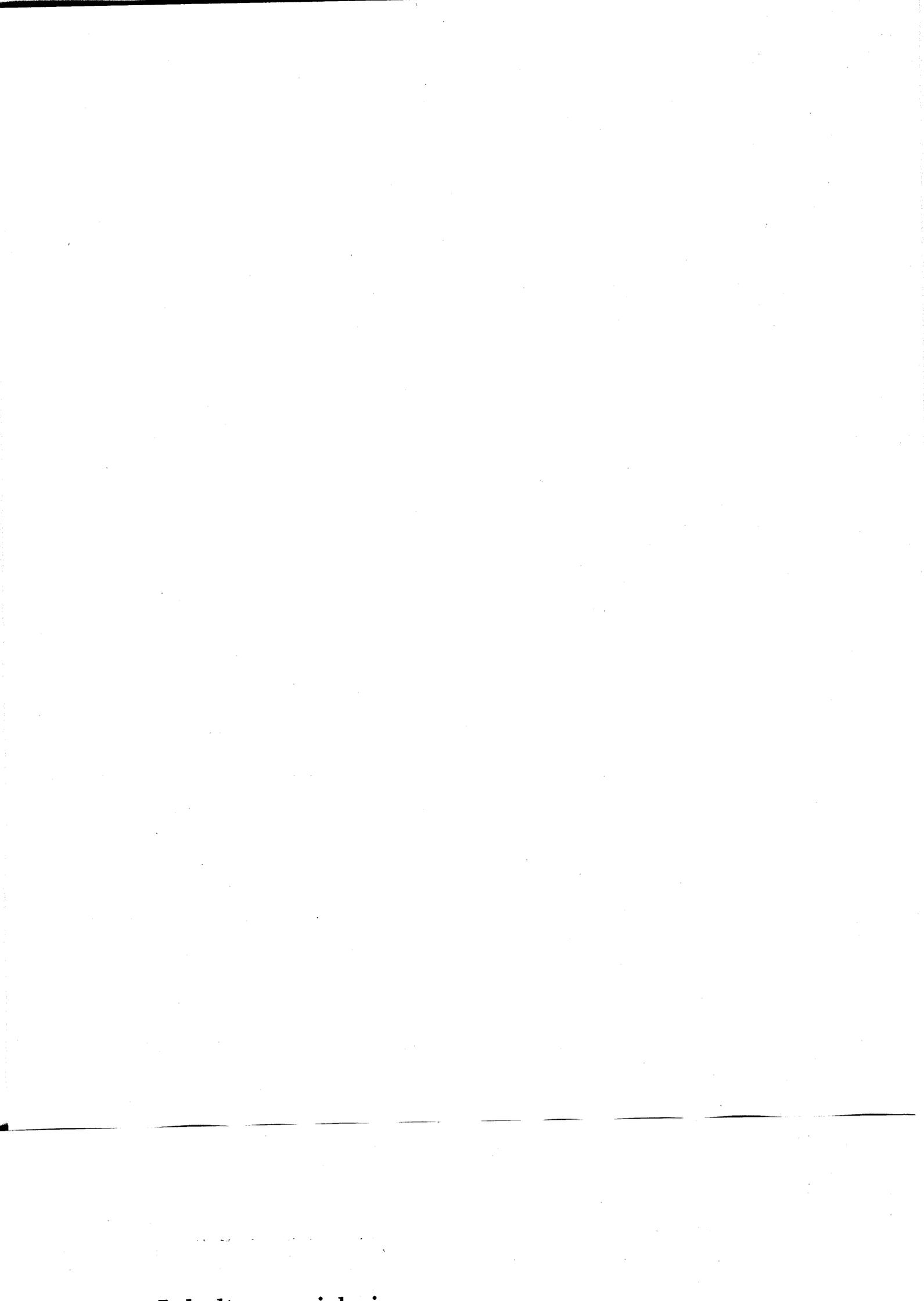


---

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin



# Jahresbericht 1991



Herausgegeben vom  
Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin  
Heilbronner Str. 10  
1000 Berlin 31  
Verantwortlich: Dr. Klaus André  
Umschlagsatz und Druck: Rabe KG Buch- und Offsetdruck Berlin

ISSN 0934-5892

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Vorbemerkung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Das ZIB – Aufgaben und Ziele</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>Forschung und Entwicklung</b>	<b>7</b>
3.1	Zusammenfassung . . . . .	7
3.2	<b>Grundlagenprojekte</b> . . . . .	9
	Software-Implementierung adaptiver Multilevel FE-Methoden	9
	Adaptive Multilevel-Finite-Elemente-Methoden in drei Raum- dimensionen . . . . .	10
	Adaptive FE-Verfahren zur Lösung freier Randwertprobleme .	12
	Unvollständige LU-Zerlegung auf lokal strukturierten Netzen .	14
	Entwicklung adaptiver Multilevelverfahren zur Berechnung der Transportgleichung . . . . .	16
	Entwicklung adaptiver Multilevelverfahren zur Berechnung von Reaktions-Diffusionsgleichungen . . . . .	18
	Adaptive Newton-Methoden für nichtlineare partielle Diffe- rentialgleichungen . . . . .	19
	Affin-invariante Newton- und Gauss-Newton-Codes für hoch- nichtlineare Systeme . . . . .	20
	Iterative Lösung sehr großer unsymmetrischer linearer Glei- chungssysteme . . . . .	22
	Gemischt symbolisch-numerische Lösung nichtlinearer Glei- chungssysteme mit Symmetrie . . . . .	24
	Adaptive diskrete gewichtete Galerkin-Methoden für makro- molekulare Prozesse . . . . .	26
	Entwicklung eines Simulationspaketes für makromolekulare Reaktionen einschließlich chemischer Reaktionskinetik .	27
	Extrapolationsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichun- gen und differentiell-algebraische Systeme . . . . .	28
	Kalkülsystem für Probleme der optimalen Steuerung . . . . .	29
	Lehrbuch zur Numerischen Mathematik . . . . .	30
	Symbolische Lösung algebraischer Gleichungssysteme . . . . .	31
	Weiterentwicklung von REDUCE . . . . .	32

	Europäische Normung von LISP . . . . .	34
	Polyedrischer Ansatz für kombinatorische Optimierungspro- bleme . . . . .	35
	Quadratische 0/1-Optimierung . . . . .	36
<b>3.3</b>	<b>Anwendungsprojekte . . . . .</b>	<b>37</b>
	Das Mehrfach-Partitionierungsprojekt . . . . .	37
	Das Verdrahtungsproblem im VLSI-Design . . . . .	38
	Plazieren von Zellen im VLSI-Design . . . . .	40
	Auslegung von ausfallsicheren Kommunikationsnetzwerken . .	42
	Parallelisierung numerischer und kombinatorischer Algorithmen	44
	Quantenchromodynamik auf einem hochparallelen Rechner . .	46
	Scientific Visualization . . . . .	48
	Verlustfreie Bilddatenkompression . . . . .	50
	AGIL (The Adaptable Graphical Interface Layer) . . . . .	51
	Verteilte Anwendungen im heterogenen Rechnernetz und auf Parallelrechnern . . . . .	52
	Parallelisierung/Vektorisierung irregulärer iterativer Algorith- men . . . . .	53
	Museumsdokumentation . . . . .	54
	Technische Basis für symbolisches Rechnen im Hochleistungs- bereich . . . . .	55
	Symbolische Modellierung chemischer Reaktionssysteme . . . .	57
	Modellierung und Simulation von Butadien mit Ziegler- Natta-Katalysatoren auf der Basis von Neodyn . . . .	59
	Modellierung und Simulation der Ethylenpolymerisation mit auf Aluminiumpartikeln fixierten Titan-Katalysatoren	60
	Hyperthermie-Planung . . . . .	61
	Numerische Simulation von epidemiologischen AIDS-Modellen	64
	Effiziente numerische Simulation von Verbrennungsprozessen .	66
	Wellenausbreitung in Komponenten der integrierten Optik . .	68
	Effiziente Berechnung der Durchbruchsspannung bei Hochlei- stungsbaulementen . . . . .	70
	Zugangssystem RJE-Tool für die Berliner Supercomputer . . .	71
	Berliner Software-Entwicklungs- und Testumgebung BERSET	72
	Anwendungen der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) . . . . .	73

<b>4</b>	<b>Rechenzentrum</b>	<b>74</b>
4.1	Übersicht . . . . .	74
4.2	Arbeiten im Bereich Rechenzentrum . . . . .	75
4.3	Nutzung der Vektorrechner . . . . .	77
4.3.1	Norddeutscher Vektorrechnerverbund (NVV) . . . . .	77
4.3.2	Berliner Nutzung im NVV . . . . .	78
<b>5</b>	<b>Publikationen</b>	<b>81</b>
5.1	Preprints . . . . .	81
5.2	Technical Reports . . . . .	88
5.3	Beiträge in Zeitschriften . . . . .	91
5.4	Monographien . . . . .	93
5.5	Dissertationen . . . . .	93
5.6	Herausgabe von Zeitschriften . . . . .	95
<b>6</b>	<b>Produkte</b>	<b>96</b>
6.1	Fachinformation und Dokumentation . . . . .	96
6.2	Software-Bibliotheken . . . . .	98
6.3	Verfügbare Produkte . . . . .	100
<b>7</b>	<b>Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern</b>	<b>103</b>
7.1	Vorträge und Gastaufenthalte . . . . .	103
7.2	Vorlesungen und Seminare . . . . .	110
7.3	Tagungen . . . . .	111
<b>8</b>	<b>Gäste am ZIB</b>	<b>112</b>
8.1	Gastvorträge . . . . .	112
8.2	Gastaufenthalte . . . . .	112
8.3	Tagungen und Veranstaltungen im ZIB . . . . .	114
<b>9</b>	<b>Organisatorisches</b>	<b>115</b>
9.1	Organe . . . . .	115
9.2	Wissenschaftlicher Beirat . . . . .	116
9.3	Personalrat . . . . .	116
9.4	Satzung . . . . .	116
9.5	ZIB-Fellows . . . . .	116
9.6	Mitgliedschaften . . . . .	117

9.7	Wirtschaftliche Situation . . . . .	117
9.8	Personelle Entwicklung . . . . .	118

## 1. Vorbemerkung

Das Berichtsjahr 1991 war das *fünfte* Jahr, in dem das Konrad-Zuse-Zentrum mit seiner neuen Zielsetzung tätig war, und zugleich sein bisher erfolgreichstes.

In diesem Jahr ist es gelungen, Prof. Dr. Martin Grötschel als **Vizepräsidenten** zu gewinnen. Im August 1991 hat er zudem noch den renommierten George-Dantzig-Preis erhalten, der gemeinsam von SIAM und der Mathematical Programming Society alle drei Jahre vergeben wird. Mit Prof. Grötschel erweitert das ZIB sein wissenschaftliches Spektrum unter dem gemeinsamen Begriff *Scientific Computing* über den bisherigen Bereich *numerisch-symbolische Mathematik* hinaus in den neuen Bereich *algorithmische diskrete Mathematik*. Dies drückt sich institutionell dadurch aus, daß zu den bisherigen vier Abteilungen *Numerik*, *Numerische Softwareentwicklung*, *Symbolik* und *Software-Information* nun die beiden neuen Abteilungen *Visualisierung/Parallelisierung* und *Kombinatorische Optimierung* hinzugekommen sind. Damit hat das ZIB seine Struktur stabilisiert.

Im engen inneren Zusammenhang mit der Gewinnung des Vizepräsidenten stand auch die Klärung der Frage des **ZIB-Neubaus**. Durch aktiven persönlichen Einsatz des politisch verantwortlichen Senators für Wissenschaft und Forschung, Prof. Dr. Manfred Erhardt, sowie der FU- und TU-Mitglieder des Verwaltungsrates des ZIB hat das Berliner Abgeordnetenhaus die Entscheidung für einen vorzüglich geeigneten Standort auf dem mathematisch-naturwissenschaftlichen Campus der FU in Dahlem gefällt. Die entsprechenden Planungen sind im Jahre 1991 bereits angelaufen. Somit hat das ZIB als Institution endlich auch seine dringend benötigte bauliche Perspektive.

Es bleibt nun der Aktivität und Originalität sämtlicher Mitarbeiter des Hauses überlassen, ob das ZIB weiterhin seinen erfolgreichen Weg auf jetzt gesicherter Basis fortsetzt.

Berlin, im September 1992



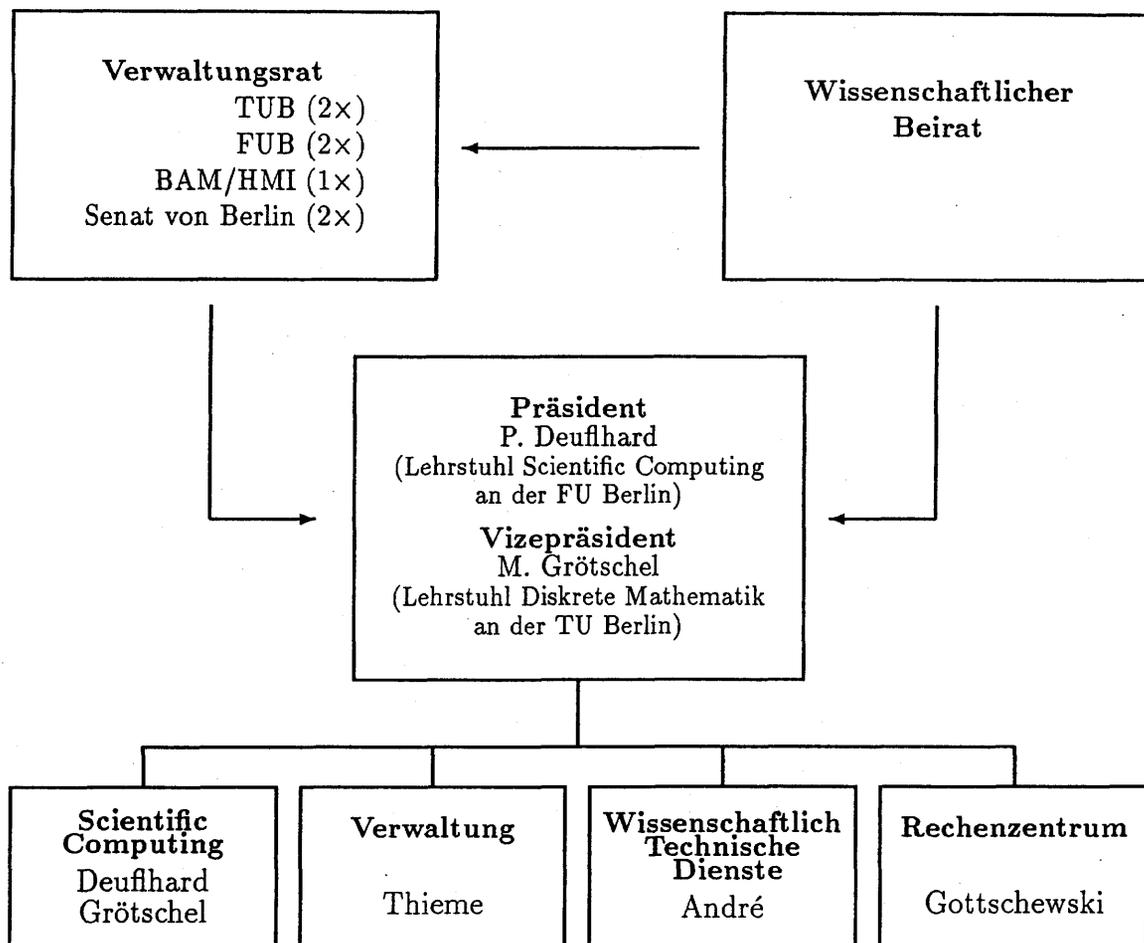
(Prof. Dr. Peter Deuffhard)

Präsident

## 2. Das ZIB – Aufgaben und Ziele

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

### Struktur des ZIB



## **Forschung und Entwicklung: Scientific Computing**

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

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

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

## **Anwendungsbezogene Forschung, Kooperationen**

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

## **Supercomputing als Dienstleistung**

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

## Gliederung des Bereiches Scientific Computing

Die Forschungs- und Entwicklungsarbeit des ZIB wird in den Bereichen *Numerisch-symbolische Methoden* und *Diskrete Methoden* geleistet. Diese beiden Bereiche gliedern sich derzeit in insgesamt sechs Abteilungen:

### Numerisch-symbolische Methoden

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

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

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

### Diskrete Methoden

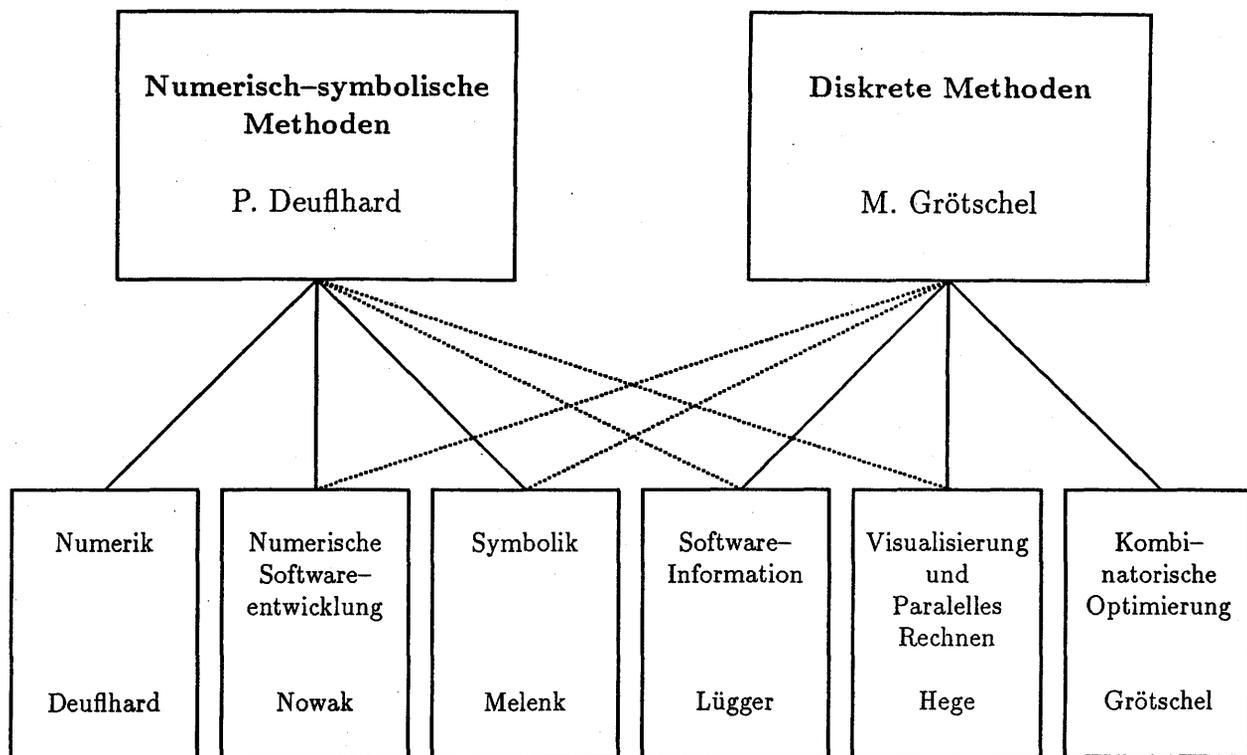
*Abteilung Kombinatorische Optimierung.* Der Schwerpunkt der Forschung und Entwicklung liegt im Bereich *Algorithmische Diskrete Mathematik*. Dabei steht die Untersuchung praxisrelevanter, schwieriger ("NP-schwerer") kombinatorischer Optimierungsprobleme im Vordergrund. Ziel ist die mathematische Analyse 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. Diese Methoden werden ergänzt durch Primal- und Dual-Heuristiken – möglichst mit Gütegarantien – zur approximativen Lösung sehr großer Anwendungsfälle.

*Abteilung Visualisierung und Paralleles Rechnen.* Aufgabe der Gruppe Visualisierung ist die Entwicklung und Implementierung von Darstellungsmethoden und Algorithmen im Bereich der wissenschaftlichen Visualisierung. Ihr obliegt weiterhin die Bereitstellung geeigneter Visualisierungs-Hardware und -Software sowie die Unterstützung hausinterner Anwender bei der Realisierung komplexer Visualisierungsprojekte. Aufgabe der Gruppe Paralleles Rechnen ist die Entwicklung und Implementierung von parallelen Algorithmen aus den Gebieten diskrete und numerische Mathematik sowie wissenschaftliche Visualisierung. Schwerpunkte sind nichtuniforme Probleme, adaptive Methoden und die Parallelisierung von Algorithmen der kombinatori-

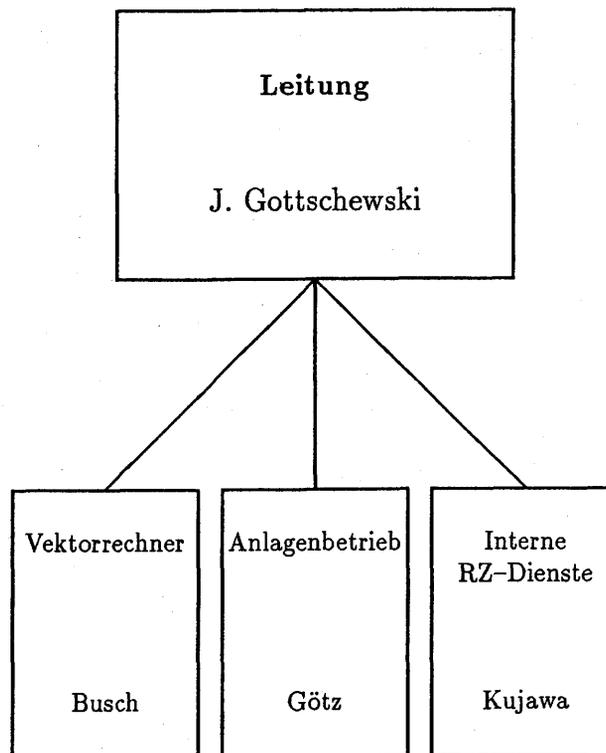
schen Optimierung.

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

## Bereich Scientific Computing



## Bereich Rechenzentrum



### 3. Forschung und Entwicklung

Wie bereits im vorigen Kapitel ausgeführt, beschäftigt sich der Bereich Forschung und Entwicklung schwerpunktmäßig mit Scientific Computing und zwar in den Richtungen numerisch-symbolische Methoden und diskrete Methoden. Leistungen von ZIB-Mitarbeitern innerhalb der Kooperation mit GMD-FOKUS, die von dort wissenschaftlich zu verantworten sind, werden in den entsprechenden Publikationen der GMD mit dargestellt und bleiben deshalb hier unerwähnt. Im folgenden werden einzelne Projekte dargestellt, die im Jahre 1991 bearbeitet wurden, und zwar getrennt nach Grundlagen- und Anwendungsprojekten – mit naturgemäß fließenden Übergängen. Bei einigen Forschungs- und Entwicklungsprojekten ergeben sich zudem Überschneidungen zu Projekten des Bereiches Rechenzentrum (siehe Kapitel 4).

#### 3.1 Zusammenfassung

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

Im seit einigen Jahren bestehenden Bereich **Numerisch-symbolische Methoden** – mit den Abteilungen *Numerik*, *Numerische Software-Entwicklung* und *Symbolik* – wurde im wesentlichen kontinuierlich an den bisherigen Aufgaben weitergearbeitet. Im übergeordneten Großprojekt "Adaptive Multilevel-Finite-Elemente-Methoden für partielle Differentialgleichungen" konnte endlich der für die Praxis entscheidende Schritt in *drei Raumdimensionen* getan werden. Darüber hinaus wurden – über das elliptische und parabolische Grundproblem hinausgehend – erweiterte Problemklassen (Hindernisprobleme, Schrödingergleichung, Reaktions-Diffusionsgleichungen) zum erstenmal mit dem Kaskadenprinzip erfolgreich angegangen. In diesen Kontext passen auch die Entwicklung leistungsfähiger Algorithmen (s. Programm GIANT) für diskretisierte nichtlineare partielle Differentialgleichungen sowie Anfänge der Entwicklung einer adaptiven Newton-Multilevel-Finite-Elemente-Methode. Das zweite erfolgreiche Großprojekt "Adaptive diskrete Galerkin-Methoden für makromolekulare Prozesse" führte zu speed-up-Faktoren von  $10^3$  bis  $10^4$  in relevanten Problemstellungen der Technischen Chemie. Darüber hinaus hat sich im Jahre 1991 eine Arbeitsgruppe "Numerik dynamischer Systeme" gebildet, deren Anfänge bereits äußerst vielversprechend waren (darüber wird 1992 mehr zu berichten sein). Last, but not least, wurden innerhalb der Formelmanipulationssprache REDUCE wichtige erste Erweiterungen über die Behandlung von polynomialen Strukturen hinaus in polynom-ähnliche Problemklassen geschafft. Die Verbindung von numerischen und symbolischen Methoden innerhalb eines Programmpa-

kets (z.B. Verzweigungsprobleme, Kalkülsysteme) bleibt weiterhin ein wichtiger Arbeitsschwerpunkt. Die gewonnenen Resultate flossen ein in zahlreiche **Anwendungsprojekte**, etwa aus der Medizin (Hyperthermie), der Integrierten Optik (Wellenausbreitung in Glasfasern), der Halbleitertechnologie, der Organischen und Technischen Chemie, der Mehrkörperdynamik (Robotik) oder der Prognose von AIDS-Ausbreitung in Ballungsgebieten. Erfreulicherweise führten einige Kooperationen zur spürbaren Ausweitung der Drittmittelförderung (siehe Einzelprojekte) und zur Anbahnung industrieller Kooperationen.

