 886–904 (1996)
77. R. Weismantel, R. Thomas:
Test sets and inequalities. Mathematics of Operations Research, **21** 4, 886–904 (1996) In: W.H. Cunningham, S.T. McCormick, M. Queyranne (Eds.): Integer Programming and Combinatorial Optimization, Colume 1084 der Lecture Notes in Computer Science, Springer Verlag, 175–189 (1996)
78. P. Wust, M. Seebaß, J. Nadobny, J. Deuflhard, G. Mönich, R. Felix:
Simulation studies promote technological development of radiofrequency hyperthermia. Int. Hyperthermia, **12** 4, 477–494 (1996)
79. M. Zöckler, D. Stalling, H.-C. Hege:
Parallel Line Integral Convolution, in: Proc. First Eurographics Workshop on Parallel Graphics and Visualisation, 26-27 September 1996, Bristol, U.K., 15 p. (1996)
80. M. Zöckler, D. Stalling, H.-C. Hege:
Interactive Visualization of 3D-Vector Fields using Illuminated Streamlines, Proc. IEEE Visualization '96, Oct./Nov. 1996, San Francisco, 107–113 (1996)

5.4 Monographien

W. Dalitz, G. Heyer

HyperWave — *The New Generation Internet Information System Based on Hyper-G Technology*. dpunkt Verlag, Verlag für digitale Technologien, Heidelberg 1996, ISBN 3-920993-26-8

Hyper-G (and its commercial version HyperWave) is the first of a new generation of Internet information system. It is fully compatible with current Internet technology and allows seamless access to popular Internet server technologies such as WWW and Gopher. The book [1] explains and illustrate with various examples

- how to build your own hypermedia server with Hyper-G,
- how to navigate through Hyper-G and WWW-servers with the native Hyper-G browsers (Harmony and Amadeus),
- how to use Hyper-G technology with common browsers such as Netscape and Mosaic.

W. Koepf

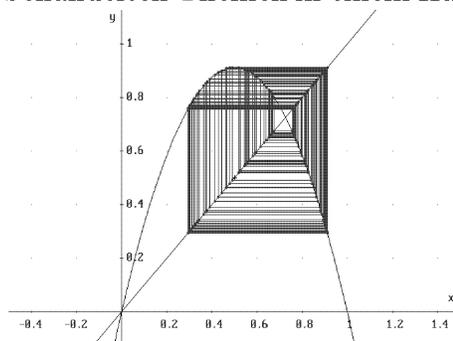
DERIVE für den Mathematikunterricht. Unter DOS und Windows. Vieweg-

Verlag, Braunschweig–Wiesbaden 1996, ISBN 3–528–06752–7

Als Folge der Miniaturisierung der Computertechnologie sowie der Verbreitung von Mathematikprogrammen werden in der zukünftigen Mathematikausbildung die graphischen, numerischen und symbolischen Fähigkeiten solcher Systeme als Hilfsmittel vermehrt eingesetzt werden. Zum einen sind dann wirklich rechenintensive Problemstellungen nicht mehr von vornherein aussichtslos, zum anderen unterstützen derartige Medien das kreative Entdecken mathematischen Wissens durch Schülerinnen und Schüler.

An vielen Schulen werden solche Programme bereits eingesetzt, und insbesondere das System DERIVE hat sich gut etabliert und ist an Schulen des deutschen Sprachraums weitverbreitet. Woran es allerdings mangelt, sind Unterrichtsmaterialien, die auf den Einsatz solcher Medien abgestimmt sind.

Im Berichtszeitraum wurde das Lehrbuch *DERIVE für den Mathematikunterricht* [1] fertiggestellt. Dieses Buch orientiert sich am Schulstoff der Sekundarstufe II und wendet sich an Lehramtsstudenten und interessierte Lehrer, die sich in das Mathematikprogramm DERIVE einarbeiten möchten, um es dann im Unterricht, insbesondere in Leistungskursen Mathematik, zu benutzen. Behandelt werden Themen aus der Geometrie, Kurven zweiter Ordnung, Iterationsverfahren, Interpolation, Flächenberechnung, partielle Integration, Potenzreihen, lineare Gleichungssysteme und Matrizen sowie einfache Differentialgleichungen. Auf der internationalen Tagung *Computeralgebra in MathEducation, Second International DERIVE Conference*, die im Juli 1996 in Bonn stattfand, hatte der Autor Gelegenheit, einige der behandelten Themen in einem Hauptvortrag vorzustellen.



Die logistische Iteration mit DERIVE

5.5 Dissertationen

Technische Universität Berlin

Jörg Rambau (Abt. Optimierung): *Polyhedral subdivisions and projections of polytopes.*

Betreuer (TU Berlin und ZIB): M. Grötschel

5.6 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

Rolf Krause (Abt. Num. Analysis und Modellierung): *Über die Konvergenz des kaskadischen Mehrgitterverfahrens.*

Betreuer (FU Berlin und ZIB): P. Deufflhard

Peter Nettesheim (Abt. Num. Analysis und Modellierung): *Modellierung und numerische Realisation der Kopplung quantenmechanischer und klassischer Freiheitsgrade.*

Betreuer (FU Berlin und ZIB): P. Deufflhard

Vanja Prole-Schäfer (Abt. Num. Analysis und Modellierung): *Adaptive Diskretisierung Hamilton'scher Systeme*

Betreuer (FU Berlin und ZIB): P. Deufflhard

Andreas Walsleben (Abt. Num. Analysis und Modellierung): *Whitney-Elemente zur Diskretisierung der Maxwell-Gleichungen in inhomogenen Medien.*

Betreuer (FU Berlin und ZIB): P. Deufflhard

Humboldt-Universität zu Berlin

Thomas Anders (Abt. Höchstleistungsrechner): *Effiziente Algorithmen zur Isoflächengenerierung.*

Betreuer: G. Gießmann (HUB), D. Stalling (ZIB)

Henrik Battke (Abt. Wiss. Visualisierung): *Entwicklung texturbasierter Verfahren zur Vektorfeldvisualisierung.*

Betreuer: E. Rödel (HUB), H.C. Hege und D. Stalling (ZIB)

Thomas Brenner (Abt. Wiss. Visualisierung): *PVR – Parallel Volume Rendering: Ein Projektionsansatz für den Cray T3D.*

Betreuer: C.Polze (HUB), H.C. Hege (ZIB)

Technische Universität Berlin

Christiane Barthel (Abt. Optimierung): *Heuristiken für das Travelling Salesman-Problem mit Präzedenzrelationen.*

Betreuer (TU Berlin und ZIB): M. Grötschel

Sven Bogatsch (Abt. Optimierung): *Ein Branch&Cut-Algorithmus für das asymmetrische Travelling Salesman Problem mit Zeitfenstern — ein Vergleich verschiedener Modellierungen.*

Betreuer (TU Berlin und ZIB): M. Grötschel

Daniel Haberland (Abt. Optimierung): *Azyklische Subdigraphenprobleme und Frequenzzuweisung im Mobilfunk.*

Betreuer (TU Berlin und ZIB): M. Grötschel

Margherita Hebermehl (Abt. Optimierung): *Heuristische Algorithmen zur Lösung von Färbungsproblemen im Mobilfunk.*

Betreuer (TU Berlin und ZIB): M. Grötschel

Tobias Höllerer (Abt. Wiss. Visualisierung): *Volume-Rendering auf irregulären Gittern.*

Betreuer: K.D. Tönnies (TU Berlin), H.C. Hege und D. Stalling (ZIB)

Ines Höschel (Abt. Optimierung): *Optimierung der Anbauplanung in einer Forstbaumschule.*

Betreuer (TU Berlin und ZIB): M. Grötschel

Andreas Kokott (Abt. Optimierung): *Lagrange-Relaxierungen für das Fahrzeugumlaufplanungsproblem.*

Betreuer (TU Berlin und ZIB): M. Grötschel

Wiebke Makschin (Abt. Optimierung): *Rucksackpolyeder in Dimension 3.*

Betreuer (TU Berlin und ZIB): M. Grötschel

FHTW Berlin

Robert Schattner (Abt. Höchstleistungsrechner): *Entwurf und Implementierung eines Kommunikationssystems zur interaktiven Visualisierung entfernter, massiv-paralleler Strömungssimulationen.*

Betreuer: A. Fortenbacher (FHTW Berlin), Dr. W. Baumann (ZIB)

5.7 Auszeichnungen und Rufe

P. Deuffhard Ruf auf den Lehrstuhl für “Technisch–Wissenschaftliches Hochleistungsrechnen” an der RWTH Aachen, verbunden mit dem Aufbau eines interdisziplinären Kompetenzzentrums, abgelehnt im März 1996.

U. Maas Ruf auf den Lehrstuhl für Technische Verbrennung an der Universität Stuttgart, angenommen im November 1996.

5.8 Herausgabe von Zeitschriften

P. Deuffhard

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

M. Grötschel

- Computing
- Discrete & Computational Geometry
- Computational and Applied Mathematics
- 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 Software-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)

REAQEQN 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)

TRIGSIMPL Simplifikation von trigonometrischen Ausdrücken (W. Koepf, H. Melenk, A. Bernig)

ZEILBERG symbolische Summation (W. Koepf, G. Stölting)

ZTRANS Z-Transformation und inverse Z-Transformation (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/pub/PowerSeries> und ferner in der Datenbank MathSource unter der Nummer 0207-379 erhältlich.

SpecialFunctions

W. Koepf: *Ein Mathematica Package für die Behandlung von Differentialgleichungen, Rekursionsgleichungen, symbolischer Potenzreihen, orthogonaler Polynome und holonomer spezieller Funktionen.* Das Package ist über WWW von der Homepage <http://www.zib.de/koepf> erhältlich.