Der Bereich **Diskrete Methoden** ist im Herbst 1991 durch die Amtsübernahme des Vizepräsidenten entstanden. Er gliedert sich in die Abteilungen *Software-Information*, *Visualisierung* und *Paralleles Rechnen* und *Kombinatorische Optimierung*. Die Abteilung *Software-Information* wurde unverändert übernommen. Im Vordergrund steht dabei die Weiterentwicklung und Pflege der elektronischen Softwarebibliothek eLib für mathematische Algorithmen. Im Jahre 1991 wurde mit der Vorphase eines BMFT-finanzierten Projektes der Deutschen Mathematiker-Vereinigung begonnen, in dem die Abteilung Software-Information die fachliche Leitung übernommen hat (vgl. Kap. 6). Die Abteilung *Visualisierung und Paralleles Rechnen* hat im Berichtszeitraum ihre Arbeit neu aufgenommen. Sie entwickelt Graphik- und Visualisierungswerkzeuge und hat mit der Untersuchung von Entwurfs- und Spezifikationsmethoden sowie von Rechnerarchitekturen im Hinblick auf ihre Eignung für die Parallelisierung von kombinatorischen und numerischen Algorithmen begonnen. Die Abteilung *Kombinatorische Optimierung* ist durch Wechsel der gesamten Augsburger Arbeitsgruppe von Prof. Grötschel an das ZIB neu entstanden. Im Rahmen der Grundlagenforschung wurden insbesondere Projekte in der polyedrischen Kombinatorik verfolgt. Dabei stand die Untersuchung der Facettialstruktur von Polyedern im Vordergrund, die in der kombinatorischen Optimierung auftreten und die algorithmische Umsetzung dieser Ergebnisse in leistungsfähige Branch-and-Cut-Codes. Ebenso wurden Methoden zur Lösung quadratischer 0/1-Programme weiterentwickelt. Die anwendungsspezifische Arbeit konzentrierte sich auf Themen im Bereich der Telekommunikation, des VLSI-Design, der Verkehrs- und Produktionsplanung. Durch die Weiterführung einiger **Anwendungsprojekte** sind mehrere Drittmittel-finanzierte Projektstellen in das ZIB eingebracht worden. Die Abteilung ist am DFG-Schwerpunkt "Anwendungsorientierte Optimierung und Steuerung" beteiligt und hat 1991 Forschungsprojekte mit Siemens, Siemens-Nixdorf, BASF, Bell Communication Research, dem FAU in Ulm und den Verkehrsbetrieben Passau durchgeführt. Auf europäischer Ebene ist die Abteilung an dem Twinning Project "Polyhedral Combinatorics" mit fünf weiteren Forschungsreinrichtungen in Europa beteiligt.

## 3.2 Grundlagenprojekte

### Software-Implementierung adaptiver Multilevel FE-Methoden

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

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die Pflege und Weiterentwicklungsarbeiten am adaptiven Finite-Elemente-Code KASKADE wurden fortgesetzt. Ziel war die Erweiterbarkeit für 3-D-Probleme und auf Systeme von Gleichungen sicherzustellen. Dazu wurde die Modularisierung – insbesondere die Trennung der geometrischen Information (Triangulierung, adaptive Verfeinerung von Dreiecken) von der rechnerischen Information (Knoten, Elemente) – weiter durchgeführt. Die ersten 3-D-Resultate liegen vor. Vergleiche das entsprechende Projekt für mathematische Grundlagen.

Die tiefgreifendsten Änderungen ergaben sich im Bereich der Arbeitsspeicherverwaltung, in der jetzt flexible Module zum Zugriff auf Daten an den geometrischen Objekten systematisch verwendet werden. Entwickler von KASKADE-Programmen erhalten damit zusätzliche Testhilfen und profitieren von der erhöhten Modularität.

Das elliptische FEM-Programm ELLKASK wurde um die direkten Löser im Envelope- und Sparse-Modus zusammen mit den dazugehörigen Reverse Cuthill-McKee und nested dissection Umnummerierungsalgorithmen ergänzt.

### Literatur

- [1] P. Deuffhard, P. Leinen, H. Yserentant: *Concepts of an Adaptive Hierarchical Finite Element Code*. IMPACT 1, p. 3-35 (1989)
- [2] B. Erdmann, R. Roitzsch, F. Bornemann: *KASKADE – Numerical Experiments*, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (ZIB), TR 91-1 (1991).

## **Adaptive Multilevel-Finite-Elemente-Methoden in drei Raumdimensionen**

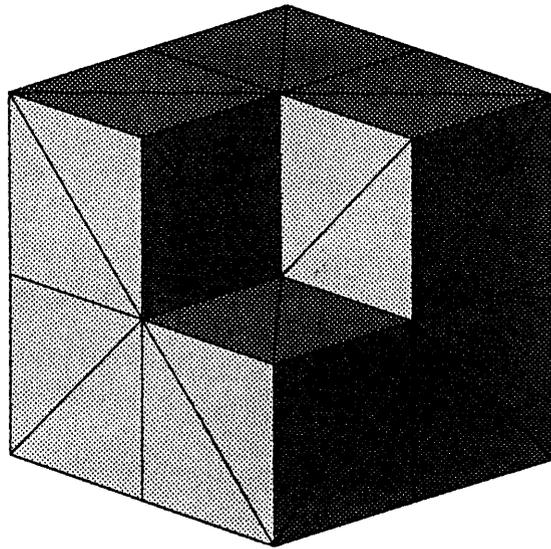
**Bearbeiter:** F. Bornemann, P. Deuffhard, B. Erdmann, R. Kornhuber, R. Roitzsch, M. Seebaß

**Kooperation:** G. Wittum, J. Bey (Institut für Angewandte Mathematik, Universität Heidelberg) H. Yserentant, P. Leinen (Mathematische Fakultät, Universität Tübingen)

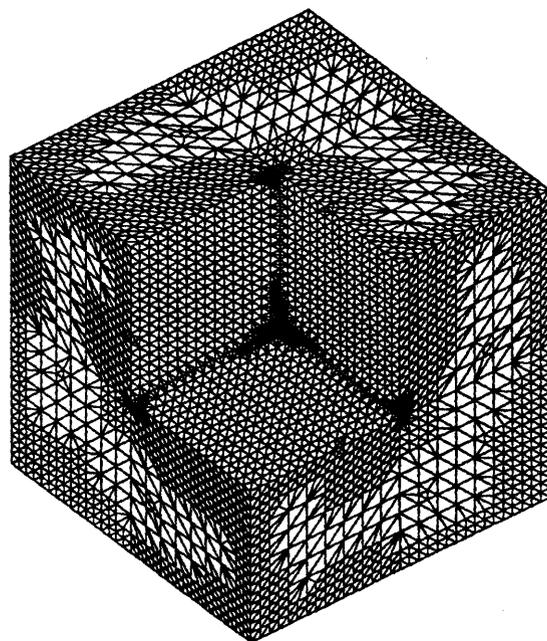
Der Ausbau des vorhandenen Programmsystems KASKADE von zwei auf drei Raumdimensionen wurde im aktuellen Berichtsjahr durch die Erweiterung der Datenstrukturen zur Verwaltung von Tetraedernetzen sowie die Implementation geeigneter lokaler Verfeinerungen neu in Angriff genommen. Reguläre ("rote") Verfeinerung und irreguläre ("grüne") Abschließung wurden durch entsprechende Verallgemeinerungen ersetzt. Im Gegensatz zum 2-D-Fall ist die rote Verfeinerung in drei Raumdimensionen nicht eindeutig bestimmt und nur bei geeigneter Durchführung hinsichtlich der entstehenden Innenwinkel stabil. Die grüne Abschließung zerfällt in mehrere Varianten. Das in zwei Raumdimensionen bewährte adaptive Kaskadenkonzept ließ sich ohne wesentliche Änderung übernehmen und theoretisch absichern. Ähnlich wie der kantenorientierte Fehlerschätzer nach DEUFLHARD/LEINEN/YSERENTANT (1989) ermöglicht auch der sogenannte BPX-Vorkonditionierer eine kantenorientierte Implementierung [1], die sich mit geringen Modifikationen auf den 3-D Fall übernehmen ließ. Die Bewertung der lokalen Fehlerindikatoren erfolgt weiterhin gemäß der von BABUŠKA/RHEINBOLDT vorgeschlagenen Extrapolationsstrategie. Erste numerische Tests an Modellproblemen (s. Figur) bestätigten die theoretisch bekannte Quasioptimalität des Vorkonditionierers. Detaillierte Ergebnisse werden im kommenden Berichtsjahr publiziert.

### **Literatur**

- [1] F. Bornemann: *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations in Two Space Dimensions*. Dissertation FU Berlin, Technical Report TR 91-7, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (1991)



Oberfläche der Starttetraedierung



Oberfläche des adaptiven Tetraedergitters nach 6 Verfeinerungen

## Adaptive FE-Verfahren zur Lösung freier Randwertprobleme

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

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Das Projekt ist die Fortsetzung eines gleichnamigen Vorhabens aus dem Berichtsjahr 1990.

Ausgehend von einem in dem Projekt zur Berechnung der Durchbruchspannung bei Hochleistungsbauelementen beschriebenen Anwendungsbeispiel, welches jedoch die praktische Bedeutung der Problemklasse bei weitem nicht erschöpft, wurden zunächst Hindernisprobleme für den Laplace Operator betrachtet. Mathematisch läßt sich das Problem als quadratische Optimierungsaufgabe auf einem Intervall im Funktionenraum oder auch als Laplace-Problem mit stückweise konstanter Lösungs-Abhängigkeit der rechten Seite interpretieren. Das Problem ist damit zwar grundsätzlich nichtlinear, die Nichtlinearität macht sich jedoch nur am Phasenübergang, dem sogenannten "freien Rand" bemerkbar. Der freie Rand repräsentiert dabei gerade den Sprung in der rechten Seite und muß im Gegensatz zum linearen Laplace-Problem mitberechnet werden.

Ähnlich dem Newton-Verfahren im differenzierbaren Fall lassen sich Hindernisprobleme auf die Lösung einer Reihe linearer Probleme reduzieren. Dementsprechend war die schnelle Lösung dieser Sub-Probleme mittels vorkonditionierter cg-Verfahren Gegenstand erster Untersuchungen.

Dabei besteht die Hauptschwierigkeit darin, daß das Rechengebiet durch den freien Rand begrenzt, also nicht a priori bekannt ist. Im allgemeinen ist daher der Träger der beim Vorkonditionieren verwendeten Grobgitterfunktionen nicht im jeweiligen Rechengebiet enthalten, so daß im Bereich des freien Randes eine Modifikation, ein Abschneiden der Grobgitterfunktionen notwendig wird. Diese Grundidee wurde zu Beginn des Jahres vorgestellt [1]. In einer weiteren Arbeit wurden dann eine symmetrische und eine unsymmetrische Variante entwickelt und theoretisch analysiert. Es ergeben sich die erwarteten Abschätzungen für die Konditionszahlen, bei nichtsymmetrischem Abschneiden jedoch nur unter geeigneten Regularitätsbedingungen. Auch beim praktischen Vergleich anhand eines Modellproblems (ebene Torsion eines zylindrischen Stabs bei hoher Torsionszahl) schnitt die symmetrische Variante besser ab.

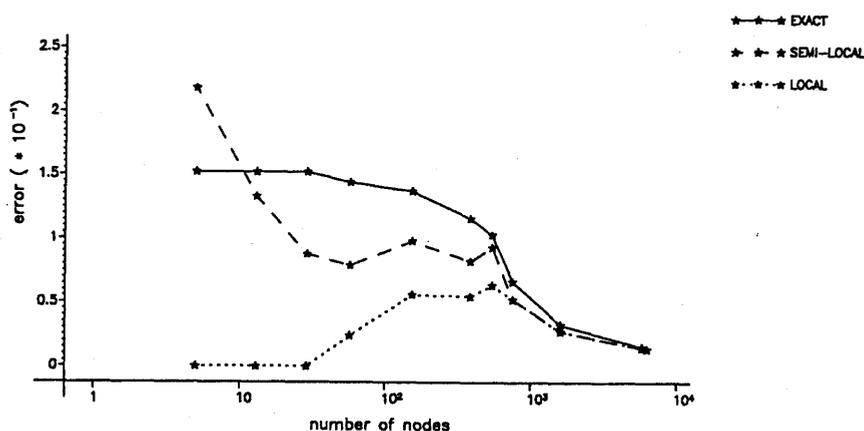
In Analogie zum Vorgehen im linearen Fall wurde ein lokaler Fehlerschätzer für Hindernisprobleme entwickelt, der aus einer vereinfachten Lösung des Defektproblems resultiert. Die Vereinfachung besteht aus einer Diagonalisie-

rung der Steifigkeitsmatrix bezüglich der Darstellung in hierarchischen Basen und der Entkopplung der Frequenzen am freien Rand durch einen Blockiterationsschritt. Der erste Vereinfachungsschritt konnte unter sehr allgemeinen Bedingungen theoretisch bestätigt werden. Man erhält damit sehr robuste, jedoch auch aufwendige semi-lokale Fehlerschätzer [2].

Der zweite Vereinfachungsschritt zum lokalen Fehlerschätzer läßt sich theoretisch nur unter Regularitätsvoraussetzungen und hinreichend feiner Ausgangstriangulierung rechtfertigen. Während diese Bedingungen bisher keine Einschränkung darstellten, verhalten sich semi-lokale und lokale Fehlerschätzungen im hier behandelten Torsionsproblem durchaus unterschiedlich (siehe Bild). Die oben genannten Resultate sind weitgehend dimensionsunabhängig. In Verbindung mit entsprechenden Resultaten zur adaptiven Lösung elliptischer Randwertprobleme in drei Raumdimensionen (siehe entsprechendes Grundlagen- und Anwendungsprojekt) kann damit in Zukunft auch die effiziente Lösung von 3-D-Hindernisproblemen in Angriff genommen werden.

## Literatur

- [1] R.H.W. Hoppe, R. Kornhuber: Multilevel Preconditioned cg-Iterations for Variational Inequalities. In: Preliminary Proceedings of the 5th Copper Mountain Conference on Multigrid Methods, S. McCormick et al. (eds. ), Copper Mountain Colorado (1991)
- [2] R.H.W. Hoppe, R. Kornhuber: Adaptive Multilevel Methods for Obstacle Problems. Preprint SC 91-16, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (1991)



Vergleich der Fehlerschätzer

## Unvollständige LU-Zerlegung auf lokal strukturierten Netzen

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

**Kooperation:** G. Wittum (Institut für Wissenschaftliches Rechnen, Universität Heidelberg)

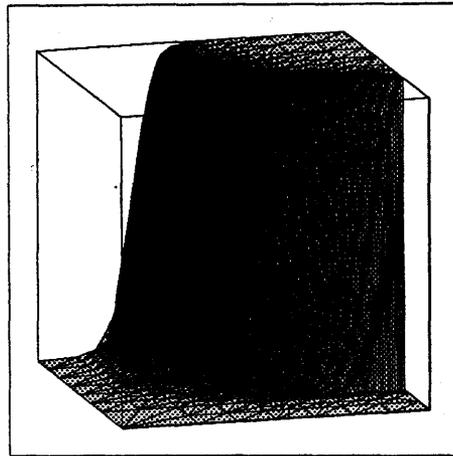
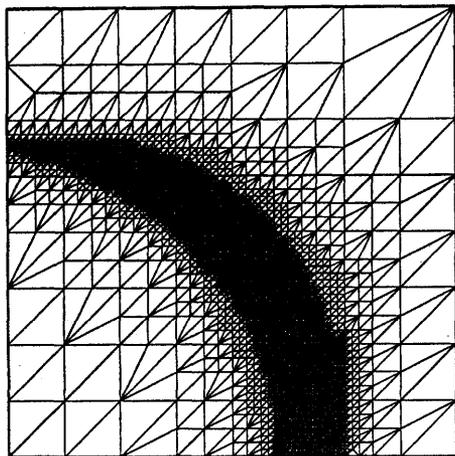
**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Das Projekt ist die Fortsetzung eines gleichnamigen Vorhabens aus dem Berichtsjahr 1990.

Dort war insbesondere die Frage nach einer geeigneten Diskretisierung der Konvektions-Diffusionsgleichung offen geblieben. Aus der im Jahresbericht 1990 dargestellten Grundkonzeption des Verfahrens resultiert, daß die gewünschte Diskretisierung im Falle reiner Konvektion in Gitterrichtung auf eine völlige Entkopplung der auf verschiedenen Stromlinien liegenden Variablen führen soll. Da die üblichen Petrov-Galerkin Verfahren dieser Anforderung nicht genügen, wurde eine Box-Methode entwickelt, die sich im rein konvektiven Fall als Erweiterung rückwärts genommener Differenzen auf unstrukturierte Gitter interpretieren läßt. Im konvektionsfreien Fall unterscheidet sich die Methode nur durch die Behandlung der rechten Seite von dem üblichen Ritz-Galerkin Verfahren.

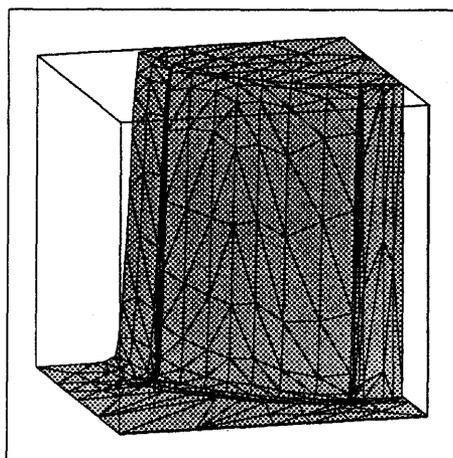
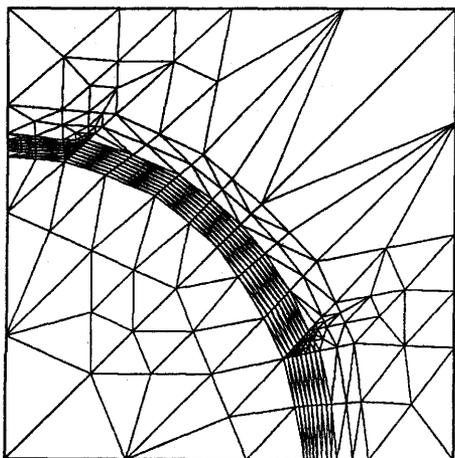
Die Diskretisierung wurde implementiert und ersten numerischen Tests unterzogen, welche die theoretisch erwarteten Ergebnisse bestätigten (Figuren 1 und 2). Eine entsprechende Publikation wird zu Beginn des nächsten Berichtsjahres erscheinen.

### Literatur

- [1] R. Kornhuber, G. Wittum: *Discretization and Iterative Solution of Convection-Diffusion Equations*. Erscheint 1992



Standard Triangulierung  $\tilde{T}_9$  (3106 Knoten) und Näherung  $\tilde{U}_9$



Orientierte, anisotrope Triangulierung  $T_9$  (243 Knoten) und Näherung  $U_9$

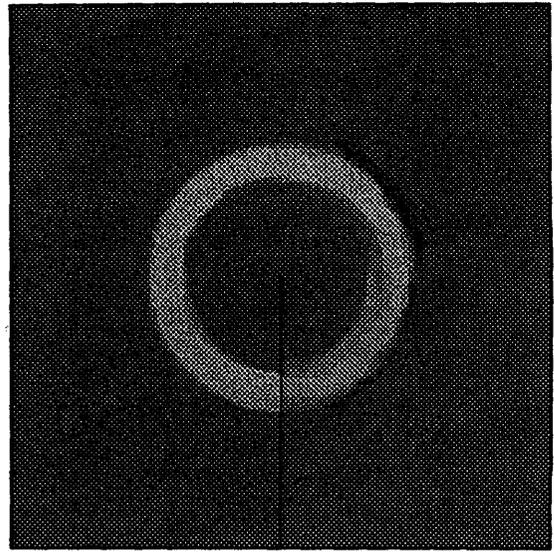
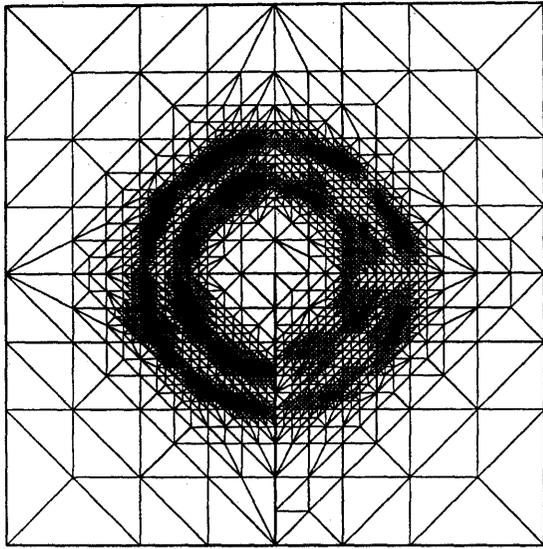
## Entwicklung adaptiver Multilevelverfahren zur Berechnung der Transportgleichung

Bearbeiter: J. Lang, A. Walter

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Zur Berechnung des reinen Transportvorgangs, der durch das nichtlineare System der Eulergleichungen der Gasdynamik beschrieben wird, wurde ein adaptives Finite-Elemente-Verfahren zusammen mit einem neuartigen Fehlerschätzer entwickelt und im Preprint SC 91-7 dokumentiert. Da die Lösung der Eulergleichungen im allgemeinen keine Regularität besitzt, wurden Ansatzfunktionen gewählt, die über die Elementgrenzen hinweg unstetig sind, also ein lokaler Zugang. Aus Effizienzgründen ist eine Adaption des Gitters an den unstetigen Lösungsverlauf unerlässlich. Der neu entwickelte Fehlerschätzer zur Adaption der Gitter benutzt lokal orthogonale Basisfunktionen. Numerische Vergleiche mit anderen Fehlerindikatoren haben im Fall einer unstetigen Lösung eine wesentlich bessere Gittersteuerung gezeigt. Das Verfahren ist "explizit", d.h. es werden keine großen linearen Gleichungssysteme assembliert. Die Lösungsberechnung erfolgt entlang der Stromlinien vom Einfluß- zum Ausflußrand. Figur A zeigt ein typisches Netz mit der dazugehörigen Lösung für den Massetransport entlang einer Kreislinie. Dieses sogenannte Doughnut-Problem gilt als schwierig und bisher unbefriedigend gelöst (z.B. Hughes et. al.). Weiterhin konnte eine Entsprechung dieses Zugangs zu einigen bekannten Finite-Volumen Verfahren gezeigt werden. Das erlaubt sowohl die theoretische Grundlage der Finiten-Elemente-Methoden zu übernehmen als auch die bewährten Finite-Volumen-Verfahren auf irregulären Gittern zu formulieren.