C Maple

FPS

D. Gruntz, W. Koepf: *Ein Maple Package für die Behandlung von Differentialgleichungen und symbolischen Potenzreihen.* Das Package ist über WWW von der Homepage <http://www.zib.de/koepf> erhältlich. Es ist ferner Teil der share library ab MAPLE Version V.3.

summation

W. Koepf, G. Stölting: *Ein Maple Package für die symbolische Summation.* Das Package ist über WWW von der Homepage <http://www.zib.de/koepf> erhältlich.

code

W. Koepf: *Algorithmic Summation and Special Function Identities with Maple.* Ein Maple Package zum Buchmanuskript. Das Package ist über WWW von der Homepage <http://www.zib.de/koepf> 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://elib.zib.de/pub/code++`

verfügbar.

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 “Wissenschaftliche Software” 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://elib.zib.de/pub/elib/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 Affinvariant 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 3.1 FEM-Baukasten für adaptive Multilevel-Verfahren auf beliebigen
Gebieten (1D, 2D, 3D), Programmiersprache C++.

Anwendungen: stationäre und transiente Wärmeleitung, nichtlineare Pro-
bleme wie Hindernisprobleme, Poröse-Medien-Gleichungen, Phasenüber-
gänge

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 Dokumen-
tation 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) weiter-
gegeben. Weitere Hinweise sind in Kapitel 3 zu finden.

6.5 SoPlex

SoPlex ist ein Löser für Lineare Programme (LP), der nach objektorientierten
Prinzipien in C++ implementiert wurde. Es kann mit kommerziellen state-of-the-
art Implementierungen konkurrieren und übertrifft deren Geschwindigkeit sogar,
falls neue, in SoPlex nutzbar gemachte Konzepte zum Tragen kommen. Dazu
gehört insbesondere die Verwendung einer Zeilenbasis für LPs mit mehr Zeilen
als Spalten.

Die Varianten SMoPlex und DoPlex sind *parallele* LP-Löser, jeweils für Parallel-
rechner mit gemeinsamem bzw. solche mit verteiltem Speicher. Beide Implemen-
tierungen sind als Klassenableitung von SoPlex realisiert.

Die Software wird in Kürze unter

<http://www.zib.de/VisPar/projects/LPsolver/index.html>

für den wissenschaftlichen und nicht kommerziellen Einsatz zugänglich gemacht.

Ansprechpartner: Roland Wunderling, Email: wunderling@zib.de

6.6 HyperPlan

Die regionale Radiofrequenz-Hyperthermie ist ein nicht-invasives Verfahren in der
Krebstherapie, das auf der kontrollierten Erwärmung von Tumorgewebe durch
Radiowelleneinstrahlung beruht.

Das integrierte Software-System HyperPlan gestattet die Simulation und Planung derartiger Behandlungen am Computer. Das Programm vereinigt moderne numerische Verfahren zur Lösung der Maxwell'schen Gleichungen sowie des Wärmetransport-Problems mit leistungsfähigen 3D-Visualisierungs- und Interaktionstechniken.

Ausgehend von computertomografischen Bildaten können individuelle Patientenmodelle erstellt sowie Feld- und Temperaturberechnungen durchgeführt werden. Ein anschließender Optimierungsschritt liefert die optimalen Parameter zur Ansteuerung des Hyperthermie-Applikators.

Das objekt- und datenfluß-orientierte Softwaredesign ermöglicht zusammen mit einer umfangreichen Palette von Visualisierungsmethoden die einfache Durchführung der komplexen Arbeitsschritte bei der Therapieplanung.

Anprechpartner: Detlev Stalling (Email: stalling@zib.de)

6.7 DOC++

DOC++ ist ein Werkzeug zur Dokumentation von C-, C++- und Java-Programmen. Es extrahiert Information aus Header-Files und wandelt diese in HTML-Text für online-Dokumentation bzw. LaTeX für qualitativ hochwertige Ausdrücke. Das Programm ist unter GPL-Bedingungen frei von

<http://www.zib.de/VisPar/doc++/index.html>

erhältlich und erfreut sich inzwischen einer weltweiten Benutzerschaft. Anfang 1997 wird Version 3.00 verfügbar werden.

6.8 Informationsdienste des eLib-Servers

Auf dem vom ZIB betriebenen eLib-Server werden verschiedene Informationsdienste im World Wide Web angeboten.

Der IMU-Server beinhaltet die elektronischen Ressourcen der *International Mathematical Union*. Er ist gleichzeitig Master für verschiedene weltweit verteilte Mirrorserver. Der ICM'98-Server informiert über den im nächsten Jahr in Berlin stattfindenden Weltkongress der Mathematiker, den *International Congress of Mathematicians*.

Eine äusserst umfangreiche Sammlung weltweit verfügbarer mathematischer Ressourcen wird über die *Math-Net Links to the Mathematical World* angeboten. Der deutsche Mirror der *Netlib* erlaubt den schnellen Zugriff auf diese wichtige Sammlung mathematischer Software und Daten. Die Indexierung der in der Region Berlin-Brandenburg verfügbaren mathematischen WWW-Server mit Hilfe des *Harvest-Systems* eröffnet in der immer größeren Menge von elektronisch erreichbaren Dokumenten einen ersten Überblick.

Die verschiedenen Dienste sind alle über die URL

<http://elib.zib.de/>

abrufbar.

7 Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern

7.1 Vorträge und Gastaufenthalte

N. Ascheuer

- 26.04.96** *Echtzeit-Optimierung komplexer Transportsysteme.* Kolloquium des DFG-Schwerpunktprogramms “Echtzeit-Optimierung großer Systeme”, Thurnau
- 05.09.96** *Solving ATSPs with time windows by branch&cut.* SOR '96, Braunschweig
- 30.10.96** *Optimierung der Fahrbewegungen des Bediengeräts eines automatischen Hochregallagers.* Kolloquium des DFG-Schwerpunktprogramms “Echtzeit-Optimierung großer Systeme”, Bad Fredeburg
- 05.11.96** *A polyhedral approach to the ATSP with time windows.* Institute for Operations Research and Management Sciences (INFORMS), Atlanta, USA

W. Baumann

- 28.02.96** *Computational Fluid Dynamics (CFD) - Modellierung und Berechnung von Strömungsvorgängen.* Besuch der Umweltgruppe des VDI Berlin/Brandenburg am Konrad-Zuse-Zentrum, Berlin
- 18.10.96** *An Interactive Distributed Simulation and Visualisation Environment,* Intl. Conf. on Non-classical Material Models in Machine Design, Politechnika Poznanska, Poznan, Polen

R. Beck

- 29.06.96** *Wozu objektorientierte Programmierung? Überlegungen anhand eines adaptiven Finite-Elemente-Codes in der Sprache C++.* Datenstrukturen für Adaptive Multilevel FEM-Verfahren. Workshop am Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik, Berlin
- 18.09.96** *The Adaptive Finite Element Code KASKADE: Its Object-Oriented Concept and Experiences from Practical Applications.* SciTools 96: International Workshop on Modern Software Tools for Scientific Computing. Sintef Applied Mathematics, Oslo/Norwegen
- 20.09.96** *Der adaptive Finite-Elemente-Code KASKADE: Programmstruktur und Erfahrungen aus der Praxis.* KASKADE-Tag am WIAS, Berlin
- 12.12.96** *Streumatrix-Berechnungen in der Elektrodynamik mittels adaptiver divergenzfreier Finite-Elemente-Verfahren.* Siemens AG, Erlangen

R. Borndörfer

- 11.05.96** *Karl der Große und die Verschiffung von Kohlköpfen.* Tag der Mathematik 96, Humboldt-Universität zu Berlin
- 04.09.96** *Solving Set Partitioning Problems to Route Vehicles in Handicapped People's Transport.* Symposium über Operations Research 96 (SOR), Braunschweig
- 13.10.96** *Solving Set Partitioning Problems to Route Vehicles in Handicapped People's Transport.* Tagung Combinatorial Optimization, Mathematisches Forschungsinstitut, Oberwolfach
- 16.12.96** *Set Packing Techniques for Frequency Assignment Problems.* Workshop über Packing- und Cutting-Probleme, São Paulo, Brasilien

F. Bornemann

- 06.02.96** *Homogenisierung hochoszillatorischer Hamiltonscher Systeme.* Oberseminar Nichtlineare Dynamik von FU Berlin, WIAS, und ZIB, Berlin
- 04.04.96** *L^2 -Theory for Cascadic Multigrid.* Courant Institute, New York University
- 05.06.96** *Classical and Cascadic Multigrid — a Methodical Comparison.* 9th International Conference on Domain Decomposition Methods, Bergen, Norwegen
- 12.06.96** *Inhärente Probleme bei der Simulation hochoszillatorischer Phänomene — eine Fallstudie anhand eines Problems der Molekulardynamik.* ICA, Stuttgart
- 03.07.96** *Homogenisierung hochoszillatorischer Hamiltonscher Systeme.* Universität Tübingen
- 20.09.96** *Homogenization of Highly Oscillatory Hamiltonian Systems with an Application to Molecular Dynamics.* Courant Institute, New York University

M. Brandt

- 19.09.96** *Analysis of an ACD-System with Impatience.* DMV-Jahrestagung, Jena

H. Busch

- 22.03.96** *Das Angebot "Gemeinschaftsanschluß des DFN-Vereins" und seine Möglichkeiten für die Berliner Wissenschaft.* Sitzung der für die Datenkommunikation verantwortlichen Vertreter der Berliner Wissenschaftseinrichtungen, Konrad-Zuse-Zentrum, Berlin

26.09.96 *Network Batch im Norddeutschen Vektorrechnerverbund.* 12. Sitzung des Arbeitskreises PARSOFT in der Universität Dresden

W. Dalitz

16.04.96 *Das Math-Net – ein verteiltes Informationssystem für die Mathematik.* Vortrag im Rahmen einer Informationsveranstaltung für Studentinnen und Studenten des Faches Technische Informatik der Fachhochschule Konstanz; Veranstalter: P. Deuffhard (ZIB)

06.05.96 *Hyper-G im Vergleich mit anderen WWW-Servern.* Internet'96 — 1. Deutscher Internet-Kongreß, 5.–7. Mai 1996, Kongreßzentrum Karlsruhe

28.08.96 *Hierarchisches Suchen – Retrieval und Browsen – in der Netzbibliothek “netlib” für Mathematische Software.* Workshop des Arbeitskreises “Inhalt” der DMV, 28.–29.8.1996, Konrad-Zuse-Zentrum, Berlin

28.08.96 *Harvest-Gatherer und Broker für Preprint-Metadaten am ZIB.* Workshop des Arbeitskreises “Inhalt” der DMV, 28.-29. August 1996, ZIB

P. Deuffhard

18.03.96 *Affininvarianz-Eigenschaften nichtlinearer Probleme und adaptive Newton-Algorithm.* FB Mathematik, Universität Hannover.