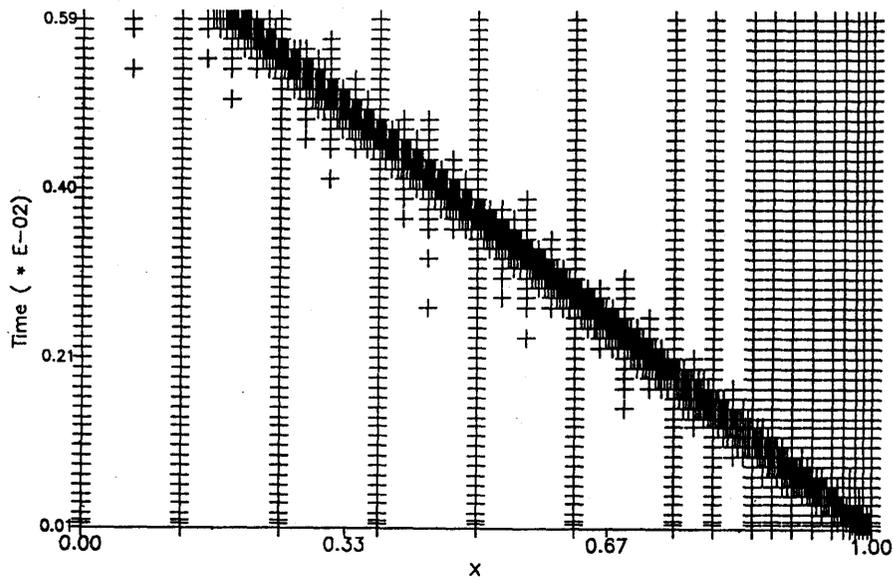
### Literatur

- [1] J. Lang, A. Walter: *An Adaptive Discontinuous Finite Element Method for the Transport Equation*. Preprint SC 91-7, ZIB (1991)



Figur A Netz und Lösung eines Massetransports

*Dwyer - Sanders Flame*



Figur B Netzentwicklung einer bewegten Flammenfront

## Entwicklung adaptiver Multilevelverfahren zur Berechnung von Reaktions-Diffusionsgleichungen

**Bearbeiter:** J. Lang, A. Walter (gefördert durch das BMFT innerhalb der Arbeitsgemeinschaft TECFLAM)

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Auf der Basis des im Vorjahresbericht erwähnten Grundlagenprojekts "Adaptive Multilevel-Diskretisierung zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen" wurde ein Finite-Elemente-Verfahren für die Lösung nichtlinearer Systeme von Reaktions-Diffusionsgleichungen entwickelt. Es ist eine Erweiterung des Programms KASTIO1, das von F.A. Bornemann [1] für stationäre, lineare, selbstadjungierte Probleme entwickelt wurde. Der Zugang ist sowohl im Raum als auch in der Zeit adaptiv. Wie in der klassischen Rothe-Methode wird das System zunächst in der Zeit mittels semilinearer Runge-Kutta-Verfahren diskretisiert. Es handelt sich um eingebettete Verfahren, die somit eine effiziente Zeitschrittsteuerung erlauben. Damit wird die Zeitintegration automatisch dem Verhalten der Lösung angepasst. Die Ortsdiskretisierung geschieht auf der Basis des hauseigenen FE-Programmpakets KASKADE [2]. Die Lösung der nichtelliptischen Sub-Probleme erfolgt derzeit mit einem Multilevel-vorkonditionierten Block-SSOR. Gerade im Hinblick auf Anwendungen in zwei Raumdimensionen werden hier die im Vorjahreszeitraum entwickelten iterativen Löser für große nichtsymmetrische Gleichungssysteme Anwendung finden. Figur B zeigt eine typische zeitliche Netzentwicklung für eine Reaktions-Diffusionssimulation, die durch eine Flammenfrontbewegung gekennzeichnet ist. Eine Dokumentation steht kurz vor dem Abschluß und erfolgt im nächsten Berichtszeitraum [3].

### Literatur

- [1] F.A. Bornemann: *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations I*, General Theory and 1-D-Implementation. *IMPACT Comput. Sci. Eng.* **2**, pp. 279-317 (1990)
- [2] R. Roitzsch: *KASKADE User's Manual*. Technical Report TR 89-4, ZIB (1989)
- [3] J. Lang, A. Walter: *A Finite Element Method Adaptive in Space and Time for Nonlinear Reaction Diffusion Systems*. Preprint, Preliminary Version

## Adaptive Newton-Methoden für nichtlineare partielle Differentialgleichungen

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

**Kooperation:** F. Potra (Iowa State University)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Berichtszeitraum wurde die Erweiterung affin-invarianter Newton-Methoden auf die Lösung diskretisierter partieller Differentialgleichungen studiert. Falls zuerst auf festem Gitter diskretisiert wird (der bisher übliche Ingenieurszugang), so entstehen nichtlineare Gleichungssysteme sehr hoher, aber fester Dimension. Sie lassen sich mit dem am ZIB entwickelten Programmpaket GIANT (mnemotechnisch für: Global Inexact Affine invariant Newton Techniques) lösen, welches auf einer inexakten Newton-Methode aufbaut (siehe [1], [2]). Die mathematisch wünschenswerte Alternative sind jedoch adaptive Newton-Multilevel-Methoden als Newton-Methoden im Funktionenraum mit adaptiver Projektion (variabler Dimension). Dieser Zugang wurde aufbauend auf [1] und der Theorie über asymptotische Gitterunabhängigkeit (nach DEUFFHARD/POTRA 1990) zunächst theoretisch untersucht und in einer vorläufigen Implementierung innerhalb des FE-Programmes KASKADE getestet. Die Resultate sind äußerst befriedigend. Eine effektive Implementierung ist noch in Arbeit. Nebenbei sei bemerkt, daß sich die im Fall des Newton-Verfahrens verwendeten analytischen Methoden auch auf nichtlineare Ausgleichsprobleme übertragen lassen (siehe [3]).

### Literatur

- [1] P. Deuffhard: *Global Inexact Newton Methods for Very Large Scale Nonlinear Problems*. IMPACT Comput. Sci. Eng. **3**, No. 4, p. 366-393 (1991)
- [2] U. Nowak, L. Weimann: *GIANT - A Software Package for the Numerical Solution of Very Large Systems of Highly Nonlinear Equations*. ZIB TR 90-11 (1990), erschienen 1991.
- [3] P. Deuffhard, F. Potra: *A Refined Gauss-Newton-Mysovskii Theorem*. ZIB Preprint SC 91-4 (1991)

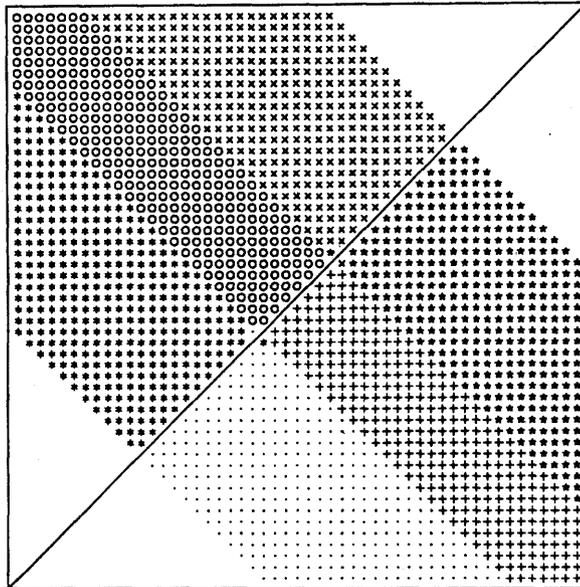
## Affin-invariante Newton- und Gauss-Newton-Codes für hochnichtlineare Systeme

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

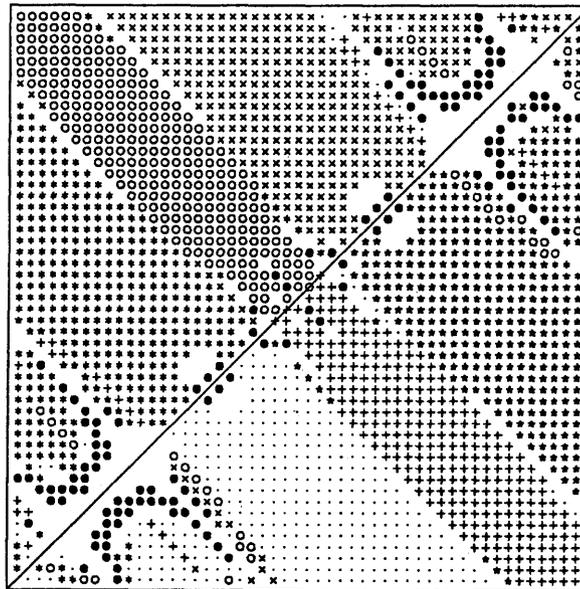
**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die Überarbeitung und Verbesserung der auf globalen, affin-invarianten Newton- und Gauss-Newton-Techniken [1] basierenden Codes wurde kontinuierlich fortgesetzt. Insbesondere wurde eine algorithmisch und softwaretechnisch verbesserte Version des Codes NLSCON (zur Lösung von nichtlinearen Ausgleichsproblemen mit Gleichungsnebenbedingungen) entwickelt und implementiert. Breiten Raum nahmen auch umfangreiche Test- und Vergleichsrechnungen der Newton-Software ein. Die Codes NLEQ1, NLEQ2, NLEQ1S [2] zeigen dabei einen hohen Grad an Robustheit und Effizienz über eine weite Klasse von nichttrivialen Problemen. Die Vorteile, aber auch Grenzen, der zugrundeliegenden mathematischen Theorie werden von den Codes deutlich widerspiegelt. Dies ist in der ersten Abbildung beispielhaft illustriert. Für ein einfaches Testproblem in 2 Unbekannten existieren 6 verschiedene Lösungen, deren analytisch bekannte Einzugsgebiete durch Linien mit singulärer Jacobimatrix getrennt sind. "Diskretisiert" man die  $(x, y)$ -Ebene durch ein äquidistantes Gitter, startet mit diesen Werten den Code NLEQ1 und markiert dann diejenigen Startpunkte mit dem gleichen Symbol, die vom Verfahren zum gleichen Lösungspunkt iteriert werden, so ergeben sich dadurch die entsprechenden Einzugsgebiete. In der zweiten Abbildung sind die Resultate dieses Experiments mit dem weitverbreiteten Code HYBRJ1 (nach Moré et al., 1980), der auf einer dog-leg-Methode beruht, dargestellt. Es zeigt sich, daß die Problemstruktur deutlich verschmiert wird. Für besonders kritische Startwerte wird das Problem häufig nicht gelöst (keine Markierung) oder es wird sogar vom Code eine Problemlösung angezeigt, obwohl sie nicht gefunden ist (Symbol ●). Zwar konvergiert HYBRJ1 insgesamt etwas häufiger, aber in praktischen Anwendungen ist die Eigenschaft, von einem sinnvoll vorgegebenen Startwert die "zugehörige" physikalische Lösung zu finden, oft von großer Wichtigkeit.

### Literatur

- [1] P. Deuffhard: *Newton Techniques for Highly Nonlinear Problems - Theory and Algorithms*, Kap. 1.2. (Fassung 1991)
- [2] U. Nowak, L. Weimann: *A Family of Newton Codes for Systems of Highly Nonlinear Equations* Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (ZIB), TR 91-10 Technical Report (1991)



Einzugsgebiete des ZIB-Codes NLEQ1

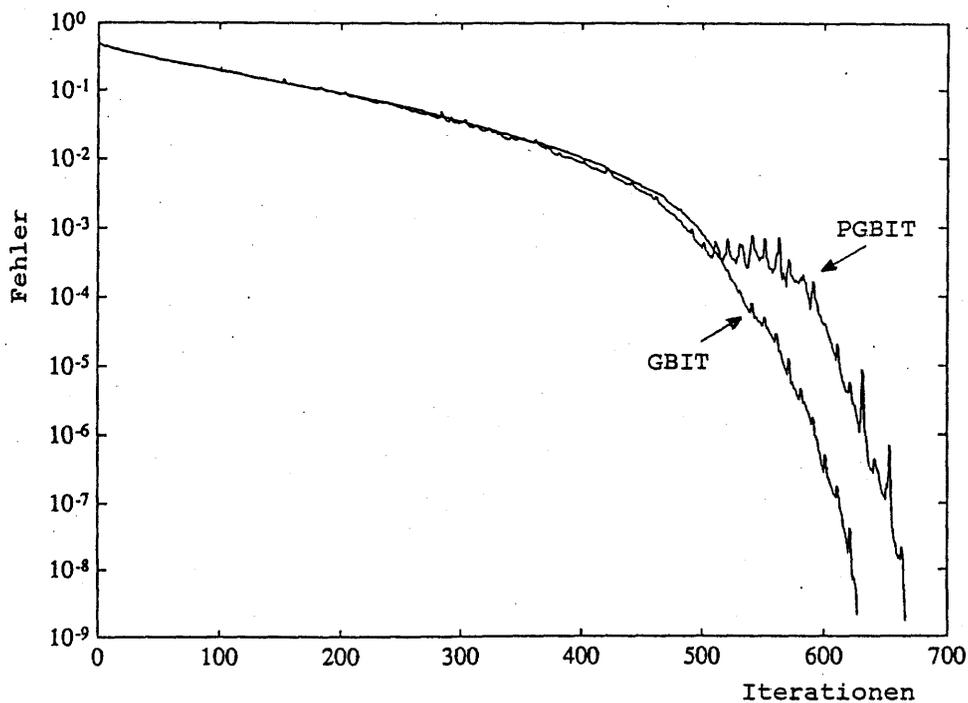


Einzugsgebiete des Argonne-Codes HYBRJ1 (nach Moré et al.)

## Iterative Lösung sehr großer unsymmetrischer linearer Gleichungssysteme

Bearbeiter: P. Deuffhard, B. Erdmann, L. Weimann

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Berichtszeitraum wurden Verbesserungen der schnellen Sekantenmethoden (nach DEUFLHARD/FREUND/WALTER (1990), Programm GBIT) untersucht, i.w. in Richtung auf eine projizierte Broyden-Update-Technik (nach GAY/SCHNABEL, 1978). Eine kompakte, nur auf  $k_{\max}$  Zusatzvektoren basierende Version wurde implementiert (Programm PGBIT). Im Vergleich zum Verfahren GBIT ist die Anzahl der Vektoroperationen pro Iteration für  $k_{\max} > 2$  geringer, allerdings ist das neue Verfahren in der vorliegenden Form noch numerisch instabil (siehe Abbildung). Eine Stabilisierung wird z.Zt. im Rahmen einer Diplomarbeit untersucht.



Beispiel instabilen Verhaltens der Methode PGBIT, Dimension  $n = 4680$   
(Präkonditionierung durch Diagonale)

## Numerik dynamischer Systeme

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

Kooperationspartner: B. Fiedler (Mathematisches Institut A, Universität Stuttgart)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Ziel dieses Projektes ist das Studium parameterabhängiger Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen mit numerischen Methoden. Zunächst von Interesse sind dabei stationäre Lösungen dieser Systeme, worunter wir sowohl Gleichgewichtszustände als auch periodische Lösungen verstehen. Den methodischen Ausgangspunkt für die numerische Behandlung bilden die *Fortsetzungsverfahren*, mit denen das Lösungsverhalten in Abhängigkeit der Parameter effektiv numerisch studiert werden kann. Neben der im Grundlagenprojekt "Ausnutzung von Symmetrien" beschriebenen Arbeit konzentrieren wir uns auf drei Teilprobleme.

1. Fortsetzungsmethoden für periodische Lösungen autonomer Differentialgleichungssysteme
2. Fortsetzungsmethoden für stationäre Lösungen großer Systeme
3. Untersuchung von Mehrparametersystemen

In den ersten beiden Teilprojekten wurden im Herbst bzw. Sommer 1991 Diplomarbeiten von Frau C. Wulff und Herrn C. Klein-Robbenhaar begonnen. Es liegen bereits erste vielversprechende Resultate vor, die einen Abschluß im Jahr 1992 erwarten lassen. Im dritten Teilprojekt gelang die Übertragung der tangentialen Fortsetzung auf Systeme, die von zwei Parametern abhängen. Dazu wurde ein Prädiktor-Korrektor-Verfahren entwickelt, das Gauß-Newton-Methoden mit aus der Computergraphik bekannten Interpolationflächen kombiniert. Die durch die Gleichgewichtslösungen eines Zweiparametersystems definierte Fläche wird auf diese Weise adaptiv trianguliert. Erste Ergebnisse zu dieser neuen Methode wurden in dem Preprint SC 91-20 dokumentiert.

### Literatur

- [1] A. Hohmann: *An Adaptive Continuation Method for Implicitly Defined Surfaces*. Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Preprint SC 91-20 (1991)
- [2] P. Deuffhard: *Newton Techniques for Highly Nonlinear Problems — Theory and Algorithms* (Fassung 1991), Kapitel 4.2.5, *Computation of Periodic Orbits*

## Gemischt symbolisch–numerische Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme mit Symmetrie

**Bearbeiter:** K. Gatermann, A. Hohmann

**Kooperationspartner:** B. Werner (Institut für Angewandte Mathematik, Universität Hamburg), B. Fiedler (Mathematisches Institut A, Universität Stuttgart)

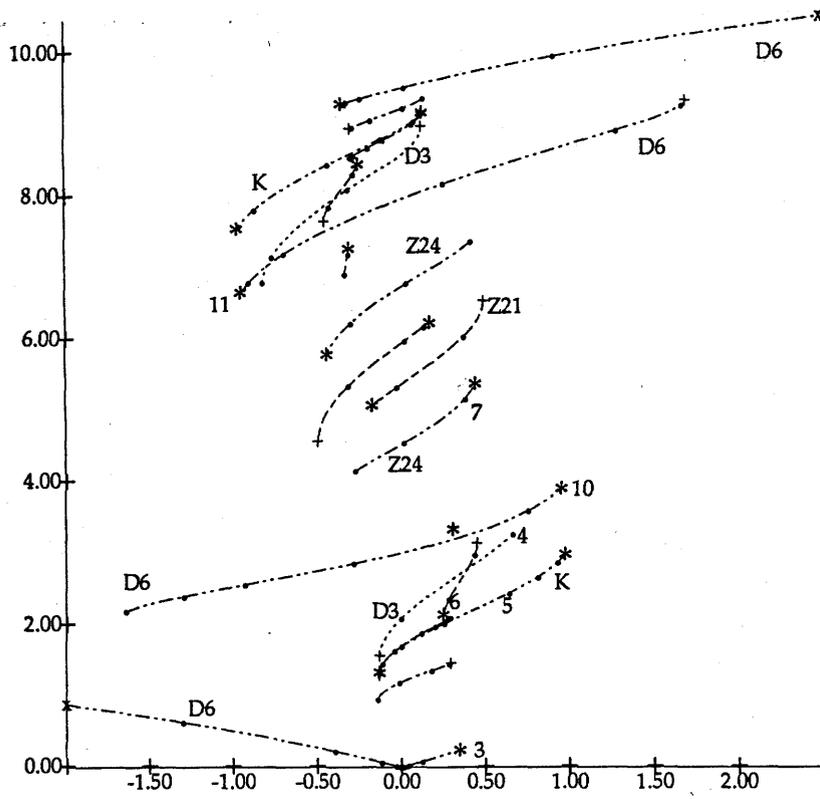
### Beschreibung der Forschungsarbeit:

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

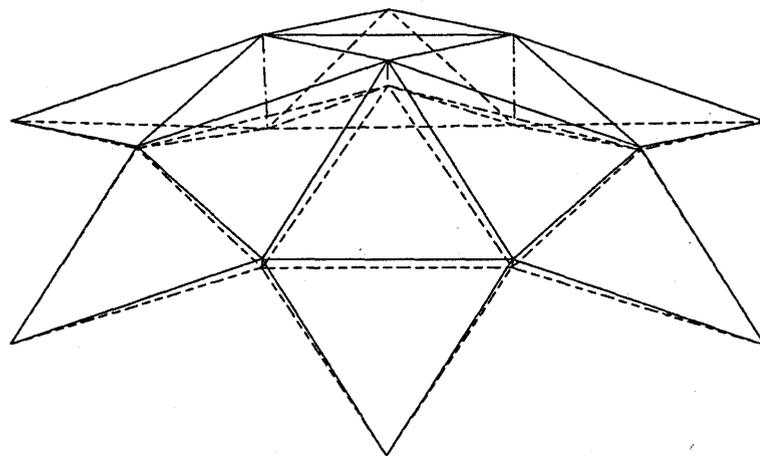
**Lösungsansatz:** Die gegebenen Probleme mit unterschiedlicher Symmetrie werden mit einem REDUCE-Program analysiert und für die numerische Behandlung aufgearbeitet, indem C-Code erzeugt wird. Sowohl im problemunabhängigen Teil als auch im problemabhängigen Teil wird von linearer Darstellungstheorie und Gruppentheorie intensiv Gebrauch gemacht. Die numerische Pfadverfolgung von Zweigen regulärer Lösungen und die Berechnung von Verzweigungspunkten mittels erweiterter Systeme wird durch die Ausnutzung der Konjugation auf die Berechnung wesentlich weniger Punkte beschränkt. Abbildung 1 zeigt eine Übersicht der stabilen Lösungen eines parameterabhängig belasteten Stabwerkes mit  $D_6$ -Symmetrie. Eine spezielle Lösung davon zeigt die zweite Abbildung.

### Literatur

- [1] K. Gatermann, A. Hohmann: *Symbolic Exploitation of Symmetry in Numerical Pathfollowing*. IMPACT Comp. Sci. Eng. **3**, pp. 330–365 (1991)
- [2] K. Gatermann, A. Hohmann: *Hexagonal Lattice Dome - Illustration of a Nontrivial Bifurcation Problem*. Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Preprint SC 91–8, 1991.
- [3] K. Gatermann: *Mixed symbolic-numeric Solution of Symmetrical Non-linear Systems*. In St. Watt (Ed.), Proceedings of ISSAC–91 (Bonn, Germany, July 15–17, 1991), pp. 431–432, ACM, New York (1991).



Stabile Lösungen des hexagonalen Stabwerkes ( $\|\cdot\|_2$  versus  $\lambda$ )



$Z_2^1$ -invariante stabile Lösung

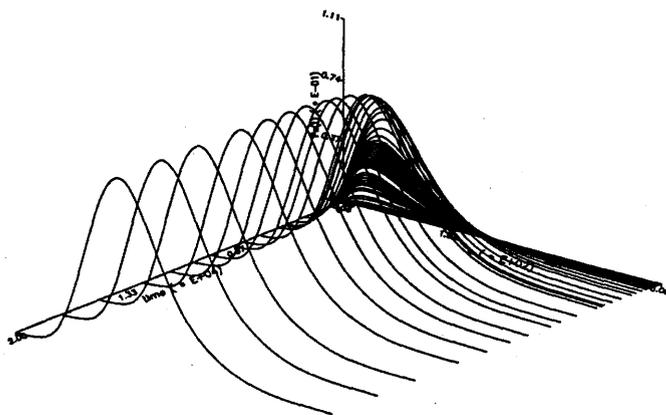
## Adaptive diskrete gewichtete Galerkin-Methoden für makromolekulare Prozesse

Bearbeiter: M. Wulkow, P. Deuffhard, J. Ackermann

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Berichtszeitraum wurde die diskrete gewichtete Galerkin-Methode (nach DEUFLHARD/WULKOW, 1989) für abzählbar viele gewöhnliche Differentialgleichungen wesentlich verbessert. Wichtigste Verbesserung war der Übergang von einer Art Linienmethode für Differentialgleichungen im Banachraum auf eine adaptive Rothe-Methode, wie sie von F. Bornemann zunächst für lineare parabolische partielle Differentialgleichungen vorgeschlagen worden war (vgl. SC 91-1). Um von dem nur in einfacheren makromolekularen Mechanismen verwendbaren "analytischen Preprocessing" wegzukommen, wurden die zu den speziellen Basisfunktionen passenden Gauss-Christoffel-Quadraturformel hergeleitet und implementiert. In der Summe führen diese Verbesserungen zu einer Rechenzeitverkürzung (verglichen mit dem Unterprogramm SUMMATOR) sowie zu einer wesentlich weiteren Anwendbarkeit der Methode. Darüber hinaus wurde eine Analogie zu hp-Methoden (bei FEM) auch im Kontext der diskreten Galerkin-Methode entwickelt. Sie wird 1992 publiziert.

### Literatur

- [1] M. Wulkow, J. Ackermann: *The Treatment of Macromolecular Processes with Chain-Length-Dependent Reaction Coefficients - An Example from Soot Formation*, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (ZIB), Preprint SC 91-18 (1991)



Zeitentwicklung einer Polymerverteilung bei der "Quasi Living Radical Polymerization"

## Entwicklung eines Simulationspaketes für makromolekulare Reaktionen einschließlich chemischer Reaktionskinetik

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

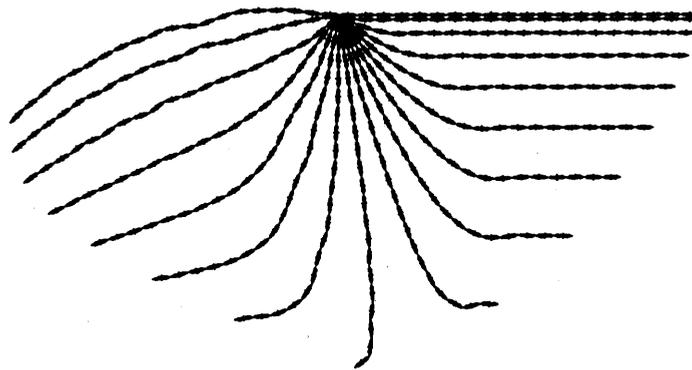
**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die Simulation makromolekularer Prozesse erfordert die Lösung von abzählbaren Systemen gewöhnlicher Differentialgleichungen (CODE's) und zusätzlichen kinetischen Gleichungen. Das auf der diskreten Galerkin-Methode (nach DEUFLHARD/WULKOW, 1989) und der Linienmethode beruhende am ZIB entwickelte Simulationspaketes MACRON (Version I) wurde an eine Reihe von Anwendern (Deutschland, USA) weitergegeben. Der Anwendungsbereich erstreckt sich von Biochemie, Umweltschutz bis zur Autoreifen- und Chipherstellung. Eine umfangreiche Betreuung der Benutzer war im allgemeinen aufgrund der leichten Handbarkeit des Programms (mit einem chemischen Compiler) nicht nötig. Erfahrungen mit Benutzern hauptsächlich in Berlin sind als Erweiterungen in das Programm eingeflossen. Dabei wurde das Programm auch gegenüber Benutzerfehlern, numerischen Instabilitäten und methodischen Grenzfällen stabilisiert. In Bezug auf die mit MACRON (Version I) anvisierte Problemklasse hat sich das in FORTRAN geschriebene Programm als effizient und einfach handbar erwiesen. Bezüglich der Erweiterung der behandelbaren Problemklasse bietet das Programm jedoch kaum Möglichkeiten. Da eine solche Erweiterung immer auch auf Kosten der Effizienz geschehen muß, wurde mit der Entwicklung eines vollkommen neuen Programmpaketes MACRON II begonnen. Das neue Programm soll basierend auf der adaptiven Rothe-Methode (nach BORNEMANN, 1989) die Approximation von Verteilungen in der allgemeinsten Form z.B. durch mehrparametrische Wichtungsfunktionen, finiten Elementen oder mit der hp-Methode ermöglichen. Aus programmtechnischen Gründen wird dieses Paket in C statt FORTRAN entwickelt. Wie zuvor soll auf einen chemischen Compiler nicht verzichtet werden. Weite Teile des Programms sind inzwischen fertiggestellt. So ist bereits die Behandlung rein chemischer Reaktionssysteme möglich. Entsprechende Testrechnungen wurden durchgeführt.

## Extrapolationsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen und differentiell–algebraische Systeme

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

**Kooperation:** Ch. Lubich (Seminar für Angewandte Mathematik, ETH Zürich)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Neben Pflege und Test der über die CodeLib zugänglichen Basis-Codes wurde in Zusammenarbeit mit Ch. Lubich der Code MEXX21 weiterentwickelt. Dieses Extrapolationsverfahren [1] löst differentiell–algebraische Systeme mit Index = 2 aus der Mehrkörpermechanik. Seine halb–explizite Euler–Diskretisierung ist explizit im differentiellen Teil und implizit in den Nebenbedingungen. Dadurch treten bei der Integration hauptsächlich lineare und nur wenige nichtlineare Gleichungssysteme auf. Bei der Neuimplementierung des Verfahrens am ZIB standen ein benutzerfreundliches Interface und die effiziente Behandlung der linearen Algebra im Vordergrund. So können, abhängig von der Formulierung des Problems, die auftretenden Matrizen rasch groß, jedoch dünnbesetzt, werden. Für diesen Fall konnte durch den Sparse–Matrix–Löser MA28 ein deutlicher Effizienzgewinn erzielt werden. Der Aufwand zur Integration eines Mehrfachpendels steigt im wesentlichen nur linear in der Anzahl der Körper. Der modulare Aufbau der entwickelten Software erlaubt auch die einfache Anbindung weiterer, etwa strukturausnutzender oder rekursiver, Lösungsverfahren. Ein gemeinsamer Preprint erscheint 1992.



Simulation eines physikalischen Mehrfachpendels (20 Körper)

### Literatur

- [1] Ch. Lubich: *Extrapolation integrators for constrained multibody systems*. IMPACT Comp. Sci. Eng. **3**, p. 213–234 (1991)

## Kalkülsystem für Probleme der optimalen Steuerung

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Optimale Steuerungen und ihre Berechnung sind in vielen praktischen und industriellen Anwendungen wichtig. Vom mathematischen Standpunkt aus handelt es sich dabei um die Minimierung eines Funktionals unter Nebenbedingungen, unter die vor allem Differentialgleichungen fallen, welche die Dynamik des Systems beschreiben. Weiterhin gibt es zum Teil noch Beschränkungen in Form von Gleichungen oder Ungleichungen. Die numerische Lösung solcher Probleme durch indirekte Methoden (Mehrzielmethoden oder Kollokationsmethoden) erfordert einen beträchtlichen Aufwand an analytischer Vorarbeit, um schließlich numerisch behandelbare Systeme zu erhalten. Obwohl diese Vorarbeit in realistischen Beispielen äußerst umfangreich, lästig und fehleranfällig ist, wird sie in zahlreichen Anwendungsgebieten immer noch sozusagen per Hand erledigt. Für spezielle Problemklassen (etwa Mehrkörperdynamik) existieren bereits symbolische Präprozessoren derart, daß etwa die Hamiltonsche Funktion, die adjungierten Gleichungen oder gewisse Ableitungen der Hamiltonschen Funktion berechnet werden. Die Zielstellung eines Kalkülsystems geht darüber hinaus: es sollen auch analytische Zwischenrechnungen mit nicht vorab bekanntem Resultat erledigt werden, deren Konsequenz für die Numerik zunächst offen ist. Fragestellungen dieser Bauart sind etwa die Bestimmung der Ordnung von singulären Steuerungen bzw. Zustandsbeschränkungen. Darüber hinaus wäre ein Fernziel, gewisse Argumentationsmuster in ein solches System einzubauen, welche die Abfolge der einzelnen Teiltrajektorien mit zugehöriger Schaltstruktur festlegen – ein wichtiger Baustein für die indirekten numerischen Methoden. Im Berichtszeitraum wurden erste Schritte auf das angegebene Ziel hin getan. Standardprobleme, bisher noch ohne singuläre Steuerungen oder Zustandsbeschränkungen, lassen sich bereits befriedigend behandeln. Als Beispiel sei das Re-entry-Problem aus dem Buch von Stoer/Bulirsch genannt. Ein erster Bericht wurde mit [1] vorgelegt und bei einer Reihe von Gelegenheiten auch vorgetragen. Die Erstellung des Kalkülsystems in seiner jetzigen Form hat bereits eine Erweiterung des symbolischen Sprachpaketes REDUCE in einer Reihe von Einzelpunkten zur Folge gehabt. In der nächsten Phase der Entwicklung soll das Paket in Kooperation mit Anwendern aus der Raumfahrt- und Chemie-Industrie weiterentwickelt und an konkreten Fragestellungen getestet werden.

### Literatur

- [1] R. Schöpf, P. Deuffhard: *OCCAL – a mixed symbolic-numeric Optimal Control CALCulator*. ZIB Preprint SC 91-13 (1991)

## Lehrbuch zur Numerischen Mathematik

Bearbeiter: P. Deuffhard, A. Hohmann

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Sommer 1991 konnten wir das Lehrbuch "Numerische Mathematik – eine algorithmisch orientierte Einführung" in Druck geben. Es ist im September, noch rechtzeitig vor Beginn des Wintersemesters 1991/92, erschienen. Ein programmatischer und inhaltlicher Überblick läßt sich aus dem im folgenden abgedruckten Umschlagtext und der Kapiteleinteilung gewinnen.

"Das vorliegende Buch führt ein in die algorithmisch orientierte Numerische Mathematik als Teil des noch jungen interdisziplinären Gebietes Scientific Computing (auch Wissenschaftliches Rechnen). Nicht nur der Einsatz von immer leistungsfähigeren Computern, sondern auch die Bereitstellung von effizienteren Algorithmen verschiebt heute die Komplexitätsgrenze lösbarer Probleme. Dieser Entwicklung trägt das Buch in Stoffauswahl und Darstellungsweise Rechnung. Es richtet sich an Studierende der Mathematik, Natur- und Ingenieurwissenschaften sowie an bereits im Beruf stehende Mathematiker, Naturwissenschaftler und Ingenieure aus Forschung und Entwicklung in Industrie und Hochschulen. Wesentliche Konzepte einer modernen Numerik werden am jeweils einfachsten Problemtyp behandelt. Ziel des Buches ist die Förderung des algorithmischen Denkens."

### Inhalt

1. Lineare Gleichungssysteme
2. Fehleranalyse
3. Lineare Ausgleichsprobleme
4. Nichtlineare Gleichungssysteme und Ausgleichsprobleme
5. Symmetrische Eigenwertprobleme
6. Drei-Term-Rekursionen
7. Interpolation und Approximation
8. Große symmetrische Gleichungssysteme und Eigenwertprobleme
9. Bestimmte Integrale

Die Kapitel zwei, vier, sechs und neun enthalten zum Teil Stoff, der bisher anderweitig nicht publiziert ist und sich dennoch für dieses elementare Niveau eignet.

### Literatur

- [1] P. Deuffhard, A. Hohmann: *Numerische Mathematik – eine algorithmisch orientierte Einführung*, de Gruyter, Berlin, New York, 1991.

## Symbolische Lösung algebraischer Gleichungssysteme

Bearbeiter: H. Melenk

Kooperation: H.M. Möller (Fernuniversität Hagen)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Schon seit längerem wird im ZIB der Buchberger-Algorithmus für die symbolische Lösung polynomialer Gleichungssysteme eingesetzt. Dabei wurden Varianten des Algorithmus entwickelt, die besonders für den praktischen Einsatz von Gleichungssystemen aus dem natur- und ingenieurwissenschaftlichen Bereich geeignet sind und dort auch (an algebraischen Algorithmen gemessen) größere Probleme zu bearbeiten gestatten. Diese Versionen sind bereits seit längerer Zeit in der Anwendungsbibliothek von REDUCE allgemein verfügbar und mit REDUCE 3.4 gehört das Paket zum integralen Bestandteil des Kernsystems.

Für die Integration des Paketes in REDUCE wurde ein neues Interface entwickelt, das auch die symbolische Bearbeitung einer großen Klasse von nicht-polynomialen Gleichungssystemen gestattet, indem diese automatisch auf Polynomsysteme zurückgeführt werden. Dazu gehören Systeme mit trigonometrischen Funktionen (Beandlung von  $\sin$  und  $\cos$  als formale Variable unter Hinzunahme des Polynoms  $\sin^2 + \cos^2 = 1$ ), allgemeine Wurzelausdrücke (formale Adjunktion der Wurzel und Hinzunahme ihrer algebraischen Definitionsgleichung) und alle Funktionen, die eine eindeutige Umkehrfunktion besitzen und in einer nicht transzendenten Abhängigkeit stehen. Nach dem derzeitigen Wissensstand ist damit der Bereich der algorithmisch formal lösbaren nichtlinearen Gleichungssysteme umspannt.

### Beispiel

Das Gleichungssystem

$$\sqrt{x^2 + y^2} = r, \sqrt{x} + y^3 - 1 = 0$$

wird von REDUCE formal gelöst, hier mit  $y$  als freiem Parameter:

$$\left\{ x = y^6 - 2y^3 + 1, r = \sqrt{y^{12} - 4y^9 + 6y^6 - 4y^3 + y^2 + 1} \right\}$$

$$\left\{ x = y^6 - 2y^3 + 1, r = -\sqrt{y^{12} - 4y^9 + 6y^6 - 4y^3 + y^2 + 1} \right\}$$

In den Kernalgorithmus des Gröbner-paketes wurde die von Italienern C. Traverso und T. Mora entwickelte "Sugar"-Technik übernommen. REDUCE ist damit eines der ersten verbreiteten Systeme, das über diese erhebliche Leistungserweiterung im Bereich der Polynomideale verfügt.

## Weiterentwicklung von REDUCE

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

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

Weitere Beiträge von derzeit 38 Wissenschaftlern aus den USA, Japan, Australien, Sowjetunion und 9 europäischen Ländern.

REDUCE ist ein Programmsystem für die symbolische Bearbeitung mathematischer Formeln. Die Entwicklung von REDUCE wurde Ende der sechziger Jahre von A.C. Hearn begonnen, und zwar zunächst für den Einsatz in der Physik (vor allem Hochenergiephysik). REDUCE entwickelte sich bald zu einem universellen Werkzeug für die verschiedensten Ingenieur- und Naturwissenschaften. Heute bietet REDUCE neben der klassischen Computeralgebra Hilfsmittel für zahlreiche mathematische Teilbereiche und für eine wachsende Zahl von Anwendungsbereichen.

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

Herausragendes Ereignis im Berichtsjahr war die Fertigstellung einer neuen Version REDUCE 3.4, in der die über vier Jahre entwickelten Verbesserungen des Systems konsolidiert und der Allgemeinheit zur Verfügung gestellt wurden. In dieser Version sind nun auch die im ZIB erstellten Moduln als integraler Bestandteil enthalten.

Auch die im ZIB gepflegten symbolisch-numerischen Verfahren haben einen unmittelbaren Einfluss auf die Entwicklung von REDUCE, da dieser zukunftsträchtige Bereich an kaum einer Stelle mit einer vergleichbaren Intensität gepflegt wird. Die Arbeiten in diesem Bereich sind in zwei Einzelprojekten beschrieben.

Daneben wurde im ZIB in besonders intensiver Kooperation mit J. Marti an einem Paket für die grafische Darstellung algebraischer Objekte gearbeitet, wobei in Berlin vornehmlich die Aspekte der verschiedenen Hardware-Plattformen bearbeitet wurden.

Das folgende Beispiel demonstriert gleichzeitig die Fähigkeiten der Computeralgebra zum Gleichungslösen und die grafische Visualisierung von Formeln:

Die symbolische Lösung der Differentialgleichung

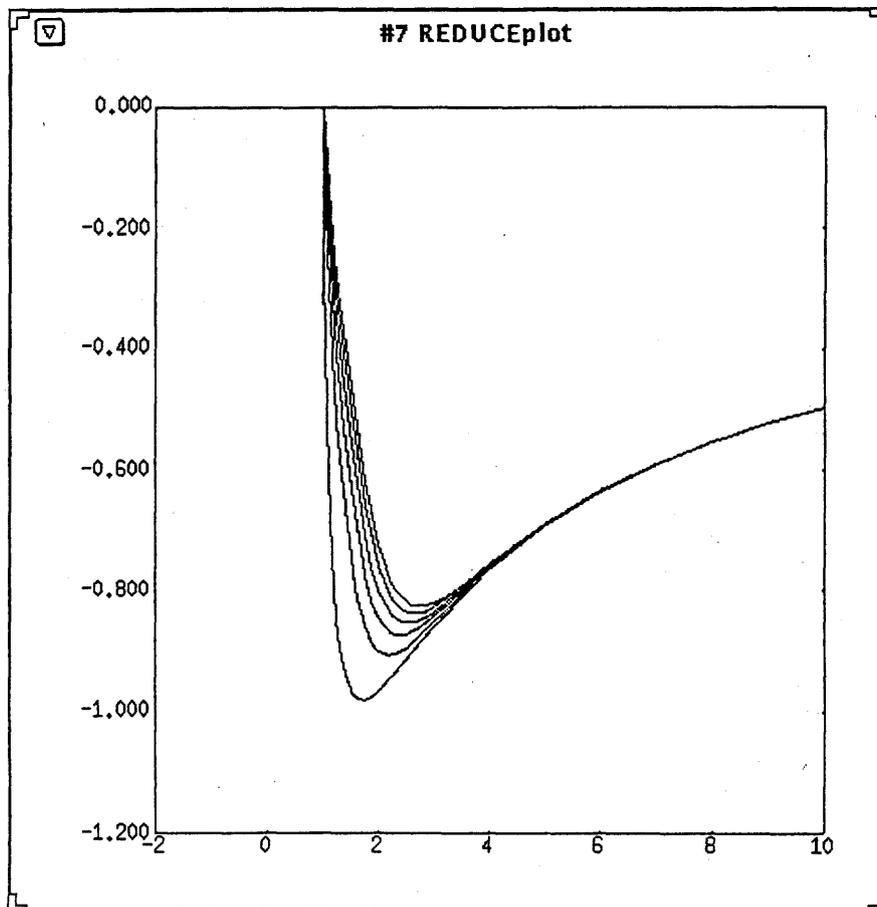
$$x(1 - x^2)y' + (2x^2 - 1)y - x^3y^3 = 0$$

`odesolve(x*(1-x**2)*df(y,x) + (2*x**2 -1)*y - x**3*y**3,y,x);`

führt zunächst auf eine algebraische Gleichung

$$\left\{ \frac{5 \cdot \text{ARBCONST}(4) + 2 \cdot X^5}{Y^2 \cdot (5 \cdot X^4 - 5 \cdot X^2)} \right\}$$

mit einem freien Parameter; diese Gleichung läßt sich algebraisch lösen und unter Variation des freien Parameters (hier 0,2,4,6,8,10) darstellen:



## Europäische Normung von LISP

**Bearbeiter:** W. Neun

Obwohl die Programmiersprache LISP bis in die 50er Jahre zurückgeht, spielt sie nach wie vor eine wichtige Rolle in der Informatik, vor allem in innovativen Bereichen wie der künstlichen Intelligenz (Expertensysteme) und in der Symbolverarbeitung, nicht zuletzt aber auch als Trägersystem für die Computeralgebra. Es wurden immer wieder Dialekte dieser Sprache entwickelt und mehr oder weniger erfolgreich eingesetzt. Früheren Versuchen der Standardisierung waren jedoch nur Teilerfolge beschieden, nicht zuletzt wegen des sich wandelnden Anforderungsprofils mit der Weiterentwicklung der Informatik.

Unterstützt von der Europäischen Gemeinschaft wird von einer Arbeitsgruppe mit Mitgliedern aus vielen europäischen Ländern an der internationalen Normung der Programmiersprache LISP durch die ISO mitgearbeitet und ein eigener Normungsvorschlag "EuLISP" wurde unterbreitet. Die Definition eines effizienten, kleinen Systems ist eine der Hauptideen des Dialekts EuLISP. Der amerikanische Normvorschlag "Common LISP" ist dagegen sehr mächtig, aber auch sehr umfangreich und ist in der Verarbeitung nicht von gleicher Effizienz wie EuLISP. Zur Zeit existieren Prototypen von EuLISP im Einsatz sowohl in der Softwareentwicklung als auch in der Lehre bei mehreren Universitäten. Im letzten Jahr hat die Normung von LISP auf internationaler Ebene keine bedeutenden Fortschritte gemacht. Beide "Lager" haben auf ihren Standpunkten beharrt und nur Details verändert. Ende letzten Jahres wurden von deutscher Seite (DIN) erste Entwürfe eines DIN Kernel Lisp (DKLisp) vorgestellt und werden seither diskutiert. Der DIN Entwurf versucht eine Normung auf einem weit weniger komplexen Niveau als EuLISP oder Common LISP und könnte daher in den Normungsgremien auf ein breiteres Wohlwollen hoffen.

Der im ZIB verwendete Dialekt "PSL" entspricht immer weniger dem Stand eines modernen LISP. Deshalb hat einer Neudefinition der Sprache eine große Bedeutung für die Projekte in der Symbolik, insbesondere wenn der Standard unseren Anforderungen genügt und auf breite Akzeptanz stößt.

## Polyedrischer Ansatz für kombinatorische Optimierungsprobleme

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

**Kooperation:** M. Jünger (Institut für Informatik, Universität zu Köln)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Eine erfolgreiche Methode zur Lösung großer kombinatorischer Optimierungsprobleme besteht darin, ein Polyeder zu studieren, dessen Ecken den zulässigen Lösungen des kombinatorischen Optimierungsproblems entsprechen. Um Verfahren zur Lösung linearer Programme anwenden zu können ist es notwendig, eine Beschreibung des Polyeders durch Ungleichungen zu finden. Da in der Regel zu viele Ungleichungen vorhanden sind, startet man mit einem linearen Programm, welches nur einen kleinen Teil der Ungleichungen des Ausgangsproblems berücksichtigt. Die Lösung dieses linearen Programms definiert eine untere Schranke für das Ausgangsproblem. Ist sie auch zulässig, so hat man eine optimale Lösung gefunden. Anderenfalls muß das sogenannte Separierungsproblem gelöst werden, welches darin besteht, gültige Ungleichungen des Ausgangsproblems zu finden, welche von der gegenwärtigen Lösung verletzt werden. Diese werden dem linearen Programm hinzugefügt und letzteres von Neuem gelöst. Im Rahmen dieses Ansatzes treten eine Vielzahl von Teilproblemen auf. Einerseits ist eine gute Kenntnis der entsprechenden Polyeder unabdingbare Voraussetzung für die erfolgreiche Anwendung dieses Ansatzes. In diesem Zusammenhang versuchen wir, aus dem Studium "einfacherer Polyeder" theoretische und praktische Erkenntnisse zu gewinnen, welche eine leichtere Handhabung schwieriger Probleme ermöglicht. Ein nicht triviales Problem ist ferner die effiziente Implementierung des Gesamtverfahrens. In diesem Zusammenhang wurde bereits ein "Framework" von Prof. Jünger entwickelt, an dessen Verbesserung wir durch Lösung konkreter Anwendungen mitwirken. Ein Überblick über polyedrische Kombinatorik ist in [1] zu finden. Praktische Ergebnisse finden sich unter anderem in [2].

### Literatur

- [1] M. Grötschel, L. Lovász, A. Schrijver: *Geometric Algorithms and Combinatorial Optimization*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg (1988)
- [2] M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel: *Packing Steiner trees: Polyhedral Investigations*. ZIB, Preprint erscheint 1992

## Quadratische 0/1-Optimierung

Bearbeiter: A. Martin, R. Weismantel

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Rahmen dieses Projekts beschäftigen wir uns mit dem folgenden quadratischen, 0/1 Optimierungsproblem: Gegeben seien Zahlen  $n$  und  $m$  sowie eine Matrix  $Q \in \mathbb{R}^{nm \times nm}$ :

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

Zusätzlich untersuchen wir Varianten dieses Problems, wobei  $m$  einer konstanten Zahl entspricht oder die zugehörige Matrix nur nicht-negative oder nicht-positive Matrixeinträge aufweist. Zunächst läßt sich zeigen, daß all diese Teilprobleme  $NP$ -schwer sind. Des Weiteren untersuchten wir die Fragestellung, ob, sofern  $P \neq NP$  vorausgesetzt wird, Algorithmen entwickelt werden können, welche für alle Inputdaten eine beweisbar gute Lösung liefern (vergleiche [3]). Ein weiterer Schwerpunkt im Rahmen dieses Projekts betrifft die Entwicklung oberer und unterer Schranken zur Lösung der Probleme ( $P_m^+$ ). Um untere Schranken zu erhalten, entwickeln wir einen Lagrange-Relaxierungs-Ansatz. Durch heuristisch gewonnene Lösungen können wir obere Schranken ableiten.

### Literatur

- [1] P.L. Hammer, P. Hansen, B. Simeone: *Roof Duality, complementation and persistency in quadratic 0-1 optimization*. Math. Programming **28**, p. 121-155 (1984)
- [2] M. Jünger, A. Martin, G. Reinelt, R. Weismantel: *Quadratic 0/1 Optimization and a Decomposition Approach for the Placement Problem of Electronic Circuits*. Erscheint in Mathematical Programming (1992)
- [3] R. Weismantel: *Plazieren von Zellen: Theorie und Lösung eines quadratischen 0/1 Optimierungsproblems*. Dissertation, in Vorbereitung

### 3.3 Anwendungsprojekte

#### Das Mehrfach-Partitionierungsprojekt

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

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Beim Entwurf von Computern treten "Mehrfach-Partitionierungsprobleme" z. B. dann auf, wenn ein logischer Gesamtentwurf sinnvoll auf verschiedene Rückwände, in Baugruppen und Fabrikationseinheiten aufgeteilt werden muß. Eine sinnvolle Aufteilung verlangt dabei, daß die Teile eine vorgegebene Größe oder zumindest Größenordnung nicht überschreiten, damit sie untereinander nicht zu stark vernetzt sind. Im Gegensatz zu den einfacheren Max-Cut und Equicut-Problemen sind Mehrfachschnittprobleme in der Vergangenheit trotz ihrer praktischen Bedeutung kaum studiert worden. Im vorliegenden Projekt beginnen wir mit Grundlagenuntersuchungen, die zur Lösung derartiger Praxisprobleme führen, wie sie bei unserem industriellen Kooperationspartner auftreten. Für das Problem verwenden wir dabei folgende mathematische Modellierung. Gegeben ist eine Menge von Bausteinen, eine Menge von Baugruppen und eine Menge von Netzen. Jedem Bausteine ist eine Fläche und ein Typ zugeordnet. Baugruppen haben eine Flächenkapazität, eine Schnittkapazität und einen Kostenfaktor, der im wesentlichen von den Bausteinen, die dieser Baugruppe zugewiesen wurden, abhängt. Ein Netz stellt eine Teilmenge der Menge aller Bausteine dar, welche durch einen Draht zu verbinden ist. Gesucht ist eine kostenminimale Zuordnung der Bausteine zu Baugruppen, so daß alle vorgegebenen Nebenbedingungen erfüllt sind. Diese Nebenbedingungen sagen beispielsweise aus, daß die Summe der Flächen von Bausteinen, die einer Baugruppe zugewiesen werden, die zugehörige Flächenkapazität nicht übersteigen. Ähnlich muß die Gesamtzahl von Netzen, die eine Baugruppe verlassen, durch die Schnittkapazität begrenzt sein. Weitere Nebenbedingungen sind zum Teil sehr spezieller und komplexer Struktur. Für dieses Problem haben wir eine Modellierung erarbeitet und strukturell analysiert. Dabei zeigt sich, daß das mehrdimensionale Rucksack-Problem und interessante Varianten von Mehrfachschnitt-Problemen als Teilprobleme vorkommen. Ziel wird es deshalb zunächst sein, diese Teilprobleme polyedrisch zu untersuchen und einen Schnittebenenansatz zu ihrer Lösung zu entwickeln.

## Das Verdrahtungsproblem im VLSI-Design

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

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Ausgangspunkt dieses Projekts ist das sogenannte Verdrahtungsproblem, das beim Entwurf elektronischer Schaltungen auftritt, wenn die Positionen für die einzelnen Komponenten auf einem VLSI-Chip festgelegt sind und nun die Verbindungen hergestellt werden müssen. Im wesentlichen besteht das Problem darin, eine gegebene Anzahl von Punktmengen unter bestimmten Nebenbedingungen und Optimalitätskriterien auf einer Grundfläche zu verbinden. Abhängig von den Entwurfsregeln für bestimmte Chips ergeben sich unterschiedliche Varianten des Verdrahtungsproblems. Einige dieser Verdrahtungsprobleme können graphentheoretisch folgendermaßen formuliert werden: Gegeben ein Graph  $G = (V, E)$  mit Kantenkapazitäten  $c_e \in \mathbb{N}$  und eine Liste von Knotenmengen  $\mathcal{N} = \{T_1, \dots, T_N\}$ ,  $N \in \mathbb{N}$ . Gesucht sind Kantenmengen  $S_1, \dots, S_N$ , so daß für jedes  $k \in \{1, \dots, N\}$  und jedes Knotenpaar aus  $T_k$  ein Weg in dem von  $S_k$  induzierten Graphen existiert und jede Kante in höchstens  $c_e$  Kantenmengen aus  $S_1, \dots, S_N$  enthalten ist. Eine zulässige Lösung dieses Problems nennen wir eine Steinerbaumpackung. Ist zusätzlich eine Gewichtung der Kanten gegeben und nach einer bezüglich dieser Gewichtung minimalen Steinerbaumpackung gesucht, so sprechen wir vom gewichteten Steinerbaumpackungsproblem.

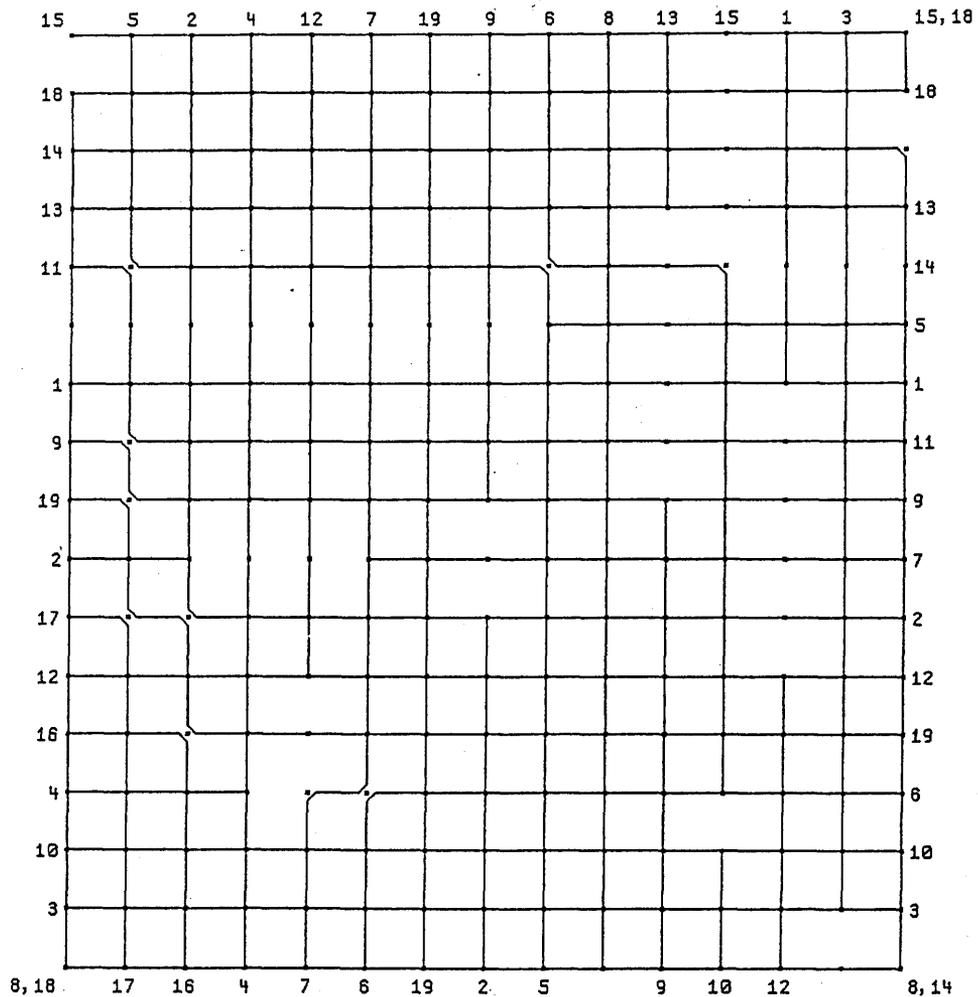
Wir studieren das Steinerbaumpackungsproblem aus polyedrischer Sicht und definieren ein Polyeder, dessen Ecken genau den Steinerbaumpackungen entsprechen. Anschließend versuchen wir, dieses Polyeder durch "gute", beziehungsweise facetten-definierenden Ungleichungen zu beschreiben. Auf Basis dieser Ungleichungen entwickeln wir ein Schnittebenenverfahren. Die Lösung des Schnittebenenverfahrens liefert eine untere Schranke für die Optimallösung und dient als Grundlage für die Entwicklung guter Primalheuristiken. Wir haben das von uns implementierte Schnittebenenverfahren an einem Spezialfall des Verdrahtungsproblems, dem sogenannten Switchbox-Verdrahtungsproblem, getestet und vielversprechende Ergebnisse erzielt.

## Literatur

- [1] A. Martin: *Packen von Steinerbäumen: Polyedrische Studien und Anwendung*. Doktorarbeit, Technische Universität Berlin (1992)
- [2] M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel: *Packing Steiner trees: po-*

lyhedral investigation. Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (ZIB), Preprint erscheint 1992

- [3] M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel: *Packing Steiner trees: a cutting plane algorithm and computational results*. Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (ZIB), Preprint erscheint 1992



Switchbox-Verdrahtung

## Plazieren von Zellen im VLSI-Design

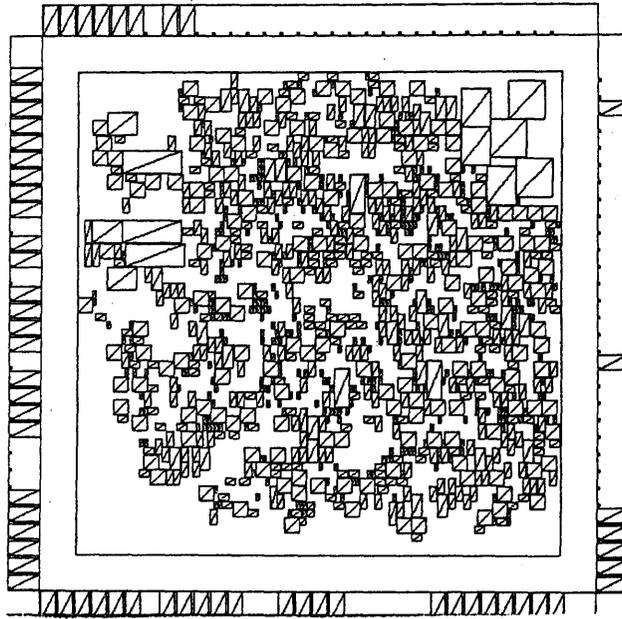
**Bearbeiter:** A. Martin, R. Weismantel

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

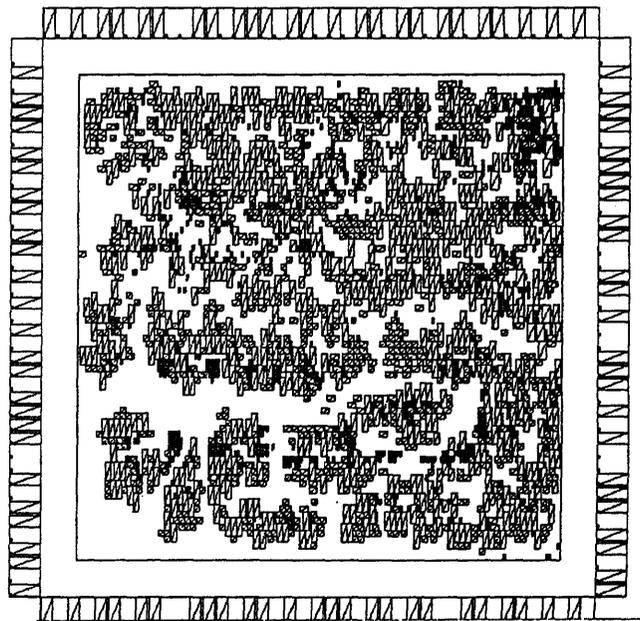
**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Rahmen dieses Projekts beschäftigen wir uns mit dem Plazierungsproblem, welches beim Entwurf elektronischer Schaltungen auftritt, wenn eine Verteilung der einzelnen Schaltelemente auf einem Chip gesucht wird. Das Plazierungsproblem läßt sich mathematisch folgendermaßen formulieren. Gegeben ist eine ebene Grundfläche, eine Menge von Netzen sowie eine Menge von Zellen. Jede Zelle ist charakterisiert durch Breite, Höhe und Kontaktpunkte. Die Netze spezifizieren, welche Zellen an welchen Kontaktpunkten miteinander verbunden werden müssen. Gesucht ist eine Anordnung der Zellen auf der Grundfläche, so daß je zwei Zellen nicht überlappen, die technologischen Nebenbedingungen erfüllt sind und alle Netze physikalisch verbunden werden können. Die technologischen Nebenbedingungen und Optimalitätskriterien hängen dabei von dem sogenannten Entwurfsstil ab. Wir modellieren das Plazierungsproblem als ein quadratisches 0/1 Optimierungsproblem unter linearen Nebenbedingungen. Da die Größenordnung praktischer Problembeispiele in dem Bereich mehrerer hunderttausend Variablen liegt, zerlegen wir das Ausgangsproblem in eine Folge kleinerer Probleme. Für die durch Dekomposition entstandenen Probleme entwickeln wir verschiedene Primal- und Verbesserungsverfahren, welche die spezielle Struktur der Anwendungen ausnützen. Zur Lösung praktischer Beispiele im sogenannten "sea of cells"-Entwurfsstil wurde ein Prototyp implementiert und erfolgreich mit "state of the art"-Plazierungsverfahren verglichen.

### Literatur

- [1] M. Jünger, A. Martin, G. Reinelt, R. Weismantel: *Quadratic 0/1 Optimization and a Decomposition Approach for the Placement Problem of Electronic Circuits*. Erscheint in *Mathematical Programming* (1992)
- [2] R. Weismantel: *Plazieren von Zellen: Theorie und Lösung eines quadratischen 0/1 Optimierungsproblems*. Dissertation in Vorbereitung



Plazierung von 1021 Zellen



Plazierung von 2670 Zellen

## Auslegung von ausfallsicheren Kommunikationsnetzwerken

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

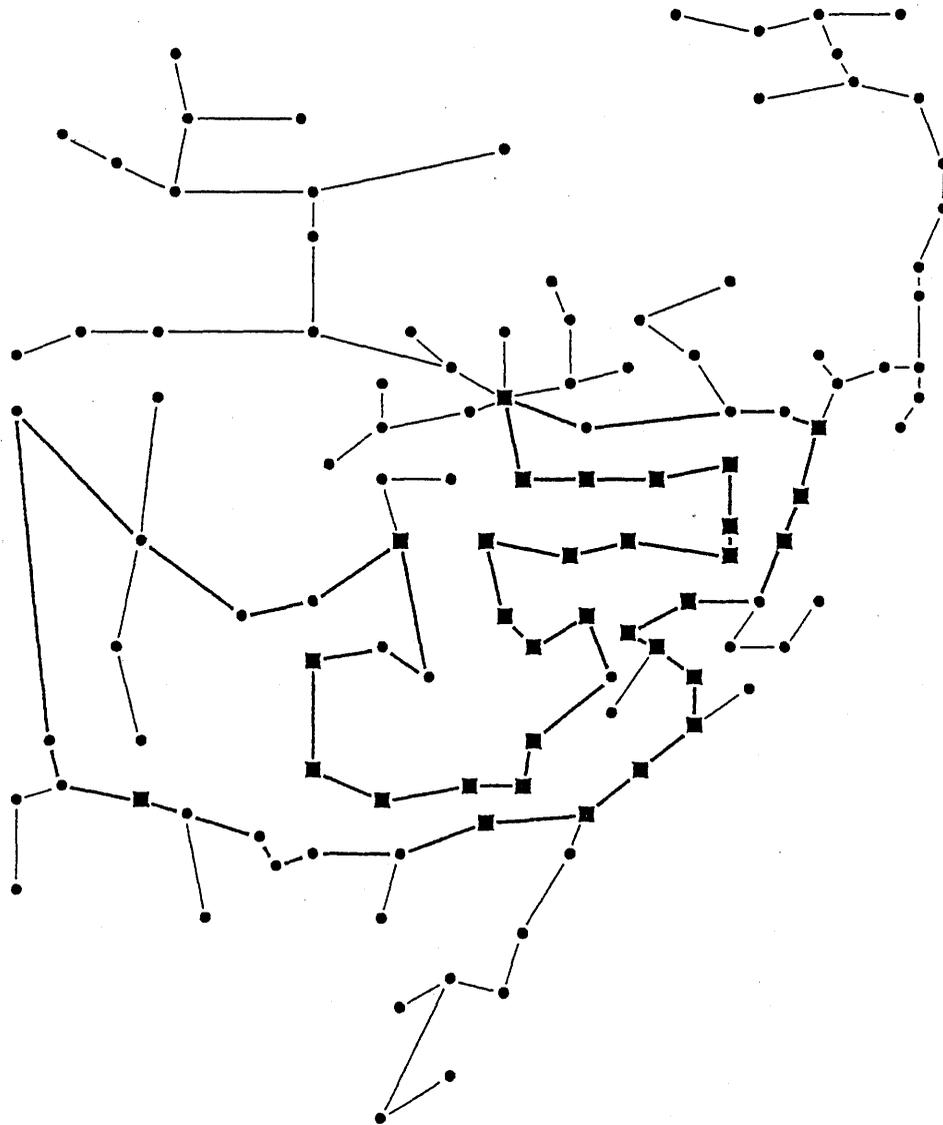
**Kooperation:** Clyde L. Monma, Bell Communications Research, Morristown, New Jersey, U.S.A.

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** In dem vor vier Jahren begonnenen Projekt ging es zunächst um die Auslegung von kostengünstigen Telefonnetzwerken, in denen nur die Funktionstüchtigkeit bei Ausfall eines einzigen Kabels oder Telefonamtes gewährleistet zu sein brauchte. Da zu erwarten stand, daß auch höhere Ausfallsicherheit einmal interessant werden würde und Bell Communications Research uns entsprechende Daten (für die Auslegung eines Kommunikationsnetzwerkes auf einem Schiff) zur Verfügung stellte, begannen wir vor zwei Jahren, die Ergebnisse für den Fall des niedrigen Zusammenhangs auf den Fall des höheren Zusammenhangs zu verallgemeinern und im Schnittebenenverfahren zu berücksichtigen. Es gelang auch, beim polyedertheoretischen Ansatz die wesentlichen Klassen von Facetten zu verallgemeinern und algorithmisch zu nutzen. Allerdings konnten wir bisher nur eines der drei Problemebeispiele von Bellcore lösen. Die theoretischen und praktischen Ergebnisse bei der Auslegung von ausfallsicheren Kommunikationsnetzwerken sind in [4] dargestellt.

### Literatur

- [1] M. Grötschel, C. Monma: *Integer polyhedra arising from certain network design problems with connectivity constraints*. SIAM Journal on Discrete Mathematics **3**, p. 502–523 (1990)
- [2] M. Grötschel, C. Monma, M. Stoer: *Facets for Polyhedra Arising in the Design of Communication Networks with Low-Connectivity Constraints*. Report No. 187, Schwerpunktprogramm der Deutschen Forschungsgemeinschaft, Universität Augsburg, Augsburg (1989), erscheint in: SIAM Journal on Optimization.
- [3] M. Grötschel, C. Monma, M. Stoer: *Polyhedral Approaches to Network Survivability*. In: F. Roberts et al. (Hrsg.), *Reliability of Computer and Communication Networks*, DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science, **5**, AMS/ACM, p. 121–141 (1991)
- [4] M. Stoer: *Design of Survivable Networks*. Dissertation, Universität Augsburg (1991)

- [5] M. Grötschel; C. Monma; M. Stoer: *Computational Results with a Cutting Plane Algorithm for Designing Communication Networks with Low-Connectivity Constraints*. Erscheint in *Operations Research*.



Optimale eines Glasfaser-Telekommunikationsnetzwerkes

## Parallelisierung numerischer und kombinatorischer Algorithmen

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

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Nach Einrichtung der Abteilung Visualisierung und Paralleles Rechnen stand zunächst die Untersuchung von Entwurfs- und Spezifikationsmethoden sowie von Rechnerarchitekturen auf ihre Eignung für das geplante Aufgabenfeld (Parallelisierung und Implementierung adaptiver kombinatorischer und numerischer Algorithmen) im Vordergrund.

*Entwurf paralleler Programme:* *Systolische Felder* und *Farmen* bezeichnen spezifische Formen paralleler Berechnung. Sie können als Paradigmen für den Entwurf paralleler Programme herangezogen werden. Systolische Felder beschreiben synchron getaktete, mehrdimensionale Pipelinestrukturen mit regulärer Kommunikationstopographie. Farmen implementieren das Partitioning-Prinzip (Zerlegung des Datenraumes), typischerweise als Master/Slave-Ansatz: Ein Masterprozeß verteilt Aufträge an sogenannte Slaveprozesse, die Teilberechnungen durchführen und die Ergebnisse beim Master, zur Kombination zum Gesamtergebnis, abliefern. Beide Paradigmen können auf verschiedene Weise ausgestaltet, variiert und verfeinert werden. Für den Entwurf paralleler Programme ist es von Interesse, welche Eigenschaften diese "Standardmodelle" auszeichnen, wie sie auf einen Lösungsansatz angewendet werden können und wie sie effizient auf parallele Rechnerarchitekturen abgebildet werden können. Diese Fragen wurden im Zusammenhang mit einer Diplomarbeit (M. Grammel) näher untersucht, die 1992 abgeschlossen wird. Eine beispielhafte Anwendung erfolgte an einer Kern-Routine des PDE-Solvers Kaskade.

*Spezifikation paralleler Programme:* Der Entwurf paralleler Programme und Nachweis der Korrektheit gestaltet sich schwieriger als im sequentiellen Fall. Gründe hierfür sind möglicher nicht-deterministischer Ablauf, die Komplexität der Kommunikation und Interaktion von Prozessen sowie die mangelnde Abstraktion von der zugrundeliegenden Rechnerarchitektur. Die im sequentiellen Fall übliche informelle Darstellung und operationale Betrachtungsweise läßt im parallelen Fall "Zweifelsfälle" oft ungenügend geklärt und übersieht fehlerträchtige Fälle. Ein Ausweg könnte die Verwendung formaler Methoden bei Entwurf und Spezifikation sein.

Wir betrachteten UNITY, ein einfaches imperatives Programmiermodell mit zugehörigem Beweissystem, das auf temporaler Logik basiert. UNITY erlaubt eine formale Darstellung von Programmen, eine explizite Trennung architekturabhängiger und -unabhängiger Anteile, Nichtdeterminismus als "Normalfall", schrittweise Transformation von Programmen z.B. zur Parallelisierung und Optimierung, und besonders die Spezifikation und Verifikation paralleler Algorithmen.

Zur Beurteilung der Praxistauglichkeit des UNITY-Modells wurden Algorithmenklassen zur Lösung des Maximalflußproblems spezifiziert und deren Korrektheit bewiesen. Es zeigte sich, daß bei verfeinerten Spezifikationen auf Entwurfsebene Korrektheitsbeweise sehr umfangreich werden können. Die Arbeit wird 1992 abgeschlossen und publiziert.

*Rechnerarchitekturen:* Für Architekturen paralleler Rechner hat sich noch kein einheitlicher Standard herausgebildet. Unterschiede gibt es hauptsächlich bei der Synchronisation von Prozessoren, bei der Kommunikation zwischen diesen und bei der Organisation des Speichers. Entsprechend unterscheiden sich die Programmiermodelle, z.B. (Virtual) Shared Memory oder Message Passing. Dies hat Auswirkungen auf Art und Grad der Parallelisierbarkeit von Algorithmen und damit auf den Entwurf.

Die Eignung unterschiedlicher Architekturen für Probleme der kombinatorischen Optimierung wurde anhand von Kern-Algorithmen aus diesem Gebiet untersucht — hauptsächlich am Beispiel des Algorithmus von Goldberg/Tarjan zur Lösung des Maximalflußproblems. Es wurden Programmwürfe bezüglich verschiedener Architekturen erstellt und einer vergleichenden Analyse unterzogen. Als besonders günstig erwies sich eine SIMD- oder MIMD-Architektur mit gemeinsamem und lokalem Speicher (Hybrid-Architektur). Für den Maxflow-Algorithmus zeigte sich, daß wegen der feinen parallelen Granularität eine Beschleunigung der Programmausführung gegenüber der sequentiellen Version nur dann zu erwarten ist, wenn die Zugriffszeiten auf entfernte Daten nicht wesentlich höher sind als für lokale Zugriffe.

Bis zur Verfügbarkeit eines Parallelrechners am ZIB soll die Entwicklung paralleler Algorithmen auf einem Simulator, auf über Netz erreichbaren Parallelrechnern sowie im hauseigenen Workstation-Netz erfolgen. Zur Vorbereitung eines Projektes 'Netzverteiltes Rechnen' wurde die Message-Passing-Bibliothek PVM beschafft und für Implementierungen kombinatorischer Algorithmen eingesetzt.

## Quantenchromodynamik auf einem hochparallelen Rechner

**Bearbeiter:** H.C. Hege

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

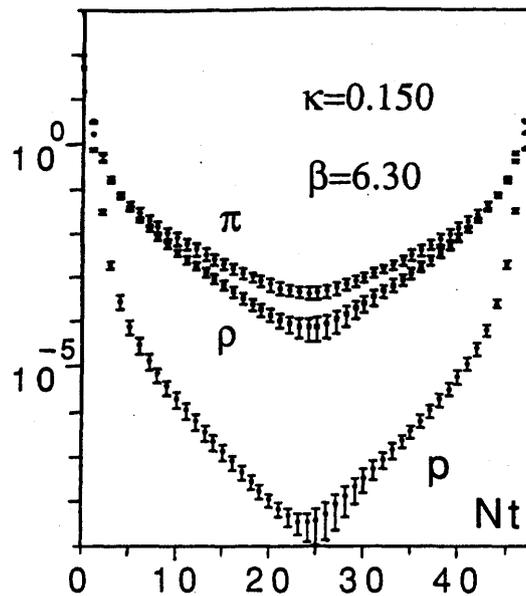
**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die Quantenchromodynamik beschreibt die starke Wechselwirkung, eine der vier fundamentalen Naturkräfte, welche unter anderem für den Zusammenhalt von Quarks in Hadronen verantwortlich ist. Ausgehend von der physikalisch motivierten Pfadintegralformulierung erhält man durch Fortsetzung zu imaginären Zeiten Funktionalintegrale mit mathematisch definiertem Maß und durch "Regularisierung" eine Theorie mit endlichen Größen. Eine mögliche Regularisierung ist die Diskretisierung von Raum und Zeit. Sie erhält die Eichsymmetrie und ermöglicht numerische Untersuchungen zu physikalisch bedeutsamen, analytisch jedoch unzugänglichen Phänomenen, wie etwa dem Quark-Einschluß. Durch die Diskretisierung zerstörte Eigenschaften der Theorie, wie etwa die Lorentz-Invarianz, hofft man in einem geeigneten Kontinuumslimit, bei dem der Gitterabstand gegen Null geht und die Kopplungskonstanten der Theorie geeignet justiert werden, wiederzugewinnen. Die sogenannte  $\beta$ -Funktion gibt an, wie die Eichfeldkopplung in Abhängigkeit vom Gitterabstand oder Impuls-Cutoff zu variieren ist.