11.05.96 *Einmal hin und zurück und doch nie zurück: Numerische Erfahrungen mit Rekursionen* Berliner Tag der Mathematik, Humboldt-Universität zu Berlin.

03.06.96 Member of the Scientific Committee: 9th International Conference on Domain Decomposition Method, 03.–08.06.96, Bergen, Belgium.

13.06.96 *Cascadic Multilevel Algorithms for PDEs.* Invited talk: International Linear Algebra Year, Iterative Methods Workshop, CERFACS, Toulouse, France.

20.06.96 *Affine Invarianzeigenschaften nichtlinearer Probleme und inexakte Newton-Methoden,* Mathematisches Kolloquium, FG Mathematik, Universität Bayreuth.

01.07.96 *Invarianzeigenschaften nichtlinearer Probleme und inexakte Newton-Methoden.* Kolloquiumsvortrag: Universität Tübingen.

03.07.96 *Efficient Numerical Simulation of Reaction Diffusion Systems* Conference on Dynamical Systems Methods in Fluid Mechanics, 30.06.–06.07.96, Oberwolfach.

24.07.96 *Dynamic Dimension Reduction in Chemical Models.* Invited talk: 3rd Workshop on Modelling of Chemical Reaction Systems, IWR, Universität Heidelberg.

- 14.08.96** *Inexact Newton Multilevel Methods for Nonlinear Elliptic PDEs*. Invited talk: International Symposium on Optimization and Computation, 12.–16.08.96, Japan.
- 04.09.96** *Adaptive Kaskaden–Methoden für Probleme aus Technologie und Medizin*, Sommerschule “Partielle Differentialgleichungen, Numerik und Anwendungen, 03.–06.09.96, Forschungszentrum Jülich.
- 20.09.96** *Adaptivity versus Parallelization in Multilevel PDE Solvers*. Invited talk: Seventh International Workshop on Parallel Processing by Cellular Automata and Arrays, 16.–20.09.96, Berlin.
- 2.10.96** *Inexact Newton Multilevel FEM for Nonlinear Elliptic Problems*. Invited talk: Fifth European Multigrid Conference, Universität Stuttgart.
- 23.10.96** *Das Konrad–Zuse–Zentrum in Berlin: Mathematik als Schlüsseltechnologie*. Johannes–Kepler–Symposium für Mathematik, Universität Linz, Österreich.
- 24.10.96** *Adaptive Newton–Methoden für sehr große nichtlineare Probleme*. Forschungsseminar, Johannes–Kepler–Universität Linz, Österreich.
- 12.12.96** *Inexakte Multilevel–Newton–Methoden für nichtlineare elliptische Probleme*. Siemens–Erlangen.

A. Eisenblätter

- 05.03.96** *An integer programming approach to frequency assignment in mobile phone network*. University of Illinois at Urbana–Champaign, Illinois, USA
- 04.09.96** *An Frequency Assignment Problem in Cellular Phone Networks*. Symposium on Operations Research, Braunschweig

B. Erdmann

- 20.09.96** *Anpassung von KASKADE 3.X an spezielle Benutzerbedürfnisse*. KASKADE–Tag am WIAS, Berlin

H.–H. Frese

- 16.10.96** *Cray User Group Directory of User–submitted Software (CUGDUS)*. Cray User Group Conference, Charlotte, North Carolina, USA

J. Fröhlich

- 06.03.96** *Numerical Simulation of Turbulent Flows in an Adaptive Wavelet Basis*. Int. Conf. on Spline Functions and Theory of Wavelets, Univ. of Montreal, Montreal, Kanada.

13.03.96 *Wavelets for Turbulence and Chemical Reactions*. Int. Workshop on Wavelets, Paris, Frankreich.

K. Gatermann

14.04.96 *Gröbner Basen und Symmetrie*. FU Berlin, Fachbereichskolloquium Mathematik und Informatik, Berlin

02.05.96 *Äquivariante Dynamik und Invariantentheorie*. Workshop: Algorithmische Invariantentheorie, Schloß Dagstuhl (Saarland), 29.04.–03.05.96

31.05.96 *Refining the theory of Gröbner bases*. Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Groningen/Niederlande

19.07.96 *Symmetry: A Package for Computation with Invariants and Equivariants*. IMACS Conference on Applications of Computer Algebra, Hagenberg/Österreich, 17.–20.07.96

17.10.96 *Symbolic computations in dynamical systems with symmetry*. Workshop: Computation of Bifurcations and Singularities in Dynamical Systems, Geometry Center, Minneapolis/USA

J. Gottschewski

28.02.96 *Computersimulation in der Umweltforschung nur ein Alibi?* VDI Berlin–Brandenburg

27.09.96 *Nutzung und weiterer Ausbau des Parallelrechners Cray T3D/T3E*. Treffen des Arbeitskreises Supercomputing im ZKI, Dresden

04.11.96 *Erfahrungen mit dem Norddeutschen Vektorrechnerverbund (NVV)*. Kolloquium über Parallelverarbeitung in technisch–wissenschaftlichen Anwendungen, GMD St. Augustin

19.11.96 *Das Konrad–Zuse–Zentrum und seine Rechner*. DESY–IFH, Zeuthen

M. Grötschel

15.03.96 *Mathematics of Public Transportation*, Universität Warschau, Warschau, Polen.

01.04.96 *“Pläne und Projekte der vier Fachgesellschaften”*, Gemeinsamer Workshop der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV), der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG), der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) und der Gesellschaft für Informatik (GI) “Neue Medien in den Wissenschaften”, Technische Universität München, München.

02.04.96 *Zur Situation der Information und Kommunikation in der Mathematik in Deutschland*, Gemeinsamer Workshop der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV), der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG), der

Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) und der Gesellschaft für Informatik (GI) “Neue Medien in den Wissenschaften”, Technische Universität München, München.

- 13.04.96** *The Activities of IMU and plans for ICM'98*, AMS/IMU 1996 Spring Eastern Sectional Meeting, Courant Institute, New York, USA.
- 20.05.96** *Continuous Optimization Techniques in Discrete Optimization*, SIAM Conference on Optimization, Victoria, Kanada.
- 23.05.96** *Large-Scale Bus Scheduling Problems*, University of Washington, Seattle, USA.
- 27.05.96** *Large-Scale Bus Scheduling Problems*, University of British Columbia, Vancouver, Kanada.
- 22.08.96** *Wissenschaftliche Bibliotheken im Umbruch: Zukünftige Entwicklungen*, Arbeitsgruppe Bibliothek der TU Berlin, Technische Universität Berlin.
- 17.09.96** *Ein aktuelles Arbeitsgebiet: Diskrete Mathematik, Stabile Mengen und ihre Anwendungen*, Lehrerfortbildungsveranstaltung auf der DMV-Jahrestagung, Jena.
- 10.10.96** *Neueste Entwicklungen der Informations- und Kommunikationstechnik und ihre Auswirkungen auf den Wissenschaftsbetrieb*, 4. Jahrestagung der Gesellschaft Information Bildung (GIB), Humboldt-Universität zu Berlin (zusammen mit J. Lügger).
- 14.10.96** *Dimensioning of Survivable Telecommunication Networks I*, Oberwolfach-Tagung Combinatorial Optimization, Oberwolfach.
- 20.10.96** *Workshop: Test Sets in Integer Programming*
- 04.11.96** *Nichtlineare Methoden in der kombinatorischen Optimierung I*, Graduiertenkolleg “Algorithmische Diskrete Mathematik”, Konrad-Zuse-Zentrum, Berlin.
- 11.11.96** *Nichtlineare Methoden in der kombinatorischen Optimierung II*, Graduiertenkolleg Algorithmische Diskrete Mathematik, Konrad-Zuse-Zentrum, Berlin.
- 29.11.96** *Mathematik und öffentlicher Nahverkehr*, Festkolloquium der Mathematischen Fakultät der Universität Freiburg.
- 05.12.96** *Optimierung des Behindertentransportes in Berlin – Herausforderungen für Operations Research, Mathematik, Informatik und BWL*, Wirtschaftswissenschaftliches Kolloquium der Universität Karlsruhe.