In unseren Untersuchungen wurde für die reine SU(3)-Gittereichtheorie das Verhalten der  $\beta$ -Funktion bei kleinen Eichfeldkopplungen durch Renormierungsgruppenanalyse bestimmt. Desweiteren wurden die Massen der  $\pi$ - und  $\rho$ -Mesonen sowie des Protons auf einem  $32^4 * 48$ -Gitter gemessen. Bei der gewählten Kopplung entspricht die Gittergröße einem Raum-Zeit-Volumen von ca.  $(2.3 \text{ fm})^3 * 1.1 * 10^{-23} \text{ s}$ .

Die numerische Aufgabenstellung, Berechnung von ca.  $10^7$ -dimensionalen Integralen auf Gruppen-Mannigfaltigkeiten sowie von Spalten der Inversen einer nicht-hermiteschen Bandmatrix gleicher Dimension, wurde durch Monte-Carlo-Integration (Pseudo-Wärmebad-Methode mit Überrelaxation) sowie einem Conjugate-Residual-Verfahren mit Vorkonditionierung gelöst. Programme für einen MIMD-Rechner mit verteiltem Speicher (Fujitsu AP1000, 512/1024 SPARC-Prozessoren, 8/16 Gbyte Hauptspeicher) wurden neu entwickelt. Programmentwicklung und Simulationen wurden per Netzzugang im Entwicklungslabor von Fujitsu (Tokio) durchgeführt.

## Literatur

- [1] K. Akemi, Ph. deForcrand, M. Fujisaki, T. Hashimoto, H.C. Hege et al.: *QCD on the Highly Parallel Computer AP1000*. Nuclear Physics B (Proc. Suppl.), to appear.
- [2] K. Akemi, Ph. deForcrand, M. Fujisaki, T. Hashimoto, H.C. Hege et al.: *SU(3) Renormalization Group Study on Parallel Computer AP1000*. ibd.
- [3] K. Akemi, Ph. deForcrand, M. Fujisaki, T. Hashimoto, H.C. Hege et al.: *Hadronic Spectroscopy on a  $32^3 * 48$  Lattice*. ibd.



Hadronpropagatoren für Pion, Rho und Proton.

## Scientific Visualization

**Bearbeiter:** H.C. Hege, H. Jaedicke, M. Klatte, J. Langendorf, O. Paetsch, R. Wunderling

**Kooperation:** M. Rumpf (SFB 256, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Bonn), J. Berton (Ohio Supercomputer Graphics Project, Ohio State University), W. Baumann, E. Gürgey, M. Morzynski, F. Thiele (Hermann Föttinger Institut für Thermo- und Fluidodynamik, TU Berlin), H. Stüben (Institut für Theoretische Physik, FU Berlin)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Ziele der Gruppe Visualisierung in der neugegründeten Abteilung 'Visualisierung und Paralleles Rechnen' sind der Aufbau einer adäquaten Infrastruktur, die Auswahl, Beschaffung und Anpassung geeigneter Fremdsoftware, die ergänzende Entwicklung eigener Visualisierungssoftware, die Durchführung von Visualisierungsprojekten und, soweit die personellen Gegebenheiten es zulassen, die Bearbeitung von Forschungsthemen, die sich aus den Anwendungen ergeben.

Im Berichtsjahr standen zunächst die Infrastruktur-Maßnahmen im Vordergrund. Es wurden dedizierte Grafikrechner, Farbdrucker, Filmbelichter und Komponenten einer Videoaufzeichnungsanlage ausgewählt, beschafft und in Betrieb genommen.

Auf Seite der Software wurde angestrebt, den beiden Grundforderungen, nach Software zur Durchführung von Visualisierungsprojekten und nach einer portablen, aber modernen Grafik-Basisbibliothek sowie darauf aufbauenden höheren Funktionen gerecht zu werden.

Ersteres läßt sich wegen der weitgespannten Funktionalität, vom 2D-Plot bis hin zum fotorealistischen Rendering, derzeit nur durch eine heterogene Vielfalt von Programmsystemen abdecken, die zudem an unterschiedliche Hardware-Plattformen gebunden sind. Dazu wurden nach Evaluation der Bedürfnisse, bestehende Eigenentwicklungen (z.B. GRAZIL und GRAZIL-3D) gezielt verbessert und Lücken durch Fremd-Software (u.a. apE, GRAPE, Rayshade und Gnuplot) geschlossen. Teile der Eigenentwicklungen wurden auch an andere wissenschaftliche Institute in Berlin (Wissenschaftskolleg, BAM) weitergegeben. Die von der Ohio State University stammende Visualisierungsumgebung apE ist ein interaktives, modular aufgebautes, offenes System und wurde hauptsächlich zur Visualisierung von Skalar- und Vektorfeldern verwendet. Nach Erweiterung um neue Module (z.B. zur Interpolation von Daten auf einem krummlinigen Gitter, zur Berechnung von Flußlinien in Vektorfeldern und zur Überlagerung von Raster- und Vektorgrafik) wurden in Zusammenarbeit mit dem Hermann-Föttinger-Institut Tragflügelumströmungen visualisiert. Zur Darstellung von Lösungen partieller Diffe-

rentialgleichungen im 2- und 3-D-Bereich wurde das an der Universität Bonn entwickelte Visualisierungsprogramm GRAPE eingesetzt. GRAPE stellt neben einem fertigen Programm eine objektorientierte Programmierumgebung (Klassenbibliothek) zur Verfügung. Zur bequemen Darstellung der Lösungsfunktionen von PDEs wurde ein auf GRAPE aufbauendes Programm entwickelt. Es ist geplant, in Zusammenarbeit mit den Autoren von GRAPE, die bei der numerischen Berechnung sich ergebenden, hierarchischen Gitterstrukturen für die Grafik nutzbar zu machen.

Die Grundforderung nach einer portablen Basis-Grafiksoftware zielt darauf, am ZIB entwickelte und zur Weitergabe bestimmte mathematische Software mit Grafikfunktionen auszustatten, ohne dabei auf eine Hardware-Plattform festgelegt zu sein. Derzeit stehen nur die genormten Funktionsbibliotheken GKS und PHIGS sowie der Quasi-Standard Xlib (zum X11-Protokoll gehörende 2D-Bibliothek) auf einer breiten Palette von Hardware-Plattformen zur Verfügung. Diese werden heutigen Grafik-Bedürfnissen jedoch nicht vollständig gerecht. Mit der Eigenentwicklung AGIL machten wir den Versuch, auf Basis von PHIGS+, einer sich zur Zeit in der Normung befindlichen Erweiterung von PHIGS, eine portable und erweiterbare Visualisierungsumgebung zu erstellen. Parallel zur Weiterentwicklung des AGIL-Kerns wurden Module entwickelt, die Zwischenergebnisse aus dem Programmpaket Kaskade direkt an AGIL übermitteln und eine interaktive Darstellung von PDE-Lösungen erlauben. Aus dieser Anwendung resultierende Anforderungen flossen in die Weiterentwicklung des AGIL-Kernes ein. Kein Hersteller bietet derzeit perfekte PHIGS+-Implementierungen, was die Möglichkeiten von AGIL noch limitiert. Falls sich PEX (die Erweiterung des X-Protokolls um 3D-Funktionalität sowie mit PHIGS+ als Programmierschnittstelle) am Markt durchsetzt, ist geplant, AGIL auf PEX aufzusetzen. Im nächsten Jahr werden die Vervollständigung und weitere Verbesserung der Visualisierungssoftware, die Durchführung von Visualisierungsprojekten und daraus abgeleitete Entwicklungs- und Forschungsaufgaben im Vordergrund stehen.

## Verlustfreie Bilddatenkompression

Bearbeiter: H.C. Hege, D. Stalling

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Der Speicherplatzaufwand für Rastergrafiken ist ein nicht unerheblicher Zeit- und Kostenfaktor in der Computergrafik. Ein einzelnes Bild in Videoauflösung hat bei 24 Bit Farbtiefe eine Größe von über einem MByte. Bei höheren Auflösungen, etwa für HDTV oder fotografischen Film, vervielfacht sich diese Zahl. Archivierung oder Netzübertragung von Filmsequenzen (25 Bilder/sec) erfordert daher eine Kompression der Bilddaten.

Für natürliche Bilder mit verrauschtem Untergrund und weichen Farbverläufen existieren leistungsfähige Kompressionsverfahren, die auf einer Transformation vom Orts- in den Frequenzbereich und dem Ausblenden unwichtiger Frequenzanteile beruhen. Verfahren dieser Art sind allerdings vom Ansatz her *verlustbehaftet*. Bei scharfen Kanten und Linien auf einem einfarbigem Hintergrund werden zum Teil deutlich sichtbare Störungen produziert. Solche Bildeigenschaften sind jedoch charakteristisch für computer-berechnete Bilder. Auch bei Bildern, die rechnerisch weiterbearbeitet werden, ist eine informationsmindernde Kompression oft nicht akzeptabel. In den letzten Jahren wurden eine Reihe von *verlustfreien* Verfahren mit jeweils spezifischen Vorzügen entwickelt – ohne jedoch dem Anwender Auswahlkriterien an die Hand zu geben. Ziel des Projektes war, eine geeignete *Kombination* verlustfreier Verfahren zu finden, die effizient, möglichst wenig rechenaufwendig und doch universell (auch im Bereich Scientific Visualization) einsetzbar ist.

Wir implementierten verlustfreie Verfahren sowie Kombinationen dieser und untersuchten deren Effizienz an einem ausgewählten Satz von Bildern. Die analysierten Verfahren umfaßten verschiedene Differenzenbildungen, bildspezifische Kodierungstechniken (z.B. Run-Length-Encoding, verschiedene Quad-Tree-Varianten, Kodierung von Farbkonturen), Standardverfahren (speziell statisches und adaptives Huffman-Encoding sowie den LZW-Algorithmus).

Im Durchschnitt erreicht man Kompressionsfaktoren von 5 – 10, mit relativ großen Abweichungen nach oben und unten, je nach Bildbeschaffenheit. Die Kodierung der Farbkonturen bringt oft etwas bessere Ergebnisse im Vergleich zu den anderen Verfahren. Doch steht dieser Vorteil in keinem Verhältnis zum höheren Aufwand an Rechenzeit. Als besonders praxistauglich erwies sich eine einfache Form der Differenzenbildung und anschließende Anwendung des LZW-Algorithmus.

## AGIL (The Adaptable Graphical Interface Layer)

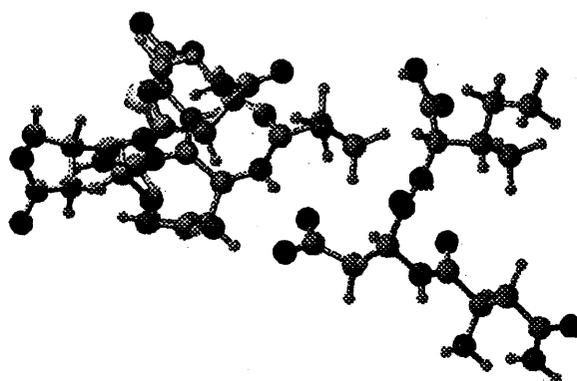
**Bearbeiter:** R. Wunderling, M. Klatte, H.C. Hege, M. Grammel

**Kooperation:** H. Stüben (Institut für Theoretische Physik, FU Berlin)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Rahmen dieses Projektes wird eine Visualisierungsumgebung entwickelt, die auf einfache Weise an beliebige Anwendungen gekoppelt und auf spezielle Bedürfnisse zugeschnitten werden kann. Die Ankopplung an Applikationen kann über Standard-UNIX-Pipes oder über Shared-Memory-Kommunikation realisiert werden – mit der Möglichkeit, Applikation und die Visualisierung auf verschiedene Computer zu verteilen. Steuer- und Datenpakete können in einer Datei mitprotokolliert werden, die anschließend als Bilddokument und/oder Eingabeskript verwendet werden kann. Gegenüber der im Vorjahr begonnen Version wurden die Programmierschnittstelle wesentlich verbessert und neben den Darstellungsfunktionen sogenannte Methoden (Module zur Datentransformation) eingeführt. Zur Erweiterung des Systems um eine eigene Darstellungsfunktion oder Methode ist nun in einer Spezifikationsdatei die Struktur der Eingabedaten anzugeben. Daraus wird maschinell der Rumpf des Quelltextes für das neue Modul generiert. Die Spezifikationsdatei dient außerdem zur Dokumentation vorhandener Tools.

### Literatur

- [1] R. Wunderling, AGIL Benutzer-Handbuch, ZIB (1991)
- [2] R. Wunderling, AGIL Programmierer-Handbuch, ZIB (1991)



Moleküldesign

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

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

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die Aktivitäten der seit November 1989 mit dem HMI bestehenden Kooperation Scientific Workstation (SWS) haben sich bisher auf die Unterstützung der Programmierung des Fernaufrufs mittels Remote Procedure Call (RPC) konzentriert. Ziel eines neuen Teilprojektes ist die Realisierung von parallelem und verteiltem Rechnen im heterogenen Rechnernetz unter Ausnutzung von freien Workstation-Kapazitäten und vorhandenen Vektorrechnern sowie dem Einsatz von massiv parallelen Rechnern mit demselben Softwaresystem. Dieses System soll sowohl eine Entwicklungs- als auch eine Produktionsumgebung bereitstellen. Zum Ende des Berichtszeitraums wurde ein Phasenplan erstellt, der eine Evaluierung von neuen Entwicklungs- und Laufzeit-Umgebungen für verteilte Anwendungen im heterogenen Rechnernetz vorsieht. Als Beispielanwendung wurde ein aus dem Bereich der kombinatorischen Optimierung stammendes Branch-and-Cut-Framework ins Auge gefaßt, sowie ein Programmpaket zur Analyse und Visualisierung von mehr-atomigen Clustern. Anhand der Verteilung dieser Anwendungen sollen Praxistauglichkeit wie auch die Grenzen solcher Systeme untersucht werden. Zu einem späteren Zeitpunkt sollen weiterführende Teilprojekte aufgesetzt werden.

## Parallelisierung/Vektorisierung irregulärer iterativer Algorithmen

**Bearbeiter:** H.C. Hege

**Kooperation:** H. Stüben (Institut für Theoretische Physik, FU Berlin)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Effiziente Implementierungen von Algorithmen, die auf irregulär strukturierten Daten (z.B. nicht-uniformen Gittern) operieren, sind auf Vektor- oder Parallelrechner-Architekturen oft schwierig zu realisieren. Da insbesondere die modernen Rechenverfahren (durch Adaption an die Struktur des zu lösenden Problems) auf solchen Daten arbeiten, ist die Unterstützung der parallelen Ausführung auch bei Vorliegen irregulärer Datenabhängigkeiten ein aktuelles Forschungsziel. Das Problem berührt die algorithmische, sprachliche und maschinelle Ebene.

Eine wichtige Klasse von Algorithmen stellen iterative Algorithmen dar. Besondere Bedeutung haben Iterationsschemata, die in jedem Schritt die jeweils neuesten Informationen zu nutzen suchen. Das hat meist günstigere Konvergenzeigenschaften zur Folge oder garantiert, wie etwa im Falle von mit Markov-Ketten arbeitenden Monte-Carlo-Verfahren, erst deren Korrektheit. Andererseits führt die Nutzung neuester Informationen zu komplexeren Datenabhängigkeiten zwischen den Einzelschritten des Algorithmus und erschwert somit eine Parallelisierung oder Vektorisierung, insbesondere bei Vorliegen nicht-uniform strukturierter Daten.

Es wurde eine allgemeine Methode entwickelt, die erlaubt, auch in diesem Fall eine Parallelisierung oder Vektorisierung zu erreichen. Durch Färbung der Knoten eines die funktionalen Abhängigkeiten wiedergebenden Graphen wird eine Partitionierung der zugrundeliegenden Datenmenge in unabhängige Teilmengen gewonnen. Nun können auf *algorithmischer* Ebene durch Wahl geeigneter Ausführungsreihenfolgen die Datenabhängigkeiten so strukturiert werden, daß eine Parallelisierung oder Vektorisierung möglich wird.

Das Verfahren wurde praktisch eingesetzt, um eine physikalische Anwendung (Monte-Carlo-Simulation eines quantenfeldtheoretischen Modells) zu vektorisieren. Die Rechenzeit auf einem Cray-Vektorrechner von ursprünglich mehreren 100 Stunden konnte dadurch um den Faktor 10 reduziert werden.

### Literatur

- [1] H.C. Hege, H. Stüben: *Vectorization and Parallelization of Irregular Problems via Graph Coloring*. Proc. ACM Int. Conf. on Supercomputing, Cologne, Germany, pp. 47-56 (1991)

## Museumsdokumentation

**Bearbeiter:** C. Saro

**Kooperation:** Staatliche Museen Preußischer Kulturbesitz, Deutsches Historisches Museum

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Zwischen dem ZIB und dem Institut für Museumskunde der Staatlichen Museen Preußischer Kulturbesitz (IfM) besteht seit 1981 eine vertragliche Zusammenarbeit. Im Rahmen dieser Kooperation wurden mehrere Projekte zum Computer-Einsatz im Museumsbereich (besonders bei der Inventarisierung und Dokumentation) durchgeführt.

1991 wurde zusammen mit den Museumsämtern der Landschaftsverbände Rheinland und Westfalen-Lippe ein Projekt beschlossen, bei dem die Computer-gestützte Inventarisierung an einigen Museen der betreffenden Regionen erprobt werden soll. Mit den gleichen Partnern wurde von 1984-1987 bereits ein ähnliches Projekt durchgeführt. Während damals die Interessen eines Zentralarchivs im Mittelpunkt standen, soll diesmal dezentral an den Einzelmuseen gearbeitet werden. Obwohl die Aufgaben des Instituts für Museumskunde eher bei der Beratung solcher regionalen Einrichtungen liegen, gibt es inzwischen auch eine enge Zusammenarbeit mit einigen Abteilungen der Staatlichen Museen zu Berlin. Für das Museum für Völkerkunde wurde z.B. ein Programm entwickelt, welches die Rückführung von während des Kriegs ausgelagerten Beständen (etwa 50.000 Objekte) erleichtert. Seit September 1991 besteht ein weiterer Kooperationsvertrag mit dem Deutschen Historischen Museum, bei dem es ebenfalls um ein Inventarisationsprojekt geht - hier allerdings für ein einzelnes großes Museum mit einer umfangreichen Sammlung von mehr als 400.000 Objekten aus dem ehemaligen Museum für Deutsche Geschichte. Als Basissoftware für all diese Projekte wurde das von der britischen MDA (Museum Documentation Association) speziell für den Museumsbedarf entwickelte Programmsystem GOS übernommen. GOS ermöglicht die Verarbeitung von sehr komplex strukturierten Datenbeständen, wie sie für eine Beschreibung von kulturhistorischen Objekten notwendig sind. In den letzten Jahren wurde dieses Programm am ZIB erheblich weiterentwickelt, wodurch einerseits die Leistungsfähigkeit und die Bedienerfreundlichkeit verbessert werden konnten, andererseits die Hardware-Plattform stark erweitert wurde. GOS ist inzwischen auf allen PC's (unter MS-DOS, OS/2 oder SCO-UNIX) sowie auf zahlreichen UNIX-Workstations mit identischem Funktionsumfang und einer sehr ähnlichen Benutzeroberfläche (nach dem SAA-Standard von IBM) verfügbar.

## **Technische Basis für symbolisches Rechnen im Hochleistungsbereich**

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

**Kooperation:** University of Utah mit Unterstützung von: Cray Research Inc, Digital Equipment, Hewlett Packard, Data General, Control Data, International Business Machines (IBM).

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die symbolischen Rechenverfahren benötigen generell erhebliche Ressourcen an CPU-Zeit und Speicherplatz. Dies gilt besonders für die Algorithmen der symbolischen Mathematik (Computer-Algebra, Formelmanipulation), aber auch für komplexe Expertensysteme, z.B. für die Modellierung technischer Systeme. Die Prozessorentwicklungen der letzten Jahre haben sehr leistungsfähige Systeme für den Workstation Bereich erbracht. Diese neuen Systeme werden häufig als RISC Prozessoren bezeichnet. Mit diesen Prozessoren und mit den großen dafür lieferbaren Hauptspeichern werden die Einsatzmöglichkeiten für komplexe Rechenverfahren drastisch erweitert, da die notwendige hohe Rechenleistung (verhältnismäßig) billig am Arbeitsplatz zu erhalten ist.

Zugleich hat es sich herausgestellt, daß auch ältere Mainframe Systeme (wie z.B. DEC VAX oder IBM /370) unter den Anwendern des Computer Algebra Systems REDUCE (noch) weit verbreitet sind. Es lag daher nahe, auch für die Mainframe Systeme das LISP System zu aktualisieren und zu vertreiben. Wir konnten dabei auf ältere Versionen des LISP Systems von der University of Utah bzw. der Stanford University zurückgreifen.

Im ZIB wird als Basis für derartige Anwendungen das Programmiersystem Portable Standard LISP ("PSL") eingesetzt, dessen Entwicklung Anfang der achziger Jahre an der Universität Utah begann. PSL zeichnet sich im Vergleich mit anderen LISP Dialekten vor allem durch seine hohe Ausführungsgeschwindigkeit aus. PSL baut auf einem in LISP selbst codierten Compiler auf, dessen Code-Generierung in einem separaten makro-orientierten Modul zusammengefaßt ist. Für eine neue Architektur ist es notwendig, den Code-Generator auszuwechseln sowie die Bearbeitung der Datenstrukturen des Systems für das LISP System anzupassen. Im ZIB ist es gelungen, Code-Generatoren für fast alle modernen Architekturen zu erstellen, die durch besondere Berücksichtigung der jeweiligen architekturellen Besonderheiten die Leistungsfähigkeit der Prozessoren voll ausschöpfen. Es ist das Ziel, qualitativ hochwertige PSL-Implementierungen auf möglichst vielen wichtigen Rechnerarchitekturen bereitzustellen; nicht zuletzt wegen der Unterstützung der Rechnerhersteller ist das ZIB diesem Ziel im Bereich der Superrechner und der leistungsstarken Workstations näher gekommen.

PSL ist beim ZIB jetzt verfügbar für:

386i :	IBM PS/2 (PC/DOS, AiX), AT386 oder AT486 (MS/DOS incl. MS-Windows, UNIX)
680x0:	SUN 3, NeXT, HP 9000-300/-400
SPARC:	SUN4, SparcStations, Sparcserver und kompatible Systeme
MIPS:	DEC Series 2000/3000/5000, Silicon Graphics IRIS, CDC 4000 Series, Stardent
MC88000:	Data General AViiON
CONVEX:	C100, C200, C300
Cray Prozessoren:	Cray X-MP, Y-MP
IBM /370:	IBM 3090 (MVS, AiX, VM) und kompatible Systeme
IBM Risc:	IBM RS/6000 Serie
HP-PA :	Hewlett-Packard 800 und 700 series
VAX:	Digital Equipment VAX (unter VMS oder Ultrix)

Die qualitative und quantitative Verbreiterung der PSL-Basis kommt primär dem System REDUCE zugute; es gibt jedoch noch weitere symbolische Softwarepakete, die auf PSL aufbauen und die somit auch von der Arbeit des ZIB profitieren.

An der University of Utah wird basierend auf den im ZIB entwickelten PSL Programme ein System zur Bildverarbeitung benutzt bzw. (weiter-) entwickelt.

## Symbolische Modellierung chemischer Reaktionssysteme

**Bearbeiter:** H. Melenk

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

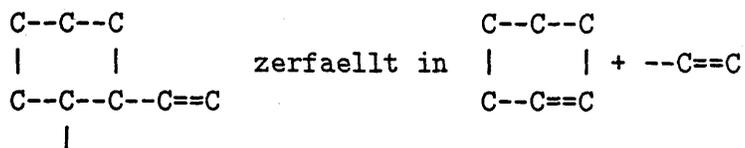
**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Bei der numerischen Simulation technischer Verbrennungsvorgänge zwecks Optimierung treten mit wachsender Verfeinerung der zu Grunde gelegten Modelle immer mehr mathematisch zu berücksichtigende Komponenten auf, so daß es zunehmend schwieriger wird, die Modellgleichungen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

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

Schon im Vorjahr hatte sich beim Vergleich von modellhaften experimentellen Resultaten mit handcodierten und automatisch konfigurierten Simulationen die größere Genauigkeit des automatischen Ansatzes herausgestellt. Es wurden auch schon Modelle mit mehr als 1000 Reaktionstypen aufgestellt, also in einer Größenordnung, die von Hand nicht mehr erreichbar ist. Im Berichtsjahr wurden für die Verbrennung nun weitere Regeln hinzugenommen, die dem Anwender das Experimentieren mit verschiedenen Reaktionsmodellen ermöglichen.

Zusätzlich wurde begonnen, auch die Reaktionen der Pyrolyse von Kohlenwasserstoffen mit einzubeziehen. Dieser Bereich unterscheidet sich von den bisher bearbeiteten Systemen primär dadurch, daß nun auch zyklische Moleküle behandelt werden müssen.