W. Häusler

18.04.96 *Tools zum Job-Scheduling des Cray T3D im ZIB.* 12. Treffen des Arbeitskreises UNICOS an der Universität Kiel

H.C. Hege

18.01.96 *Entwicklung eines Planungssystems zur Hyperthermie-Krebstherapie*
Regionales Rechenzentrum der Universität zu Köln, Kolloquium Praxis der Datenverarbeitung

16.02.96 *Wissenschaftliche Visualisierung — Projekte am ZIB*
Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg, Graphik-Kolloquium am Institut für Mathematische Maschinen und Datenverarbeitung

23.02.96 *Physical Simulations and Visualization in Cancer Therapy Treatment Planning*
Workshop “Visualization in Physics”, 22./23. Febr. 1996, Universität Bielefeld

27.02.96 *Hyperthermieplanung aus algorithmischer und software-technischer Sicht — ein Überblick*
Workshop “Hyperthermie-Planung”, ZIB

11.04.96 *Adaptive Finite Element Codes for Numerical Calculations in Hyperthermia Treatment Planning,*
7th Int. Congress on Hyperthermic Oncology, Rom, Italien

10.06.96 *Physikalische Simulationen und Visualisierung in der Hyperthermieplanung,*
Seminar des interdisziplinären Arbeitskreises Computersimulation, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät I, Humboldt-Universität zu Berlin

05.09.96 *Visualisierung von Skalar- und Vektorfeldern,*
Sommerschule “Partielle Differentialgleichungen, Numerik und Anwendungen”, 2.-6. Sept. 1996, Forschungszentrum Jülich (KFA)

27.09.96 *Texture-Based Methods for Vector Field Visualization,*
Int. Summer School on Scientific and Mathematical Visualization, 23.-27. Sept. 1996, Ettenheim (Breisgau)

19.12.96 *Texturbasierte Verfahren zur Visualisierung von Vektorfeldern,*
Graduiertenkolleg “Nichtlineare Differentialgleichungen – Modellierung, Theorie, Numerik, Visualisierung”, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

C. Helmberg

02.02.96 *Quadratic knapsack relaxations using cutting planes and semidefinite programming.* 16. Berliner Algorithmen Tag, Berlin

- 15.05.96** *Quadratic knapsack relaxations using cutting planes and semidefinite programming.* Workshop on Semidefinite Programming and Interior-Point Approaches for Combinatorial Optimization Problems, Toronto, Canada
- 04.06.96** *Quadratic knapsack relaxations using cutting planes and semidefinite programming.* Integer Programming and Combinatorial Optimization (IP-CO) V 1996, Vancouver, Canada
- 05.09.96** *Semidefinite Relaxations for the Quadratic Knapsack Problem.* Symposium über Operations Research 96 (SOR), Braunschweig
- 04.11.96** *Semidefinite Optimierung.* Graduiertenkolleg Algorithmische Diskrete Mathematik, Berlin
- 11.11.96** *Kombinatorische Anwendungen der Semidefiniten Optimierung.* Graduiertenkolleg Algorithmische Diskrete Mathematik, Berlin

M. Henk

- 02.02.96** *Volume approximation of convex bodies.* 16. Berliner Algorithmentag, Berlin.
- 26.02.–01.03.96** *Lattice Points and Polytopes.* Vorträge im Rahmen des Forschungskolloquiums *Kombinatorische Geometrie* der Studienstiftung des Deutschen Volkes am Mathematischen Forschungsinstitut Oberwolfach.
- 28.05.96** *Finite and infinite lattice packings.* 4th International Congress of Geometry, Thessaloniki, Greece.
- 30.07.96** *On the sausage conjecture of László Fejes Tóth.* 3rd Geometry Festival, An international conference on packings, tilings and coverings, Budapest, Ungarn.
- 19.09.96** *On minimal generating systems of polyhedral cones.* DMV-Jahrestagung, Jena.
- 22.10.96** *On Hilbert bases of polyhedral cones.* Workshop on Test Sets in Integer Programming, ZIB.

G. Heyer

- 07.05.96** *Informationssysteme im Internet.* Regionalgruppe Braunschweig der Gesellschaft für Informatik (GI), TU Braunschweig
- 28.08.96** *Dublin Core und Warwick Framework.* Workshop des Arbeitskreises "Inhalt" der DMV, 28.-29. August 1996, ZIB
- 30.09.96** *Aufbau eines verteilten Informationssystems für die Mathematik mit Hyper-G.* Eingeladener Vortrag zum Symposium "Synergie durch Netze", Universität Magdeburg

N. Kamin

- 28.03.96** *On-Line Optimization of Automated Guided Vehicles – A Joint Project with Industry.* Symposium on Combinatorial Optimization (CO96), London, U.K.
- 04.09.96** *On-Line Optimization of Automated Guided Vehicles – A Joint Project with Industry.* Symposium über Operations Research (SOR) 1996, Braunschweig
- 30.10.96** *Effiziente Steuerung von Kommissioniermobilen.* Berichtskolloquium des DFG–Schwerpunktprogramms “Echtzeit–Optimierung großer Systeme”, Bad Fredeburg
- 04.11.96** *On-Line Optimization of Automated Guided Vehicles – A Joint Project with Industry.* Institute for Operations Research and Management Sciences (INFORMS), Atlanta, USA

W. Koepf

- 06.02.96** *Documentation of Algorithms and Proof of Results in Computer Algebra.* Seminar 9606 *Computeralgebra–Software*, Schloß Dagstuhl
- 11.05.96** *Computer statt Lehrer? Experimente mit einem Mathematikprogramm.* Tag der Mathematik, Humboldt–Universität zu Berlin
- 22.05.96** *Efficient Computation of Orthogonal Polynomials in Computer Algebra.* AMS–BeNeLux Congress, Antwerpen
- 22.05.96** *Orthogonal Polynomial Identities in Maple.* AMS–BeNeLux Congress, Antwerpen
- 06.07.96** *Numeric Versus Symbolic Computation.* Keynote Lecture, Tagung *Computeralgebra in MathEducation*, Second International DERIVE Conference, St. Augustin
- 19.07.96** *Series Representations and Generating Functions of Special Functions with Mathematica.* The Second IMACS Conference on Applications of Computer Algebra, Linz/Österreich
- 17.09.96** *Neues zum Satz von de Branges.* DMV–Tagung Jena
- 19.09.96** *Effiziente Berechnung orthogonaler Polynome in Computeralgebrasystemen.* DMV–Tagung Jena

J. Lang

- 04.03.96** *Integrated Time-Space Adaptive Solution of Combustion Problems Modelled by Reaction-Diffusion Systems.* 6. Int. Conference on Numerical Combustion, New Orleans, USA

- 19.03.96** *Numerische Lösung von Reaktions–Diffusions–Gleichungen mit schwacher Konvektion.* Institut für Angewandte Mathematik und Statistik, TU München
- 09.05.96** *Adaptive Diskretisierungen fuer Nichtlineare Systeme von Parabolischen und Elliptischen Gleichungen.* Lehrstuhl für Prozeßtechnik, RWTH Aachen
- 27.06.96** *Multilevel Finite Element Methods in Chemical Computing.* 9. Int. Conference on The Mathematics of Finite Elements and Applications, Uxbridge, United Kingdom
- 02.07.96** *Adaptive FEM for Reaction–Diffusion Equations.* Grid Adaptation in Computational PDEs: Theory and Application, Edinburgh, United Kingdom
- 11.09.96** *Selfadaptive Finite Element Computations with Smooth Time Controller and Anisotropic Refinement.* ECCOMAS 96, Paris, Frankreich
- 20.09.96** *KARDOS — ein Löser für nichtlineare Zeitprobleme.* KASKADE–Tag am WIAS, Berlin
- 14.11.96** *Linear Implizite Galerkin Methoden für die numerische Lösung von Reaktions–Diffusions Gleichungen.* TU Hamburg–Harburg
- 26.11.96** *Zeitliche Adaptionstechniken für partielle Differentialgleichungen.* Universität Göttingen
- 27.11.96** *Numerik für Reaktions–Diffusions Gleichungen.* Universität Göttingen, Institut für Numerische und Angewandte Mathematik

D. Limbach

- 24.09.96** *On–line Image Compression in Remote Simulations.* (Poster)
Int. Summer School on Scientific and Mathematical Visualization, 23.–27. Sept. 1996, Ettenheim (Breisgau)

A. Löbel

- 14.03.96** *Wagenumlaufoptimierung – Methodischer Ansatz und praktische Anwendung.* Heureka'96: Optimierung in Verkehr und Transport, Karlsruhe
- 23.04.96** *Wagenumlaufplanung für große Verkehrsbetriebe.* 12. Symposium des Arbeitskreises “Mathematik in Forschung und Praxis”, Bad Honnef

J. Lügger

- 15.01.96** *Überlegungen der wissenschaftlichen Fachgesellschaften zur elektronischen Information und Kommunikation.* Eingeladener Vortrag zum DFG-Workshop “Internet-basierte Informationssysteme der Bibliotheken”; Zen-

trum für interdisziplinäre Forschung Bielefeld; Vortragsfolien im Internet:
<http://web.urz.uni-heidelberg.de/AndereOrg/DFG/workshop/index.html>

- 05.03.96** *Wissenschaftliche Kommunikation am Wendepunkt*. Eingeladener Vortrag zur ZKI-Frühjahrstagung'96 des "Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung e.V.", 4.-6. März 1996, Fachhochschule Magdeburg
- 07.10.96** *Math-Net: An Internet Information Service for Mathematics in Germany*. 2nd DELOS Metadata Workshop, 6.-8. Okt. 1996 Bonn. Internet:
<http://www.area.pi.cnr.it/ErcimDL/second-delos-workshop/hall.html>

U. Maas

- 01.02.96** *Mathematische Modellierung reaktiver Strömungen*. Universität Bielefeld
- 20.02.96** *Implementation of simplified chemical kinetics in laminar and turbulent flame calculations*. ESF-conference "Mathematical methods in industrial problems", Straßburg, 16.-21.02.96
- 05.03.96** *Coupling of Chemical Kinetics With Flow and Molecular Transport Plenary Lecture*. 6th International Conference on Numerical Combustion, New Orleans, USA 04.-06.03.96
- 1.4.1996** *Coupling of Chemical Kinetics With Flow and Molecular Transport*. Technische Universität Delft, Niederlande
- 02.04.96** *Coupling of Complex Chemical Kinetics With Flow and Molecular Transport Plenary Lecture*. Joint Meeting of the Portuguese, British, Spanish, and Swedish Sections of the Combustion Institute, Funchal, Madeira, 01.-04.04.96
- 27.06.96** *Simulation of Ignition and Combustion of Hydrogen-Oxygen-Mixtures*. 11th World Hydrogen Energy Conference, Stuttgart 23.-28.06.96
- 24.07.96** *Analysis of the Intrinsic Low-Dimensional Manifolds of Strained and Unstrained Flames*. 3rd Workshop on Modelling of Chemical Reaction Systems, Heidelberg 23.-26.07.96
- 10.10.96** *Anwendung reduzierter Reaktionsmechanismen in der Simulation von Verbrennungsprozessen*. 12. TECFLAM-Seminar, Darmstadt