## Beispiel



Es wurde zunächst versucht, die Ringmoleküle auch als binäre Bäume darzustellen, indem die Kreisverbindungen durch spezielle "Klebelemente" codiert werden. Diese Darstellung hat viele Vorteile bei der Mustererkennung; es ist jedoch absehbar, daß für einige Problemstellungen zusätzliche Strukturen aufgebaut werden müssen. Bis zum Ende des Berichtsjahres wurde ein erster Satz von generierten Pyrolyse-Reaktionen erzeugt und von den Chemikern einer Revision unterzogen.

Das Programmpaket wurde zwischenzeitlich auch an mehrere Partner in Deutschland und den USA weitergegeben.

## **Modellierung und Simulation von Butadien mit Ziegler-Natta-Katalysatoren auf der Basis von Neodym**

**Bearbeiter:** J. Ackermann, M. Wulkow

**Kooperation:** P. Marquardt, K.H. Reichert (Institut für Technische Chemie, TU Berlin)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Der für die Herstellung von Autoreifen verwendete Synthetikgummi Polybutadien wird durch Polymerisation von Butadien mit einem relativ neuartigen Ziegler-Natta-Katalysator auf der Basis von Neodym hergestellt. Die Kinetik und die Molmassenverteilung dieser Polymerisation werden an der TU Berlin in Zusammenarbeit mit der Bayer AG Dormagen untersucht. Durch die Polymerisation von Butadien in einem rechnergestützten Laborreaktor erhält man die Konzentration von Monomer und Polymer über der Zeit, durch die Messung der Molmassenverteilung von während der Polymerisation gezogenen Proben mit der Gelpermeations chromatographie (GPC) erhält man die Molmassenverteilungen zu diskreten Zeitpunkten. Zum Verständnis und zur Optimierung der ablaufenden Prozesse sollen diese mittels eines auf einem Reaktionsmechanismus basierenden Modells beschrieben werden. Die Modellierung der Polymerisation führt zu einem Reaktionssystem mit 4 verschiedenen Polymerspezies und damit zu einem abzählbaren System gewöhnlicher Differentialgleichungen. Zur Lösung dieses System wurde die diskrete Galerkin Methode basierend auf der ein-parametrischen Schulz-Flory-Wichtungsfunktion und der Linienmethode benutzt. Dies ist aufgrund des dort verwirklichten chemischen Compilers eine Standardanwendung des am ZIB entwickelten Programms MACRON. Für spezielle Bedürfnisse wurden zusätzliche Ausgabemöglichkeiten in das Programm implementiert. Es zeigt sich, daß eine Benutzung des Programms in der in SC 90-14 beschriebenen Form für Anwender einfach möglich ist. Unterstützung von Seiten des ZIB ist jedoch in Bezug auf methodische und numerische Fragestellungen möglichst schon in der Anfangsphase der Modellierung sinnvoll. Bei der Modellrechnung bestätigt sich die prinzipielle Annahme eines Zweizentrenmodells, wobei für eine vollständige Beschreibung der Polymerisation eine Verfeinerung des Modells (Parameteridentifikation) geplant ist.

### **Literatur**

- [1] P. Marquardt, A. Proß, K.H. Reichert, T.K. Knauff, W. Nentwig: International Poster Symposium on Advances in Olefine, Cycloolefin and Diolefin Polymerization, Lyon (1992)

## **Modellierung und Simulation der Ethylenpolymerisation mit auf Aluminiumpartikeln fixierten Titan-Katalysatoren**

**Bearbeiter:** J. Ackermann, M. Wulkow

**Kooperation:** A. Schnauß, K.H. Reichert (Institut für Technische Chemie, TU Berlin)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Für die Untersuchung der Herstellung des Massenkunststoffes Polyethylen wurde an der TU Berlin ein heterogener Modellkatalysator entwickelt. Bei diesem System können Porendiffusion und Katalysatorkornzerkleinerung ausgeschlossen werden. Analog zu Marquardt und Reichert wurden Kinetik und Molmassenverteilungen erhalten, die mechanistisch beschrieben werden sollen. Mit Macron wurden verschiedene Reaktionsmodelle getestet und umfangreiche Simulationen durchgeführt. Es konnte gezeigt werden, daß die Polymerisation mit einem 3-Zentren-Kaskaden-Modell beschrieben werden kann. Dabei wird Titan als Träger des aktiven Zentrums sukzessive von der Oxidationsstufe 4 zur Oxidationsstufe 1 reduziert, wobei jeweils die wachsende Kette abbricht. Die Wachstumsgeschwindigkeit sinkt mit der Oxidationsstufe.

## **Hyperthermie-Planung**

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

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

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Rahmen der klinischen Hyperthermie sollen Krebstumore mittels gezielter Überwärmung, durch Bestrahlung mit Mikro- bzw. Radiowellen, zerstört werden. Schon seit längerem wird in Zusammenarbeit von ZIB und Universitätsklinikum Rudolf Virchow an der Software-Entwicklung für die Hyperthermie-Planung gearbeitet. Langfristiges Ziel des Projektes ist die patientenspezifische Optimierung der E-Feld-Verteilung und der daraus resultierenden Temperaturverteilung im menschlichen Körper.

Für den räumlich zweidimensionalen Fall wurden die Arbeiten an einem Programmpaket abgeschlossen, mit dem sich eine vollständige Hyperthermie-Planung durchführen läßt. Eine solche Planung besteht aus folgenden Schritten:

- Generierung eines Finite-Elemente (FE)-Dreiecksgitters auf der Basis von Patienten-Schnittbildern, die mit Hilfe der Computertomographie (CT) gewonnen werden.
- Berechnung der Verteilung des elektrischen Feldes im Körper des Patienten. Als Modell für den Wärmetransport im Körper dient die sogenannte Bio-Heat-Transfer-Equation. Zur Lösung dieser Gleichung wird im stationären (zeitunabhängigen) Fall das Programm KASKADE, im instationären Fall das Programm KASTIO2 benutzt.

Zur Optimierung der 2-D-Temperaturverteilung wurde ein spezielles, problemangepasstes Verfahren implementiert. Da innerhalb der Optimierungsschleife mehrfach Feld- und Temperaturberechnungen durchgeführt werden müssen, ist die für die einzelnen Schritte erzielte Effizienzsteigerung von großer Bedeutung. Eine Publikation zur 2-D-Optimierung [2] erschien Anfang 1991. Sie wurde mit dem Lund Science Award der European Society for Hyperthermic Oncology ausgezeichnet.

Der Schwerpunkt der Arbeit im Jahre 1991 bestand darin, die einzelnen Schritte der Hyperthermie-Planung auf den 3-D-Fall zu erweitern.

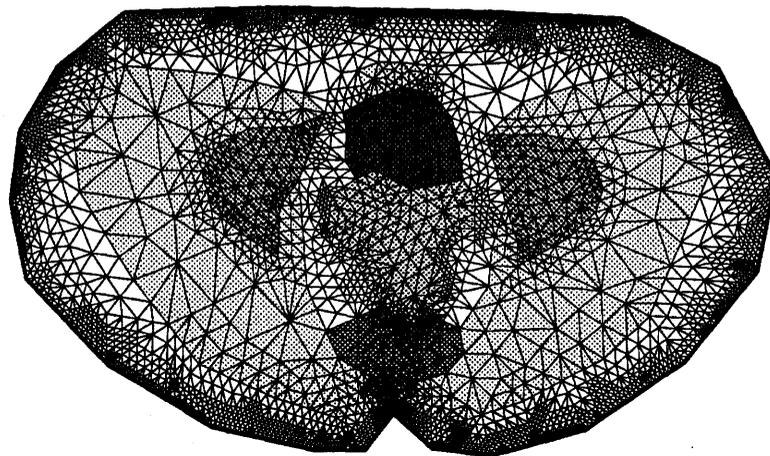
**Gittergenerierung.** Die 3-D-FE-Gitter werden aus Tetraeder-Elementen aufgebaut. Grundlage ist wiederum ein Satz von CT-Schnittbildern des Patienten. Es werden zunächst für eine Reihe von Schichten 2-D-Dreiecksgitter erzeugt. Dann wird der Raum zwischen den Schichten mit Tetraeder-Elementen ausgefüllt. Die besondere Schwierigkeit bei der Generierung patientenspezifischer 3-D-Gitter besteht darin, daß geometrisch sehr komplexe Gebilde diskretisiert werden müssen, gleichzeitig aber die Zahl der Knoten und Tetraeder im Grundgitter möglichst klein sein soll. Wie die nachstehende Abbildung zeigt, ist das Programm in der Lage, ein Objekt wie den Beckenknochen eines Patienten mit all seinen Verzweigungen zu diskretisieren. Allerdings erfordert die Gittergenerierung derzeit noch eine recht große Zahl von interaktiven Eingaben. Ziel der weiteren Entwicklungsarbeit wird es sein, die Gittergenerierung weitgehend zu automatisieren.

**Feldberechnung.** Im 3-D-Fall läßt sich die Feldverteilung wiederum durch eine Integralgleichung beschreiben, die sogenannte Volume Surface Integral Equation (VSIE). Diese wurde auf den oben beschriebenen 3-D-FE-Gittern implementiert, d.h. es wurden Tetraeder als Volumen- und Dreiecke als Flächenelemente gewählt. Es wurden verschiedene Verfahren zur iterativen Lösung der VSIE untersucht. Eine erste entscheidende Rechenzeitbeschleunigung wurde durch den Einsatz des Verfahrens GMRES (SAAD/SCHULTZ) erzielt. Als typische Testfälle für die 3-D-Feldberechnungen wurde eine geschichtete Kugel und ein geschichteter Zylinder betrachtet, auf die jeweils eine ebene Welle fällt. Der Vergleich der VSIE mit anderen numerischen Verfahren zeigte eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse schon bei relativ groben 3-D-Gittern und (besonders für die Kugel) eine schnelle Konvergenz des iterativen Lösungsverfahrens. Die nächsten Aufgaben im Rahmen der Feldberechnung sind die Erweiterung auf Gitter mit größerer Elementenzahl, schließlich auf patientenspezifische 3-D-Gitter und eine weitere Beschleunigung der iterativen Lösung.

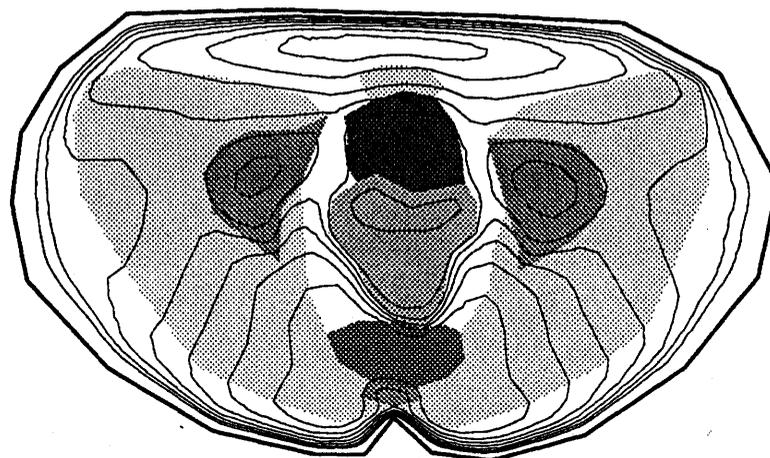
**Temperaturberechnung.** Im Berichtszeitraum wurde das Programm KASTIO2 [1] für die Berechnung der zeitabhängigen Bio-Heat-Transfer Gleichung in der Hyperthermie spezifiziert. Da bei dieser Gleichung die Zeitableitung mit einer unstetigen ortsabhängigen Funktion multipliziert ist, mußten Theorie, Algorithmus und Programm dieser Situation angepaßt werden. Dabei treten hohe Größenordnungsunterschiede der einzelnen Koeffizienten auf, die eine genaue Betrachtung der Zeitskalierung erforderlich werden ließen. Dieses Problem konnte mit Forderungen, die sich aus der effizienten Lösung der ortsabhängigen Probleme ergeben, gelöst werden. Das Programm erlaubt es, die einstündige Behandlung eines Patienten mit 2D-Computertomographie-Daten in ca. 5 Minuten (siehe Abb.) zu simulieren.

## Literatur

- [1] F.A. Bornemann: *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations in Two Space Dimensions*. Dissertation, Freie Universität Berlin (1991)
- [2] P. Wust, J. Nadobny, R. Felix, P. Deuffhard, A. Louis, W. John: *Strategies for optimized application of annular-phased-array systems in clinical hyperthermia*. *Int. J. Hyperthermia* 7, p. 157-1773 (1991)



Triangulation für den 16. Zeitschritt,  $t = 53 \text{ min } 14 \text{ s}$ .



Isothermen (37 - 43°C) für  $t = 53 \text{ min } 14 \text{ s}$ .

## Numerische Simulation von epidemiologischen AIDS-Modellen

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

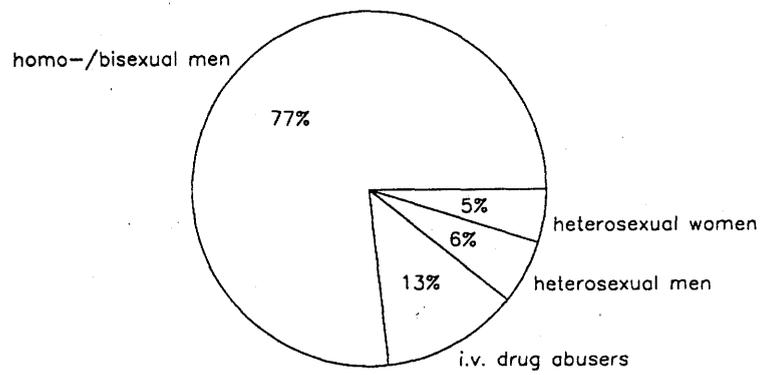
**Kooperation:** J. Weyer, B. Schmidt (Mathematisches Institut, Universität zu Köln)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Dieses Projekt wird vom ZIB in Kooperation mit der Universität Köln durchgeführt. Verantwortlich für die Modellierung ist J. Weyer, der zugleich ein Zuse-Fellowship innehat. Der Beitrag des ZIB bezieht sich im wesentlichen auf die effiziente numerische Simulation dieser Modelle. Durch die subtile Modellierung (9 Risikogruppen, 5 Krankheitsstadien, 50 bzw. 20 Altersklassen) entsteht ein System von  $n = 1650$  gewöhnlichen, jedoch steifen Differentialgleichungen.

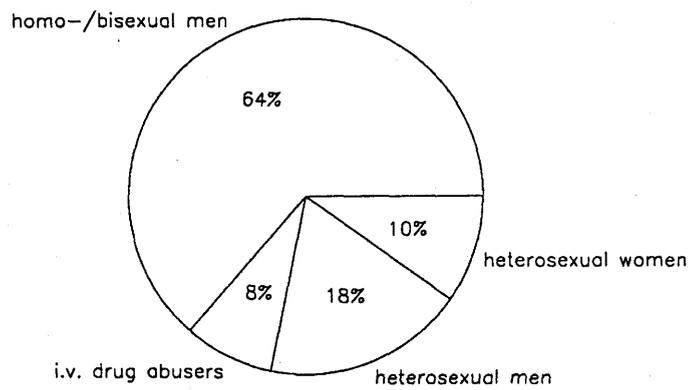
Im Verlauf der Kooperation konnte die Komplexität der Problemlösung in mehreren Schritten drastisch reduziert werden. So kann ein Simulationslauf nun innerhalb weniger Minuten auf einer Standard-Workstation durchgeführt werden – während zu Beginn der Kooperation Rechenzeiten von ca. einer Stunde auf dem Supercomputer des ZIB notwendig waren. Im Berichtszeitraum wurden, neben geringfügigen Verbesserungen der Integrationsmethode, hauptsächlich umfangreiche Parameterstudien durchgeführt, um Wirkung und Wichtigkeit etwaiger Änderungen im Sexualverhalten, der demographischen Entwicklung oder des Krankheitsverlaufs beurteilen zu können. Eine erste Zusammenfassung und Beurteilung der Resultate ist in der gemeinsamen Publikation [1] enthalten. Eine detaillierte Beschreibung der Modellierung und des Simulationsverfahrens findet sich ebenfalls in [1]. Ein wesentliches Ergebnis der Parameterstudie ist in den folgenden Abbildungen dargestellt. Selbst unter der optimistischen Annahme, daß sich die Infektionswahrscheinlichkeit pro Einzelkontakt, z.B. durch den Gebrauch von Kondomen, um  $1/3$  reduziert, erkennt man den wachsenden Anteil der heterosexuellen Bevölkerung an der Gesamtzahl der Erkrankten.

### Literatur

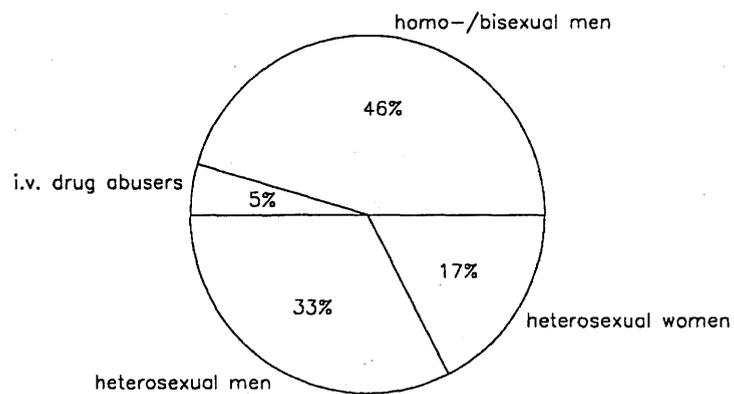
- [1] B.Ch. Schmidt, J. Weyer, P. Deuffhard, U. Nowak, U. Pöhle: *Die Ausbreitung von HIV/AIDS in Ballungsgebieten*, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (ZIB), Technical Report TR 91-9 (1991)



Anteil bestimmter Risikogruppen an den Erkrankungszahlen im Jahr 1990



Anteil bestimmter Risikogruppen an den Erkrankungszahlen im Jahr 2000



Anteil bestimmter Risikogruppen an den Erkrankungszahlen im Jahr 2010

## **Effiziente numerische Simulation von Verbrennungsprozessen**

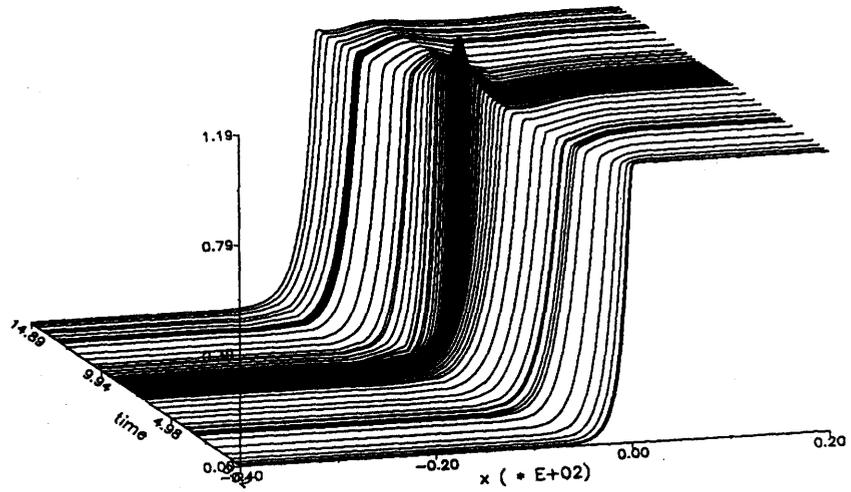
**Bearbeiter:** P. Deuffhard, U. Nowak, J. Lang, A. Walter

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

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

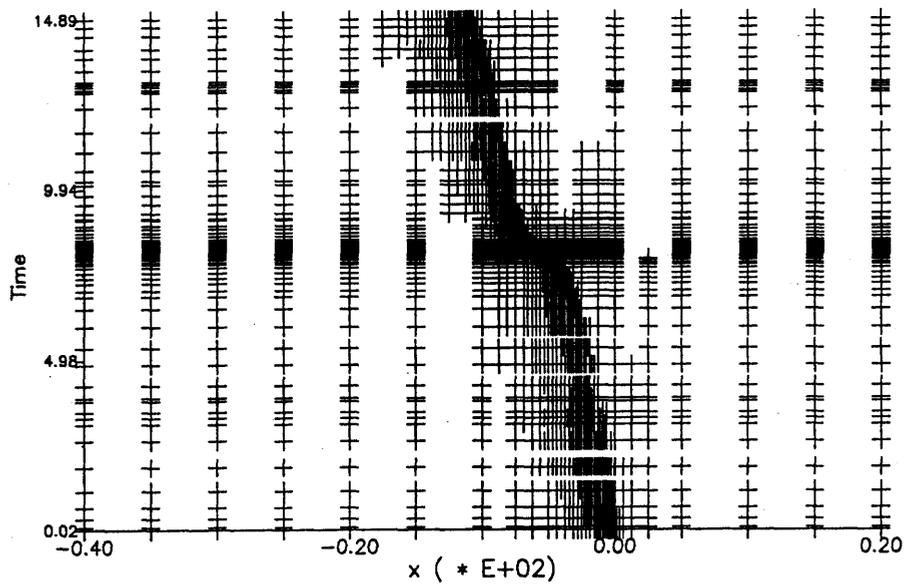
**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die in den letzten Jahren am ZIB entwickelten Extrapolationsverfahren werden bereits seit längerer Zeit erfolgreich als Integratorbaustein in Simulationspaketen eingesetzt, die vom Typ einer Linienmethode mit finiten Differenzen sind. Typischerweise treten bei der Simulation von Verbrennungsprozessen steile und eventuell wandernde Verbrennungsfronten auf. Deren Diskretisierung erfordert eine adaptive Ortsdiskretisierung. Die Wahl der Adaptionsstrategie und die Abstimmung mit der Zeitintegration sind von wesentlicher Bedeutung für die Effizienz und Robustheit des Gesamtverfahrens. Zur Lösung von 1-D-Problemen wurde der Experimentalcode PDEX1 (Nowak) entwickelt, in dem Orts- und Zeitdiskretisierung mit Hilfe von Extrapolationstechniken simultan kontrolliert und gesteuert werden. In Zusammenarbeit mit dem Institut für Chemische Verfahrenstechnik wurde damit begonnen, dieses Verfahren für die speziellen, dort auftretenden Anforderungen weiterzuentwickeln. Es sollen Modelle zur katalytischen Abgasreinigung in Festbettreaktoren simuliert werden und dabei treten die Behandlung von inneren Grenzschichten, die Erzeugung konsistenter Startdaten sowie das Bestimmen von lösungsabhängigen Schaltepunkten als besondere Schwierigkeit auf. Erste Resultate sind vielversprechend und sollen 1992 publiziert werden. Für viele Verbrennungsprobleme sind 2-D-Rechnungen erforderlich. Hier stößt man mit einer klassischen Linienmethode auf Tensorproduktgittern, wie sie etwa von Maas/Warnatz in ausgereifter Form verwendet wird, rasch an den Rand des Rechenbaren. Langfristigen Fortschritt verspricht der Einsatz von adaptiven Multilevelverfahren auf Finite-Elemente-Basis (siehe Grundlagenprojekt, Seite 16). Um die am ZIB bereits entwickelten Methoden für die hier vorliegende Problemklasse einsetzen zu können, bedarf es noch intensiver Grundlagenforschung. Immerhin wurde bereits ein raum- und zeitadaptiver Finite-Elemente-Forschungscode entwickelt und erprobt. Die verwendeten adaptiven Konzepte erwiesen sich gerade bei der Verfolgung von Flammenfronten den klassischen Linienmethoden überlegen (Publikation 1992 vorgesehen). Die Figuren 1 und 2 zeigen das Ergebnis einer typischen Simulation. Erst eine problemangepasste Orts- und Zeitsteuerung erlaubt eine derartig genaue Verfolgung der Flammenfront ohne unverhältnismäßig große Rechenzeiten.

*Moving Flame*



Entwicklung der Temperatur

*Moving Flame*



Entwicklung der Ortsgitter

## Wellenausbreitung in Komponenten der integrierten Optik

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

**Kooperationspartner:** H.-P. Nolting (Heinrich-Hertz-Institut Berlin)  
Das Projekt wurde durch die Deutsche Bundespost Telekom gefördert.