G. Maierhöfer

- 09.05.96** *Software: Einmal installiert und berlinweit verfügbar!* Im Rahmen der Veranstaltungsreihe des Ausbildungs- und Beratungszentrums der ZEDAT der FU Berlin

A. Martin

- 09.01.96** *Optimal Routing in Layered Telecommunication Networks*. Workshop on Combinatorial Optimization, Aussois, Frankreich
- 26.06.96** *Clustering in der Kombinatorischen Optimierung*. DFG-Workshop “Methoden der Diskreten Optimierung”, Universität Bonn
- 11.09.96** *CPLEX*. Harburger Sommerschule “Diskrete Optimierung”, Hamburg-Harburg

P. Müller

- 09.05.96** *Software: Einmal installiert und berlinweit verfügbar!* Im Rahmen der Veranstaltungsreihe des Ausbildungs- und Beratungszentrums der ZEDAT der FU Berlin

J. Nadobny

- 27.02.96** *Feldberechnung mit der VSIE- und FDTD-Methode: Studien zur Antennenmodellierung und zur Entwicklung des neuen Hyperthermie-Applikators*.
Workshop “Hyperthermie-Planung”, Konrad-Zuse-Zentrum, Berlin
- 12.04.96** *Simulation Studies for Combination of Hyperthermia and Magnetic Resonance Systems*.
7th Int. Congress on Hyperthermic Oncology, Rom, Italien

W. Neun

- 7.3.–22.3.96** *Implementierung von Comprehensive Gröbner Bases in REDUCE*.
Universität Passau (Lehrstuhl Prof. Volker Weispfenning)
- 1.7.–5.7.96** *Design und Implementierung eines OpenMath Prototype für REDUCE*. INRIA Sophia-Antipolis (Project Safir, Prof. Stephen Watt)
- 27.07.96** *Demonstration des REDUCE Prototyps für OpenMath*. OpenMath Workshop, Zürich/Schweiz
- 03.08.96** *Some Examples for Parallel Computation in Computer Algebra using REDUCE*. NCTCS-96, Universität Pereslavl-Zalessky, Russland
- 07.12.96** *Demonstration des REDUCE Prototyps für OpenMath*. OpenMath Workshop, Dublin/Irland

U. Nowak

- 05.06.96** *Extrapolationsverfahren für ODEs, DAEs und PDEs*. Bayer AG, Leverkusen

O. Paetsch

- 24.09.96** *Real time 3-D visualization of steel structures in fire engineering.* (Poster)
Int. Summer School on Scientific and Mathematical Visualization, 23.-27. Sept. 1996, Ettenheim (Breisgau)
- 09.12.96** *3D-Visualisierung im baulichen Brandschutz.*
Bundesanstalt für Materialforschung, Berlin

J. Rambau

- 27.02.96** *2- and 3-manifolds.* Forschungskolloquium “Kombinatorische Geometrie”, Oberwolfach
- 01.04.96** *Triangulations of Polytopes.* Workshop “Algorithmische Diskrete Mathematik/Mathematische Optimierung”, (ADiMMO), Trier
- 07.10.96** *Polyedrische Unterteilungen und Polytopprojektionen.* Disputationsvortrag, TU-Berlin
- 21.10.96** *Polyedrische Unterteilungen und Polytopprojektionen.* Kolloquium des Graduiertenkollegs “Algorithmische Diskrete Mathematik”, Berlin

S. Reich

- 06.09.96** *Long-term behavior of symplectic integrators.* Simon Fraser University, Burnaby, Kanada (Kolloquiumsvortrag)
- 16.09.96** *Soft constraints and reduced molecular dynamics.* Beckman Institute, Urbana-Champaign, USA (Kolloquiumsvortrag)
- 02.10.96** *Hamiltonsche partielle Differentialgleichungen in der Elektrotechnik.* Kleinheubacher Tagung, Kleinheubach
- 31.10.96** *Averaging and reduced molecular dynamics.* HCM Workshop Innovative Time Integrators, CWI, Amsterdam, Niederlande
- 29.11.96** *Symplectic integrators and backward error analysis.* TU Dresden, Dresden (Kolloquiumsvortrag)

R. Roitzsch

- 20.09.96** *Graphische Benutzeroberflächen für KASKADE-Anwendungen.*
KASKADE-Tag am WIAS, Berlin

A. Sarangarajan

- 19.03.96** *Two Extremal Problems on 0/1 Polytopes.* Konrad-Zuse-Zentrum Berlin

C. Saro

- 03.12.96** „Die verflixten Nummern! Oder: Zum Umgang mit kniffligen Fragen der Objektdokumentation“ Seminar an der Rheinischen Museumsschule in Brauweiler.

J. Schmidt-Ehrenberg

- 24.09.96** *Visualization of Chemical Reaction Networks* (Poster).
Int. Summer School on Scientific and Mathematical Visualization, 23.-27.
Sept. 1996, Ettenheim (Breisgau)

Ch. Schütte

- 09.02.96** *Gemischt quanten–klassische Dynamik*. Hoechst AG, Frankfurt
- 03.05.96** *Quantum–Classical Molecular Dynamics as an Approximation to full Quantum Dynamics*. Berliner Dynamik Kolloquium
- 15.07.96** *Smoothed Molecular Dynamics*. World Congress of Nonlinear Analysts'96, Athen, Griechenland
- 20.09.96** *Homogenisierung von Hamiltonschen Anfangswertproblemen aus der Moleküldynamik*. DMV–Jahrestagung, Jena
- 25.11.96** *Homogenisierung hochoszillatorischer Hamiltonscher Systeme und Takens–Chaos*. Bayreuth
- 27.11.96** *Gemischt quanten–klassische Dynamik Oder: Wie kann man sich einen Großteil der Quantendynamik ersparen?* Tübingen
- 05.12.96** *Gekoppelt quanten–klassische Simulationen in der Moleküldynamik*. Humboldt–Universität zu Berlin

R. Schultz

- 12.01.96** *A Framework using Gröbner Bases for Solving Stochastic Programs with Integer Recourse*. Operations Research Seminar, School for Industrial and Systems Engineering, Georgia Institute of Technology, Atlanta, USA
- 17.01.96** *Gröbner Bases and Stochastic Integer Programming*. NSF/IFIP Workshop on Stochastic Programming and Application, Tuscon, USA
- 20.01.96** *Optimierung in Kraftwerkssystemen*. Mathematisches Kolloquium, Otto–von–Guericke–Universität, Magdeburg
- 31.01.96** *Dekomposition in der ganzzahligen stochastischen Optimierung*. Forschungsseminar “Numerik Stochastischer Modelle, Humboldt–Universität zu Berlin

- 07.02.96** *Wirtschaftliche Lastverteilung bei der Kraftwerkeinsatzplanung.* Fachbereich Mathematik, Carl von Ossietzky Universität, Oldenburg
- 23.04.96** *Optimale Blockauswahl in Kraftwerkssystemen.* 12. Symposium des Arbeitskreises “Mathematik in Forschung und Praxis”, Bad Honnef
- 13.05.96** *Optimization Methods in Power Dispatch.* Optimization Days, Montreal, Kanada
- 20.05.96** *Gröbner Bases Methods in Stochastic Integer Programming.* Fifth SIAM Conference on Optimization, Victoria, B.C., Kanada
- 30.05.96** *Lösungsverfahren für ganzzahlige stochastische Programme.* Forschungssseminar “Mathematische Optimierung”, Humboldt–Universität zu Berlin
- 11.06.96** *Einsatzoptimierung von Kraftwerken.* Fakultät für Mathematik und Informatik der Universität Leipzig
- 18.06.96** *Preprocessing in Two–Stage Stochastic Programming via Fourier–Motzkin Elimination.* 3rd GAMM/IFIP–Workshop and Tutorial on Stochastic Optimization, Universität der Bundeswehr, München
- 22.07.96** *On the Glivenko–Cantelli Problem in Two–Stage Stochastic Programming.* 8th French–German Conference on Optimization, Trier
- 29.11.96** *Einsatzoptimierung in Kraftwerkssystemen.* Fachbereich Mathematik, Gerhard–Mercator–Universität – GH Duisburg
- 05.12.96** *Optimierungsprobleme bei der Elektrizitätsversorgung.* Kolloquium, Mathematisches Seminar, Christian–Albrechts–Universität zu Kiel

S. Schulz

- 22.03.96** *Stand und Erweiterung der Lichtwellenleiter–Verkabelung in Berlin.* Sitzung der für die Datenkommunikation verantwortlichen Vertreter der Berliner Wissenschaftseinrichtungen, Konrad–Zuse–Zentrum, Berlin

M. Seebass

- 27.02.96** *Gittergenerierung.* Workshop “Hyperthermie–Planung”, ZIB
- 12.04.96** *Three–Dimensional Finite Elements Mesh Generation for Numerical Simulations of Hyperthermia Treatments.* 7th Int. Congress on Hyperthermic Oncology, Rom, Italien
- 16.05.96** *Therapieplanung in der Hyperthermie.* Treffpunkt Medizintechnik, MEDTECH '96, Berlin
- 03.06.96** *Das Berliner Hyperthermie–Planungssystem.* Graduiertenkolleg, Deutsches Krebsforschungszentrum, Heidelberg

19.06.96 *Generierung von 3D-Tetraedergittern aus Konturdaten mit Anwendung in der Planung von Hyperthermie-Behandlungen.* Institut für Geologie, Geophysik und Geoinformatik, FU Berlin

D. Stalling

23.02.96 *Field Visualization in Molecular Simulations.* Workshop “Visualization in Physics”, 22./23. Febr. 1996, Universität Bielefeld

27.02.96 *HyperPlan – ein integriertes Softwaresystem für die Hyperthermie-Planung.* Workshop “Hyperthermie-Planung”, ZIB

14.03.96 *Intelligent Scissor for Medical Image Segmentation.* 4. Freiburger Workshop “Digitale Bildverarbeitung in der Medizin”, Freiburg

12.04.96 *HyperPlan – An Integrated System for Treatment Planning in Regional Hyperthermia.* 7th Int. Congress on Hyperthermic Oncology, Rom, Italien

13.05.96 *Texture Based Methods for Vector Field Visualization.* Graphik-Kolloquium am Institut für Angewandte Mathematik der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

18.06.96 *Die Linienintegral-Faltungsmethode zur Visualisierung von Vektorfeldern.* Arbeitsgruppenseminar Theoretische Informatik am Fachbereich Mathematik der FU Berlin

24.09.96 *Line Integral Convolution for Arbitrary Surfaces in 3D (Poster).* Int. Summer School on Scientific and Mathematical Visualization, 23.-27. Sept. 1996, Ettenheim (Breisgau)

27.09.96 *Parallel Line Integral Convolution.* First International Workshop on Parallel Graphics and Visualization, Bristol, United Kingdom

Th. Steinke

16.04.96 *Verteilte Anwendungen in der Chemie – mit Demonstration.* Besuch von Studenten und Studentinnen des Faches Informatik der Fachhochschule Konstanz, Konrad-Zuse-Zentrum, Berlin

13.05.96 *Chemie-Pakete auf Höchstleistungsrechnern – ein Überblick.* Im Rahmen der Veranstaltungsreihe des Ausbildungs- und Beratungszentrums der ZEDAT der FU Berlin

20.09.96 *Comparative Performance of Quantum Chemistry Codes.* International Seminar on Industrial Applications of Quantum Mechanics, 19.–20.09.96 Oxford, United Kingdom

M. Stolle

- 16.01.96** *Programmierung des T3D — Vergleich und Bewertung von Methoden und Ansätzen.* Kolloquium des Fachbereichs Mathematik der Freien Universität Berlin
- 25.01.96** *Der Backup-Service an der Freien Universität Berlin.* Kolloquium des Fachbereichs Mathematik der Freien Universität Berlin
- 13.11.96** *Mass Storage Solutions at the Free University Berlin.* 8th UniTree User Group Meeting and Mass Storage Symposium, 12.–14.11.96, Toulouse, Frankreich

R. Urbaniak

- 10.01.96** *Test Sets under Graph Operations.* Workshop on Combinatorial Optimization, Aussois, Frankreich
- 10.06.96** *Properties of Test Sets and Universal Test Sets.* Kolloquium des Graduiertenkollegs “Algorithmische Diskrete Mathematik”, TU Berlin
- 19.07.96** *Test Sets for Integer Programming, Composition and Decomposition Techniques.* International Colloquium on Combinatorics and Graph Theory, Balatonlelle, Ungarn
- 06.09.96** *Test Sets for Integer Programming.* Symposium über Operations Research 96 (SOR), Braunschweig
- 21.10.96** *Composition and Decomposition of Test Sets.* Workshop on Test Sets in Integer Programming, ZIB Berlin
- 04.11.96** *Composition and Decomposition of Test Sets.* Institute for Operations Research and Management Sciences (INFORMS), Atlanta, USA
- 26.11.96** *Composition and Decomposition of Test Sets.* Center of Operations Research and Econometrics (COROE), Louvain la Neuve, Belgien

A. Wagler

- 19.07.96** *On Critically Perfect Graphs.* International Colloquium on Combinatorics and Graph Theory, Balatonlelle, Ungarn

M. Weiser

- 16.09.96** *Affin-konjugierte Newton-Verfahren.* DMV-Jahrestagung 1996, Jena, Sektion 12, Wissenschaftliches Rechnen

R. Weismantel

- 15.01.96** *Neuere Ansätze in der Ganzzahligen Optimierung. Teil 1 und 2.* Vorlesung im Graduiertenkolleg, ZIB–Berlin
- 19.01.96** *Das Rucksackproblem in der Ganzzahligen Optimierung.* Kolloquium, Otto–von–Guericke–Universität, Magdeburg
- 22.01.96** *Neuere Ansätze in der Ganzzahligen Optimierung. Teil 3 und 4.* Vorlesung im Graduiertenkolleg, ZIB–Berlin
- 25.01.96** *Testmengen in der Ganzzahligen Optimierung.* Kolloquium, Ruhr–Universität, Bochum
- 26.01.96** *Workshop: Test Sets in Integer Programming,* Köln
- 24.04.96** *A test set approach to combinatorial optimization.* Center of Operations Research and Econometrics (CORE), Louvain la Neuve, Belgien.
- 11.06.96** *Das Rucksackproblem in der ganzzahligen Optimierung.* Kolloquium, Universität Leipzig.
- 11.06.96** *Das Rucksackproblem in der kombinatorischen Optimierung.* Kolloquium, Universität Kaiserslautern.
- 13.06.96** *Das Rucksackproblem: Primale Methoden.* Kolloquium, Universität Trier.
- 18.07.96** *Gemischt ganzzahlige Optimierung.* Kolloquium, Universität Heidelberg.
- 18.07.96** *Testmengen.* Kolloquium, Universität Heidelberg.
- 06.09.96** *Knapsack problems.* Symposium über Operations Research (SOR96), Braunschweig.
- 20.11.96** *Das Telebussystem in Berlin: eine Anwendung der Ganzzahligen Optimierung.* Kolloquium, Universität Duisburg.
- 05.12.96** *Das Rucksackproblem in der kombinatorischen Optimierung.* Kolloquium, Universität Kiel.
- 05.12.96** *Nichtlineare Methoden für das Travelling-Salesman Problem.* Kolloquium, Universität Kiel.

R. Wessäly

- 28.03.96** *Capacity Expansion of Survivable Telecommunication Networks.* Symposium on Combinatorial Optimization (CO96), London, U.K.
- 05.09.96** *Cost–Efficient Network Synthesis from Leased Lines.* Symposium über Operations Research, Braunschweig
- 14.10.96** *Dimensioning of Survivable Telecommunication Networks.* Workshop on Combinatorial Optimization, Oberwolfach

M. Zöckler

24.09.96 *Illuminated Field Lines for Vector Field Visualization*. Int. Summer School on Scientific and Mathematical Visualization, 23.-27. Sept. 1996, Ettenheim (Breisgau)

30.10.96 *Interactive Visualization of 3D-Vector Fields using Illuminated Stream Lines*. Visualization '96 International Conference, San Francisco, USA

29.11.96 *Molekuldynamik*.

Arbeitsgruppenseminar am Institut für Astronomie und Astrophysik der TU-Berlin

7.2 Vorlesungen und Seminare

W. Baumann: TU Berlin

WS 95/96 Aktuelle Arbeitstechniken der Informations- und Kommunikationstechnik für Ingenieure (Integrierte Lehrveranstaltung) mit F. Thiele

M. Brandt: HU Berlin

SS 96 Funktionentheorie I (Vorlesung)

WS 96/97 Funktionentheorie II (Vorlesung)

P. Deuffhard: FU Berlin

WS 95/96 Numerische Randwertprobleme und optimale Steuerungen (Seminar)

SS 96 Adaptive Newton-Verfahren für nichtlineare Probleme. Theorie und Algorithmen (Vorlesung/Übung)

WS 96/97 Numerik partieller Differentialgleichungen (Vorlesung/Übung)

P. Deuffhard (ZIB/FU Berlin), B. Fiedler (FU Berlin), K. Schneider (WIAS Berlin)

SS 96 Nichtlineare Dynamik (gemeinsames Oberseminar der FU, des WIAS und des ZIB)

K. Gatermann: FU Berlin

WS 95/96 Algorithmen der Computeralgebra (Vorlesung)

SS 96 Anwendungen der Computeralgebra (Seminar) mit W. Koepf

WS 96/97 Symmetrische Verzweigungstheorie (Vorlesung)

M. Grötschel: TU Berlin

WS 95/96 Anwendungen in der ganzzahligen Optimierung (Vorlesung)

WS 95/96 Routen- und Fahrzeugeinsatzprobleme (Seminar)

WS 96/97 Mathematische Aspekte linearer ökonomischer Modelle (Vorlesung)

C. Helmberg, A. Martin, R. Weismantel: TU Berlin

SS 96 Numerische Aspekte bei der Lösung ganzzahliger Programme (Seminar)

C. Helmberg, R. Weismantel: TU Berlin

WS 96/97 Semidefinite Programmierung in der kombinatorischen Optimierung (Vorlesung)

M. Henk: TU Berlin

SS 96 Konvexgeometrie (Vorlesung)

WS 96/97 Algorithmische Geometrie der Zahlen (Vorlesung)

M. Henk: Universität Magdeburg

WS 95/96 Optimierungsprobleme in der Konvexgeometrie (Vorlesung)

WS 95/96 Ellipsoidalgorithmus und kombinatorische Optimierungsprobleme (Seminar)

SS 96 Algorithmen zur ganzzahligen Optimierung/Ganzzahligkeitsfragen (Seminar)

U. Maas: Universität Stuttgart

WS 95/96 Numerische Behandlung von Verbrennungsprozessen (Vorlesung)

A. Martin: TU Berlin

WS 95/96 Mehrgüter-Fluß-Probleme (Vorlesung)

U. Nowak: FU Berlin

WS 96/97 Numerische Mathematik für das Lehramt (Vorlesung)

S. Reich: FU Berlin

SS 96 Numerische Mathematik II: Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen (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)

SS 96 Gröbner-Basen und ganzzahlige lineare Optimierung (Vorlesung)

R. Weismantel: TU Berlin

WS 95/96 Computerorientierte Mathematik (Vorlesung)

7.3 Mitveranstalter von auswärtigen Tagungen

R. Beck, B. Erdmann, R. Roitzsch

29.–31.05.96 Workshop Data Structures for Adaptive Multilevel-FE Methods, Berlin (zusammen mit dem WIAS)

20.09.96 1. KASKADE-Tag am WIAS — Entwicklungen und Anwendungen des adaptiven Finite-Elemente-Codes KASKADE, Berlin (zusammen mit dem WIAS)

P. Deuffhard

03.–08.06.96 Ninth International Conference on Domain Decomposition Methods (DDM9), Bergen, Norwegen.

01.–05.07.96 Conference on Grid Adaptation in Computational PDEs: Theory and Applications, Edinburgh, Scotland.

16.–20.09.96 Seventh International Workshop on Parallel Processing by Cellular Automata and Arrays (PARCELLA 96), Berlin.

M. Grötschel

01.–03.04.96 Gemeinsamer Workshop IuK 96: *Neue Medien in den Wissenschaften* der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV), der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG), der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) und der Gesellschaft für Informatik (GI), Technische Universität München. Veranstalter: A. Endres (GI), J. Gasteiger (GDCh), M. Grötschel (DMV), E.R. Hilf (DPG)

24.–26.04.96 Workshop für das DFG-Schwerpunktprogramm “Echtzeitoptimierung großer Systeme”, Schloß Thurnau.

- 28.-31.10.96** Berichtskolloquium zum DFG-Schwerpunktprogramm “Echtzeit-optimierung großer Systeme”, Bad Fredeburg.
- 15.–17.12.96** Gemeinsamer Workshop der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV), der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG), der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) und der Gesellschaft für Informatik (GI) “Metadaten und Strukturierung elektronischer Information”, Staats- und Universitätsbibliothek Göttingen, Göttingen.
- 15.–17.12.96** IuK Kommission der wissenschaftlichen Fachgeellschaften: Metadaten und Suchmaschinen, Göttingen.
Veranstalter: H.J. Becker, M. Grötschel

URL: <http://elib.zib.de/math.events.work.iuk>

H.C. Hege

- 22.–27.09.96** International Summer School on Scientific and Mathematical Visualization, Ettenheim (Breisgau), Tagung mit Unterstützung der DFG, Eurographics und GI; Veranstalter: M. Rumpf, D. Saupe (Universität Freiburg), H.C. Hege (ZIB) und K. Polthier (TU Berlin)

8 Gäste am ZIB

8.1 Gastvorträge

- 08.01.96** Dr. Michael Böttiger (Deutsches Klimarechenzentrum, Hamburg)
Ein Blick hinter die Kulissen: Produktion des Filmes “Klimasimulation — Vorhersage des globalen Wandels” für die Weltklima-Konferenz.
- 23.01.96** Dr. Raj Spielmann (Dresden):
Bifurkationen bei distributionellen semilinearen elliptischen Randwertaufgaben.
- 30.01.96** Dr. F. Guyard (WIAS Berlin):
Forced symmetry breaking for periodic solutions.
- 05.02.96** Andreas Wierse (Rechenzentrum der Universität Stuttgart):
Verteilte kollaborative Visualisierung mit COVISE.
- 13.02.96** Dr. Thomas Gerz (DLR, Institut für Physik der Atmosphäre, Oberpfaffenhofen):
Ein Modell zur Simulation homogener Turbulenz.
- 20.02.96** M. Balinski (Ecole Polytechnique, Paris):
Of stable marriages and graphs, and strategy and polytopes.

- 22.02.96** Dr. P. Balá (ICM, Universität Warschau):
Separation of the quantum and classical degrees of freedom.
- 22.02.96** Dr. P. Grochowski (ICM, Universität Warschau):
Variational formulation of some approximate models for quantum and mixed quantum–classical dynamics.
- 28.02.96** A. Ruszczyński (International Institute for Applied Systems Analysis, Laxenburg, Austria):
On Optimal Allocation of Indivisible Resources.
- 04.03.96** Dr. Ing. Georgios Sakas (Fraunhofer Institut für Graphische Datenverarbeitung, Darmstadt):
Visualisierung medizinischer Tiefen- und Volumendaten.
- 12.03.96** Dr. Reinhard März (Siemens AG, München):
Computer Aided Engineering für die integrierte Optik.
- 21.03.96** Prof. Dr. Ernst Hairer (Département de Mathématiques, Université de Genève):
Lebensdauer der Rückwärtsanalyse bei Zeitintegratoren.
- 29.03.96** Prof. S. Bertoluzza (Istituto di Analisi del C.N.R., Pavia, Italien):
Using Interpolating Wavelets for the Numerical Solution of Partial Differential Equations.
- 03.05.96** Prof. J.M. Sanz–Serna (Departamento de Matematica, Universidad de Valladolid, Spanien):
Error Growth in the Numerical Integration of the Time–Dependent Partial Differential Equations.
- 30.05.96** Robert Haines (MIT, Cambridge):
pV3 (parallel Visual 3): A Distributed System for Large–Scale Unsteady CFD Visualization.
- 01.07.96** Prof. Dr. Thomas Ertl (Inst. für Graphische Datenverarbeitung, Universität Erlangen–Nürnberg):
Strömungsvisualisierung in strukturierten Multiblock–Gittern.
- 13.08.96** Dr. W. Merz (Technische Universität München):
Oxidations- und Dopanten-diffusionsprobleme in der Halbleitertechnologie.
- 20.08.96** C. Carøe (Universität Kopenhagen):
Benders Decomposition in Two–stage Stochastic Integer Programming.
- 26.08.96** M. Hadjiat (Universität Marseille):
The minimum–cost tension problem.
- 24.09.96** F. Rendl (Technische Universität Graz):
Eigenwertoptimierung und Semidefinite Programme.

- 05.11.96** Priv.-Doz. Dr. Steppeler (Deutscher Wetterdienst, Offenbach):
Die numerische Wettersvorhersage beim Deutschen Wetterdienst.
- 06.11.96** S. Wakabayashi (Universität São Paulo):
Approximation algorithms for the orthogonal z-oriented 3D-packing problem.
- 11.11.96** Dr. Roberto Grosso (Inst. für Graphische Datenverarbeitung, Universität Erlangen-Nürnberg)
Hierarchische Ansätze in der Visualisierung.
- 02..12.96** Prof. Dr. Herbert W. Franke, Egling
Schnittstelle Mathematik/Kunst.
- 16.12.96** Kunio Tanabe (Institute of Statistical Mathematics, Tokyo, Japan):
The Lagrange Function for Constrained Optimization Revisited for a Differential Geometric Point of View.

8.2 Gastaufenthalte

Dr. Karen Aardal (Universität Utrecht)
03.–08.03.96

Dr. Dimitris Alevras (Stern School of Business, New York University, New York, USA)
01.07.94–30.06.96 (Postdoc-Fellowship)

Prof. Dr. Imre Barany (Mathematical Institute Budapest)
20.–23.10.96

Prof. Dr. David Bayer (Columbia University, USA)
19.–23.10.96

Dr.-Ing. Ekkehard Beier (Institut für Praktische Informatik und Medieninformatik, Technische Universität Ilmenau)
18.06.96

Prof. Dr. med. Norbert Bornfeld (Augenklinik, Universitätsklinikum Benjamin Franklin, Freie Universität Berlin)
13.02.96

Claus Carøe (Universität Kopenhagen, Dänemark)
01.8.96–31.01.97

Prof. Dr. M. Dellnitz (Lehrstuhl für Angewandte Mathematik, Mathematisches Institut, Universität Bayreuth)
10.–13.09.96

Prof. Dr. Peter Gritzmann (Universität Trier)
19.–22.10.96

Malika Hadjiat (Universität Marseille, Frankreich)
24.–27.08.96

Prof. Dr. K.-H. Hoffmann (Universität München)
10.–11.05.96

Serkan Hosten (Texas A&M University, USA)
19.–23.10.96

Dr. Mikael Jern (Vice President of Technology, AVS/UNIRAS, Birkeröd, Dänemark)
22.05.96

Oliver Junge (Mathematisches Institut, Universität Bayreuth)
10.–13.09.96 und vom 15.–18.10.96

Prof. Dr. Thomas Liebling (ETH Zürich, Schweiz)
18.–23.10.1996

Prof. Dr. László Lovász (Yale University, USA)
09.–12.05.96 und 19.–23.10.96

Dr. Eva Lee (Columbia University, USA)
30.06.–03.07.96

Prof. Dr. Olli Lehto (Universität Helsinki, Finnland)
14.–16.02.96

Prof. Dr. B. Lesyng (ICM, Universität Warschau)
21.–23.02.96

Prof. Dr. Manfred Padberg (New York University, USA)
06.–17.06.96

Prof. Dr. Loic Pottier (Sophia Antipolis, Frankreich)
19.–23.10.96

Prof. Dr. Franz Rendl (Universität Graz, Österreich)
21.–25.09.96

Dr. Rainer Ruge (Referatsleiter, Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kultur, Potsdam)
17.06.96

Prof. Dr. Andrzej Ruzsyczynski (IIASA, Laxenburg, Österreich)
24.02.–01.03.96

Dr. Aravamuthan Sarangarajan (Cornell University, New York, USA)
15.09.95–15.09.96 (Postdoc-Fellowship)

Prof. Dr. Herbert Scarf (Yale University, USA)
18.–23.10.96

Max Schönherr (Redakteur, Deutschlandfunk Köln)

26.02.96

Prof. Dr. Peter Schröder (California Institute of Technology, Pasadena, USA)

20.06.96

Prof. Dr. David Shallcross (Bellcore, USA)

19.–23.10.96

Prof. Dr. Bernd Sturfels (Berkeley University, USA)

19.–23.10.96

Prof. Dr. Dennis Sullivan (Dept. of Electrical Engineering, University of Idaho, USA)

29.07.—21.08.96

Prof. Dr. Rekha Thomas (Texas A&M University, USA)

19.–23.10.96

Prof. Dr. Klaus Truemper (University of Texas at Dallas, USA)

23.–25.06.96

Dr. Maarten H. van der Vlerk (Universität Groningen, Niederlande)

15.–20.04.96

Prof. Dr. Yoshiko Wakabayashi (Universität São Paulo, Brasilien)

12.10.–10.12.96 (DAAD-Stipendiat)

Markus Wiegelmann (Universität Trier)

19.–23.10.96

8.3 Tagungen und Veranstaltungen des ZIB

27.02.96 Workshop “Hyperthermie-Planung”, im ZIB

28.02.96 Informationsveranstaltung im ZIB für die Umweltgruppe des VDI Berlin-Brandenburg

04.03.96 Minisymposium “Quantenklassische Modelle und ihre Diskretisierung”.
Veranstalter: P. Deuffhard, Ch. Schütte (gemeinsam mit ICM, Warschau)

04.03.96 Informationsveranstaltung im ZIB für eine Schülergruppe der Herder-Oberschule (Gymnasium), Berlin.

20.03.96 Informationsaustausch über die gemeinsame Nutzung eines Breitband-WIN-Anschlusses des DFN in Berlin. H. Busch, S. Schulz, im ZIB.

16.04.96 Informationsveranstaltung im ZIB für eine Schülergruppe des Leistungskurs Mathematik des Technischen Gymnasiums der David-Roentgen-Schule, Neuwied.

- 16.04.96** Informationsveranstaltung im ZIB für Studentinnen und Studenten des Faches Technische Informatik der Fachhochschule Konstanz.
- 03.05.96** Berliner Dynamik Kolloquium
Veranstalter: P. Deuffhard, B. Fiedler (FU Berlin), K. Schneider (WIAS Berlin)
- 11.06.96** Moderne Informations- und Kommunikationstechnologie. Informationsveranstaltung im ZIB für Studierende des Bereichs “Archiv-, Bibliotheks- und Dokumentationswesen” der Fachhochschule Potsdam.
Veranstalter: J. Lügger (ZIB)
- 28.–29.08.96** Workshop des Arbeitskreises “Inhalt” der DMV am ZIB.
Veranstalter: J. Lügger (ZIB), G. Törner (Universität Duisburg)
- 28.–30.10.96** Workshop Museumsdokumentation. Veranstalter: C. Saro in Zusammenarbeit mit dem Institut für Museumskunde und der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund
- Oberseminar Nichtlineare Dynamik, organisiert von Bernold Fiedler (FU), Karin Gatermann (FU/ZIB), Klaus Schneider (WIAS) und P. Deuffhard (ZIB/FU).
- Berliner Colloquium für Wissenschaftliche Visualisierung, monatlich im ZIB, H.C. Hege (ZIB) und K. Polthier (TUB)

8.4 Ausstellungen und Softwaredemonstrationen

- 14.–20.03.96** Präsentation auf der CeBIT '96
- am Forschungsmarkt Berlin: *Hyperthermie-Planungssystem*
 - am Stand des BMBF: *Netzverteilte Therapieplanung* — Demo-Anwendung bei der Eröffnung des Breitband-Wissenschaftsnetzes durch Bundesminister Rüttgers
 - am Stand des DFN zum Themenbereich Netzverteilte Visualisierung:
 - *Netzverteilte, interaktive Strömungsvisualisierung*
 - *On-line-MPEG-Kompression und Filmübertragung*
 - *Digitales, verteiltes Schnittstudio*
- 16.–17.10.96** Klinikum Großhadern, Forschungstag:
Hyperthermie-Planungssystem
- 25.–26.10.96** Kongreß der American Society for Therapeutic Radiology and Oncology (ASTRO), Los Angeles: Hyperthermie-Planungssystem (kommerzielle Variante)

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 1996 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Dieter Schumann, TUB, Vorsitzender
- Prof. Dr. Günther Kaindl, FUB
- Prof. Dr. Michael Müller-Preußker, HUB — bis 31.08.96
- Prof. Dr. Konrad Gröger, HUB — ab 01.09.96
- StS Prof. Dr. Erich Thies, Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur
- Reiner Jäck, Senatsverwaltung für Wirtschaft und Betriebe — bis 31.10.96
- Peter Schallock, Senatsverwaltung für Wirtschaft und Betriebe — ab 01.11.96
- 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

Der Verwaltungsrat tagte am 12. Januar, 27. Juni und 19. Dezember 1996.

Präsident des ZIB ist Prof. Dr. Peter Deuffhard.

Als Vizepräsident amtiert Prof. Dr. Martin Grötschel.

9.2 Satzung

Die vom Verwaltungsrat beschlossene Satzung legt Funktionen und Verfahrenswesen 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 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

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. VICM98 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 1996 die folgenden Projekte bearbeitet wurden:

- Dr. Michael Dellnitz (Universität Bayreuth)
Symbolisch-numerische Methoden für dynamische Systeme

- Prof. Dr. Ralf Kornhuber (Universität Stuttgart)
Monotone Mehrgittermethoden
- 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 1996 (bis zu den Neuwahlen am 11. Dezember 1996) wie folgt zusammen:

Peter Ertmann – Vorsitzender
 Detlef Bayer – verstorben am 08.05.1996
 Klaus–Dietrich Engel
 Jörg–Joachim Jacob – ab 09.05.1996
 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 bei der öffentlichen Hand und den industriellen Kooperationspartnern – erfreuliche Kontinuität aus. Reduzierungen des Zuschusses durch den Senat von Berlin konnten durch sparsame Wirtschaftsführung und durch die Inanspruchnahme von Rücklagen aus dem Vorjahr aufgefangen werden. Für die entscheidungsreifen investiven Vorhaben standen die erforderlichen Finanzmittel zur Verfügung. Dabei bildete die im Rahmen des HBFG erfolgte Finanzierung des Neubaus (mit einem Gesamtinvestitionsvolumen von ca. 57 Mio. DM) den Schwerpunkt. Kritisch ist bereits jetzt zu bemerken, daß das Land Berlin für 1997 voraussichtlich keine Investitionsmittel für den Höchstleistungsrechner bereitstellen wird. Dies würde einen deutlichen technischen Rückschritt verursachen.

Ohne die Gehälter und Dienstbezüge der planmäßigen Mitarbeiter beliefen sich die korrigierten Wirtschaftsplanansätze im Jahre 1996 auf insgesamt 14.432 TDM; davon entfallen auf den konsumtiven Bereich 12.982 TDM und auf Investitionen 1.450 TDM.

Das Land Berlin leistete einen ausgabewirksamen Zuschuß von 10.270 TDM. Die eigenen Erträge aus Kooperationen und Drittmittelprojekten sind mit 4.500 TDM veranschlagt.

9.8 Personelle Entwicklung

Für die planmäßigen Mitarbeiter (84 Stellen, – 5 Beamten– und 79 Angestelltenstellen – davon 2 Stellen ohne Bezüge und 6 Stellen durch Wegfallvermerke nicht finanziert) waren im Haushaltsplan des Landes Berlin nach Durchschnittssätzen 7.591,5 TDM ausgewiesen.

Unabhängig von ihrer Finanzierung entwickelte sich die Zahl der Beschäftigten wie folgt:

	31.12.95	31.12.96
Leitung	4	4
Wissenschaftliches Personal	72	72
Datenverarbeitung/Technik	28	28
Verwaltung/Bibliothek	15	13
Studentische Hilfskräfte	36	31
Insgesamt	155	148

10 Ansprechpartner

Präsident: Prof. Dr. Peter Deuffhard
Inhaber des Lehrstuhls
Scientific Computing am Fachbereich
Mathematik und Informatik der Freien Universität Berlin
Tel. (030) 841 85 – 101

Vizepräsident: Prof. Dr. Martin Grötschel
Inhaber des Lehrstuhls
Diskrete Mathematik am Fachbereich
Mathematik der Technischen Universität Berlin
Tel. (030) 841 85 – 210

Numerische Analysis und Modellierung:	Peter J. Deuffhard/ Folkmar A. Bornemann	841 85 – 101 841 85 – 172
Wissenschaftliche Software:	Ulrich Nowak	841 85 – 175
Wissenschaftliche Visualisierung:	Hans-Christian Hege	841 85 – 141
Optimierung:	Martin Grötschel/ Robert Weismantel	841 85 – 210 841 85 – 213
Symbolik:	Herbert Melenk	841 85 – 195
Wissenschaftliche Informationssysteme:	Joachim Lügger	841 85 – 173
Rechenzentrum:	Jürgen Gottschewski	841 85 – 130
Höchstleistungsrechner:	Hubert Busch	841 85 – 135
Verwaltung:	Henry Thieme	841 85 – 100
Bibliothek:	Regine Kossick	841 85 – 233

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB)

Takustraße 7, D-14195 Berlin-Dahlem
Telefon: (0 30) 841 85 – 0
Telefax: (0 30) 841 85 – 125
e-mail: nachname@zib.de

Weitere Informationen über das ZIB sowie sämtliche Publikationen sind über unseren WWW-Server unter

<http://www.zib.de>

zu erhalten.