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die optische Nachrichtentechnik bietet mit Hilfe ihrer zentralen Komponente, der Glasfaser, die Möglichkeit der Übertragung sehr breitbandiger Signale. Für eine adäquate optische Signalverarbeitung werden in der Integrierten Optik Schaltkreise entwickelt, auf denen gleichzeitig optische und elektronische Komponenten integriert sind. Die Simulation der Lichtausbreitung in den optischen Komponenten erfolgt auf der Basis von Gleichungen des Helmholtz- bzw. Fresneltyps. Als Alternative zu den zeitaufwendigen konventionellen Verfahren wurde basierend auf [1] ein Algorithmus mit adaptivem Multilevelansatz und Schrittweitensteuerung implementiert. Diese erste Programmvariante basiert auf der Fresnelschen Wellengleichung und kann Probleme mit eindimensionalem Querschnitt behandeln. Die Anwendung der impliziten Mittelpunktsregel zur Diskretisierung in Ausbreitungsrichtung sichert lokal die Energieerhaltung. Es wurde eine Möglichkeit zur Minimierung des mit der Fresnelschen Wellengleichung prinzipiell verbundenen Modellfehlers gefunden. Die Ergebnisse wurden in [2] veröffentlicht.

Ein erster praktischer Einsatz des Programms erfolgte bei der Dimensionierung von Wellenleitertapern. Taper haben die Aufgabe, den Leuchtfleckdurchmesser eines Lichtstrahls gezielt und möglichst verlustfrei in einen anderen Durchmesser zu transformieren. Die Simulationsergebnisse zeigten, daß die Taperlänge als entscheidender konstruktiver Parameter gegenüber vorherigen Annahmen auf 10 - 20% ohne Qualitätsverlust reduziert werden kann und auch andere Materialzusammensetzungen und damit andere technologische Verfahren einsetzbar sind. Die ersten hergestellten Versuchsmuster von Wellenleitertapern bestätigen prinzipiell diese Ergebnisse.

Bild 1 zeigt die Intensitätsverteilung eines sich in z-Richtung ausbreitenden Laserstrahls, der in den Wellenleitertaper eingekoppelt wurde und dessen Fleckdurchmesser sich zum Ende der Struktur aufweitet. Bild 2 spiegelt den gleichen Sachverhalt wider, nur sind jetzt die automatisch erzeugten Knoten in das Diagramm eingetragen.

### Literatur

- [1] F.A. Bornemann: *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations II. Variable-Order Time Discretization Based on a Multilevel Error Correction*. IMPACT Comput. Sci. Eng. **3**, 93-122 (1991).
- [2] F. Schmidt: *An Adaptive Approach to the Numerical Solution of Fresnel's Wave Equation*. Preprint SC 91-12, ZIB (1991)

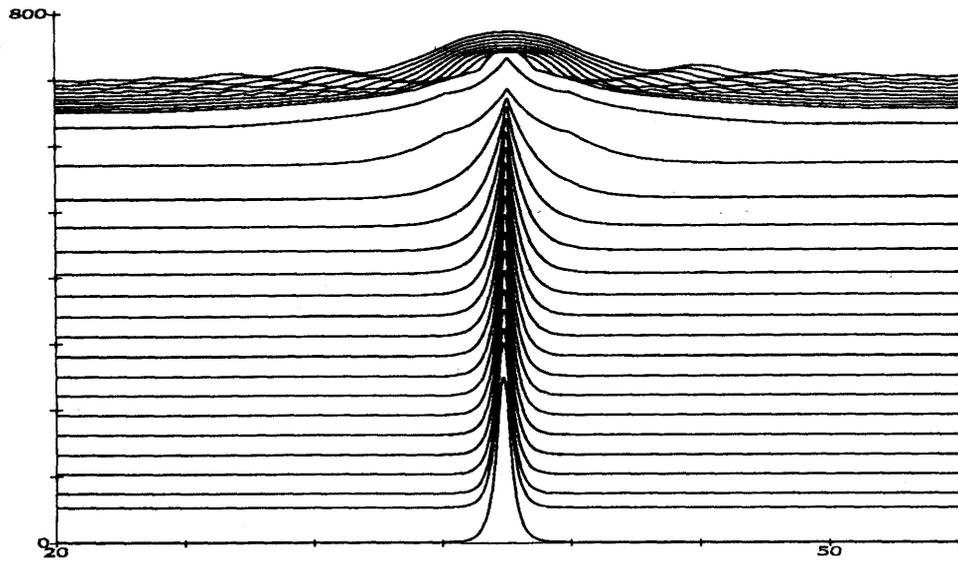


Bild 1 Intensitätsverteilung senkrecht zur Taperachse

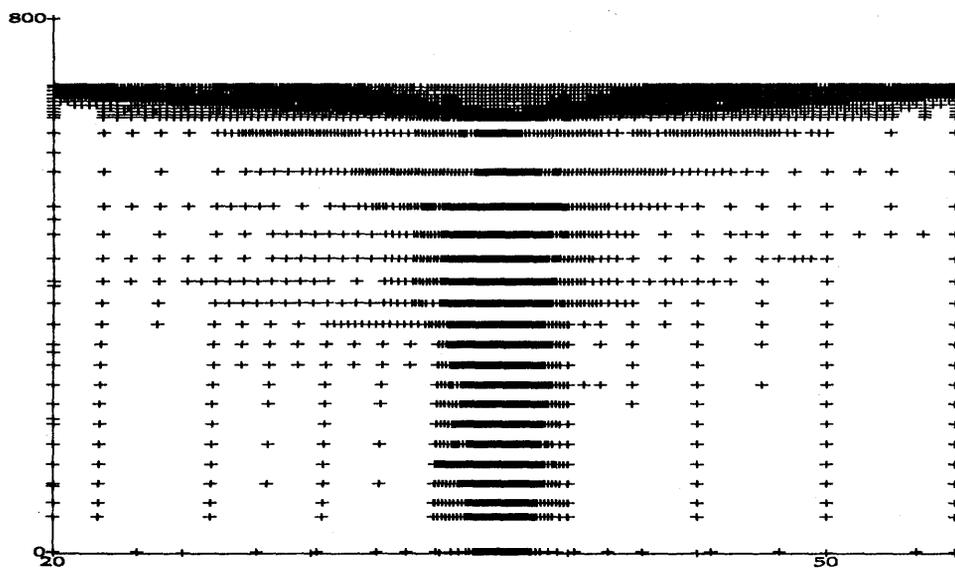


Bild 2 Knotenverteilung zu Bild 1

## Effiziente Berechnung der Durchbruchsspannung bei Hochleistungsbauelementen

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

**Kooperation:** W. Gerlach, E. Falck, E. Feiler (Institut für Werkstoffe in der Elektrotechnik, TU Berlin)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Das Projekt ist die Fortsetzung eines gleichnamigen Vorhabens aus dem Berichtsjahr 1990.

Hochleistungsbauelemente werden zum Schalten hoher Leistungen beispielsweise in Kraftwerken, Elektro-Lokomotiven oder Straßenbahnen eingesetzt. Die Optimierung der einzelnen Parameter, wie Geometrie oder Dotierung, hinsichtlich des Sperrverhaltens erfordert eine große Zahl von Modellrechnungen. Effiziente Algorithmen können den entsprechenden Zeitaufwand drastisch senken.

Mathematisch erfordert die Berechnung der Durchbruchsspannung die Lösung eines zweiseitigen Hindernisproblems für das Potential (siehe Grundlagenprojekt: Adaptive Verfahren zur Lösung freier Randwertprobleme). Als Parameter findet dann das Potential Eingang in die mathematische Modellierung der Stoßionisation. Die so berechneten Ionisationsraten sind ein Maß für das Sperrverhalten des Bauteils.

Im letzten Berichtsjahr wurden grundlegende Werkzeuge zur Lösung der Potentialgleichung bereitgestellt [1,3]. Aufbauend auf diese Ergebnisse wurde ein Algorithmus zur adaptiven Berechnung der Ionisationsraten entwickelt und implementiert. Im Rahmen der "4. Conference on Simulation of Semiconductor Devices and Processes" wurde der gesamte Algorithmus der Fachwelt vorgestellt [2].

Die Entwicklung einer Basis-Version des entsprechenden Anwenderprogramms BDKASK wurde damit abgeschlossen. Ein weiterer Ausbau hinsichtlich Effektivität und Benutzerfreundlichkeit erfolgt in Absprache mit den Kooperationspartnern.

### Literatur

- [1] R. Kornhuber, R. Roitzsch: *Self-Adaptive Computation of the Breakdown Voltage of Planar pn-Junctions with Multistep Field Plates*. Proceedings of the 4th International Conference of Simulation of Semiconductor Devices and Processes. (Fichtner et al., eds.) p. 535-543, Zürich, Switzerland (1991)

## Zugangssystem RJE-Tool für die Berliner Supercomputer

**Bearbeiter:** H.-H. Frese

**Kooperation:** J. Diemer (Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH), Prof. Dr. H. Godbersen (Technische Fachhochschule Berlin), T. Klinski (Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH/Technische Fachhochschule Berlin)

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Im Rahmen einer Diplomarbeit in Zusammenarbeit mit dem Fachbereich Informatik der Technischen Fachhochschule Berlin wurde für die Supercomputer im HMI und im ZIB ein Zugangswerkzeug für Batchverarbeitung mit komfortabler grafischer Benutzeroberfläche entwickelt.

Das System RJE-Tool gestattet das einfache Absenden eines Auftrags von einer UNIX-Workstation an einem Supercomputer. Es besteht aus einem auf der UNIX-Workstation ablaufenden Client, der die Aufträge an einen auf dem Supercomputer ablaufenden Server zur weiteren Bearbeitung übergibt und vom Server Statusinformationen über den Zustand der Aufträge erhält. Die auf der Basis von Open Windows realisierte Benutzeroberfläche des Clients vereinfacht die Handhabung des Systems wesentlich. Es stehen ein zum Open Windows kompatibler Texteditor zur Eingabe des Auftrags sowie Eingabefelder für die Anforderung von Betriebsmitteln mit Überprüfung der vom Zielsystem festgelegten Betriebsmittelgrenzen zur Verfügung. Die gesamte Steuerung des Clienten erfolgt wie unter Open Windows üblich mit Hilfe der Maus. Die Kommunikation zwischen dem Client und dem Server ist über Remote Procedure Call realisiert. Die Übertragung des Auftrags erfolgt wegen des hohen Durchsatzes über UNIX Sockets.

Im Rahmen der Diplomarbeit wurde ein Konzept für das System RJE-Tool unter Berücksichtigung von Systemsicherheit und Ergonomie entwickelt, die generelle Durchführbarkeit des Konzeptes gezeigt, sowie ein Prototyp mit allen wichtigen Funktionen realisiert. Das System wird im Folgejahr 1992 zu einer Produktionsversion weiterentwickelt.

## Berliner Software-Entwicklungs- und Testumgebung BERSET

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Ziel des Projektes BERSET ist die Entwicklung und Bereitstellung einer verteilten Programmentwicklungs- und Testumgebung für die Benutzer der Berliner Supercomputer. BERSET vereinigt die in den Phasen Implementierung und Systemtest des Software-Entwicklungsprozesses eingesetzten Werkzeuge (Editor, Compiler, Debugger, Performance Tools etc.) unter einer einheitlichen gemeinsamen Benutzeroberfläche.

Das BERSET-Schichtenmodell gestattet die einfache Anpassung an unterschiedliche Systemumgebungen durch Austausch der jeweiligen systemabhängigen Komponente(n).

Die Realisierung der grafischen Benutzeroberfläche erfolgt durch einen Display Manager, der mit dem Athena Widget Set des MIT auf der Basis von X-Window implementiert ist. Der Display Manager stellt die Verbindung zwischen dem Tool Manager und dem Basisgrafiksystem her. Ein Display Manager auf ASCII-Basis ist ebenfalls geplant.

Der weitgehend systemunabhängige Tool Manager steuert den Einsatz und Ablauf der einzelnen Programmierwerkzeuge. Die Einbindung der Werkzeuge über ein offenes Tool Interface erlaubt die Integration weiterer vom Benutzer bereitgestellter Werkzeuge. In einer späteren BERSET-Version wird es möglich sein, zusätzliche Werkzeuge dynamisch einzubinden.

Alle für die Programmentwicklung benötigten Dateien werden in einer gemeinsamen Datenbasis verwaltet, auf die der Tool Manager und die Tools zugreifen können.

Als verteilte Entwicklungsumgebung zwischen der lokalen Workstation und dem Supercomputer wird BERSET auch den verteilten Werkzeugeinsatz unterstützen. Dabei läuft die Implementierungsphase weitgehend auf der lokalen Workstation ab. Die Testphase mit Systemtest und Programmoptimierung findet dann auf dem Supercomputer statt.

Im Berichtszeitraum 1991 wurden zunächst ein Anforderungskatalog für BERSET erarbeitet sowie ein Produktmodell gemäß dem o.g. Schichtenmodell entwickelt. Die Entwicklung eines Prototyps zum Studium der wichtigsten Funktionen sowie die anschließende Weiterentwicklung zu einer Produktionsversion sollen 1992 abgeschlossen werden.

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

**Leitung:** J. Gottschewski

**Bearbeiter:** S. Bartmann

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Mit der BAM existiert seit 1988 ein Kooperationsvertrag der zum Ende des Berichtszeitraumes endete. Eine Verlängerung der Kooperation ist beabsichtigt. Ziel der Zusammenarbeit ist der effektive Einsatz der Hochleistungsrechner des ZIB für einschlägige Forschungsaufgaben der BAM. Die Kooperation berührt folgende Teilgebiete:

- Sicherstellung angemessener und stabiler Produktionsbedingungen für die Rechenaufträge der BAM
- Laufende Anpassung der technischen Dokumentation an den sachlich gebotenen technischen Stand
- Optimierung von Software für die Hochleistungsrechner
- Methodische und technische Unterstützung der Endbenutzer.

Im Rahmen der Kooperation wurden an der BAM folgende Forschungsaufgaben bearbeitet :

- Verifikation analytischer Funktionen durch FE-Modelle (Impedanzen)
- Werkstoffmodellierungen im Hochtemperaturbereich
- Untersuchungen des Trag- und Verformungsverhaltens brandbeanspruchter Stahlkonstruktionen (thermo-elastisch-plastische Stabilitätsuntersuchungen)
- Rißwachstumssimulation an 2-D und 3-D-Modellen von Bruchmechanikproben mit Hilfe der FE-Methoden
- Berechnung des nichtlinearen Last-Verformungs-Verhaltens von Tankböden bei unfallähnlicher Beanspruchung
- Vergleichende Untersuchungen der FE-Programme ADINA und ABAQUS anhand bruchmechanischer Kenngrößen.

Für die wissenschaftlich-methodische Unterstützung und die Beantwortung wissenschaftlich-technischer Fragen steht den Endbenutzern in der BAM im Rahmen der Kooperation ein wissenschaftlicher Mitarbeiter des ZIB zur Verfügung. Ein wesentliches Ziel der Zusammenarbeit ist die Erschließung hochwertiger Software für die Finite-Element-Berechnung. Als Vorbereitung für eine Internet-Verbindung zwischen der BAM und dem ZIB wurde im Rahmen der Kooperation ein Cisco-Router beschafft.

## Auslegung von ausfallsicheren Kommunikationsnetzwerken

Bearbeiter: M. Grötschel, M. Stoer

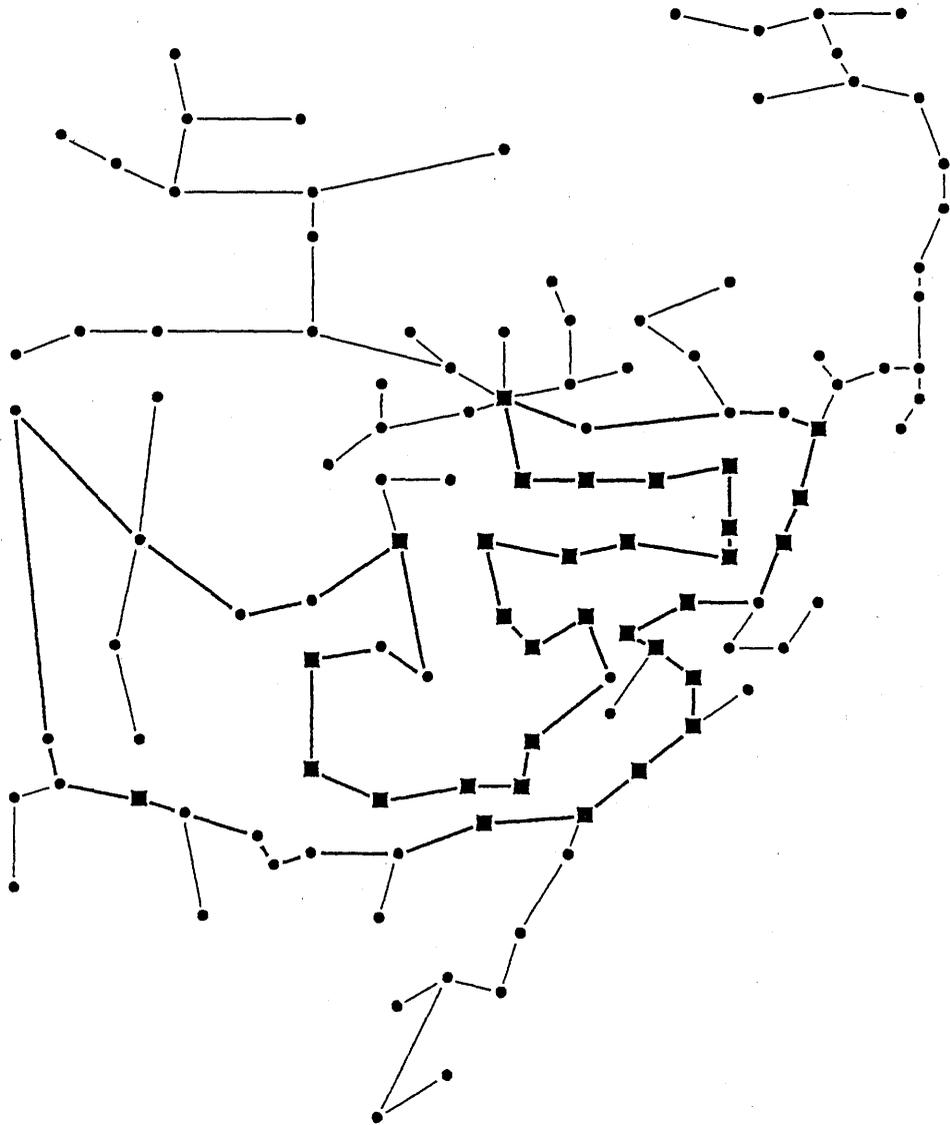
**Kooperation:** Clyde L. Monma, Bell Communications Research, Morristown, New Jersey, U.S.A.

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** In dem vor vier Jahren begonnenen Projekt ging es zunächst um die Auslegung von kostengünstigen Telefonnetzwerken, in denen nur die Funktionstüchtigkeit bei Ausfall eines einzigen Kabels oder Telefonamtes gewährleistet zu sein brauchte. Da zu erwarten stand, daß auch höhere Ausfallsicherheit einmal interessant werden würde und Bell Communications Research uns entsprechende Daten (für die Auslegung eines Kommunikationsnetzwerkes auf einem Schiff) zur Verfügung stellte, begannen wir vor zwei Jahren, die Ergebnisse für den Fall des niedrigen Zusammenhangs auf den Fall des höheren Zusammenhangs zu verallgemeinern und im Schnittebenenverfahren zu berücksichtigen. Es gelang auch, beim polyedertheoretischen Ansatz die wesentlichen Klassen von Facetten zu verallgemeinern und algorithmisch zu nutzen. Allerdings konnten wir bisher nur eines der drei Problembeispiele von Bellcore lösen. Die theoretischen und praktischen Ergebnisse bei der Auslegung von ausfallsicheren Kommunikationsnetzwerken sind in [4] dargestellt.

### Literatur

- [1] M. Grötschel, C. Monma: *Integer polyhedra arising from certain network design problems with connectivity constraints*. SIAM Journal on Discrete Mathematics **3**, p. 502–523 (1990)
- [2] M. Grötschel, C. Monma, M. Stoer: *Facets for Polyhedra Arising in the Design of Communication Networks with Low-Connectivity Constraints*. Report No. 187, Schwerpunktprogramm der Deutschen Forschungsgemeinschaft, Universität Augsburg, Augsburg (1989), erscheint in: SIAM Journal on Optimization.
- [3] M. Grötschel, C. Monma, M. Stoer: *Polyhedral Approaches to Network Survivability*. In: F. Roberts et al. (Hrsg.), *Reliability of Computer and Communication Networks*, DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science, **5**, AMS/ACM, p. 121–141 (1991)
- [4] M. Stoer: *Design of Survivable Networks*. Dissertation, Universität Augsburg (1991)

- [5] M. Grötschel; C. Monma; M. Stoer: *Computational Results with a Cutting Plane Algorithm for Designing Communication Networks with Low-Connectivity Constraints*. Erscheint in *Operations Research*.



Optimale eines Glasfaser-Telekommunikationsnetzwerkes

## 4. Rechenzentrum

### 4.1 Übersicht

Das Rechenzentrum des ZIB hat folgende Aufgaben:

**Nach außen:** Ausbau und Betrieb eines Supercomputers als Dienstleistungsangebot des ZIB an Universitäten und Forschungseinrichtungen im Lande Berlin und – in eingeschränktem Maße – in anderen Bundesländern. Erschließung der Superrechner im Norddeutschen Vektorrechnerverbund für Berliner Nutzer.

**Nach innen:** Schaffung und Unterhaltung der informationstechnischen Basis für die Forschungsarbeit des ZIB.

Charakteristisch für den Betrieb eines Supercomputers ist, daß die Leistung der Maschine für wenige große Projekte (und nicht viele kleinere) in Anspruch genommen wird. In der Regel wird nicht nur hohe Prozessorleistung, sondern auch ein großer Arbeitsspeicher und hohe Eingabe- und Ausgabeleistung für ein großes zu speicherndes Datenvolumen benötigt. Diese außerordentlich hohen Anforderungen an die Betriebsmittel teurer Großmaschinen können nur dann verantwortet werden, wenn neben die Beratung der Benutzer durch Programmier- und Großrechnerexperten der Dialog mit Wissenschaftlern mit Superrechnererfahrung auf den Arbeitsgebieten der Benutzer tritt. Während die Aufgaben nach außen also fachlich breit gefächert sind und nur in Zusammenarbeit mit zahlreichen externen und internen Partnern gelöst werden können, sind nach innen die üblichen Aufgaben des Rechenzentrums in einem technisch anspruchsvollen Institut zu erfüllen. Die doppelte Aufgabenstellung drückt sich auch in der Organisation des Rechenzentrums aus (vgl. Organisationsplan in Kapitel 2). Die Entwicklungsprojekte des Rechenzentrums sind strikt an seine Serviceaufgaben gebunden:

- In Zusammenarbeit mit der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung werden die Arbeitsmöglichkeiten von Benutzern aus dem Bereich der Ingenieurwissenschaften verbessert.
- In Zusammenarbeit mit dem Hahn-Meitner-Institut Berlin werden Werkzeuge entwickelt, um moderne Methoden des "Distributed Supercomputing" auf Anwendungen aus dem Bereich der Physik und der Biowissenschaften zu übertragen.
- In Zusammenarbeit mit der Universität Stuttgart werden im Hinblick auf die in Zukunft noch stärkere überregionale Nutzung von Supercomputern Methoden entwickelt, die es erleichtern werden, große Anwen-

ungsprobleme auf mehrere, weit voneinander entfernte Supercomputer zu verteilen.

Über diese Projekte wird an anderer Stelle berichtet. Die Supercomputerkonfiguration konnte während des vergangenen Jahres im Hinblick auf die geplante Beschaffung eines Nachfolgesystems deutlich verbessert werden: Als Fileserver wurde ein Vektorrechner Cray Y-MP 2E/164 beschafft, der bis zur Beschaffung des nächsten Supercomputers auch als Computerserver für diejenigen Programme dient, die einen größeren Hauptspeicher benötigen. Die Konfiguration am Jahresende (siehe nächste Seite) ist vorbereitet für die Aufnahme eines neuen Supercomputers als Nachfolgerechner der Cray X-MP/24. Die Entscheidung, die Beschaffung des Nachfolgerechners in (mindestens) zwei Schritten vorzunehmen, hat sich inzwischen als richtig erwiesen: Alle Hersteller von Supercomputern haben inzwischen neue Systeme in der Planung, die sich architektonisch erheblich von den heute erhältlichen Systemen unterscheiden. Durch den mehrstufigen Ausbau wird es möglich sein, diese neuen Systeme mit ihren parallelen Komponenten in die Auswahl einzubeziehen.

## 4.2 Arbeiten im Bereich Rechenzentrum

Nach intensiven Vorarbeiten wurde im November 1991 ein Magnetbandroboter installiert. Er wird mit der Data-Migration-Software der Firma Cray Research betrieben. Hierdurch konnte den Benutzern der Berliner Supercomputer erstmalig eine ausreichende Datenhaltungskapazität angeboten werden. Darüber hinaus ist die Beschaffung und Integration des Roboters ein erster Schritt auf dem langen Weg in Richtung auf ein unbedientes Rechenzentrum. Mit dem Abbau des Vorrechners CDC CYBER 825 wurde die Migration zu UNIX fast abgeschlossen. Die Funktionen dieses Rechners wurden durch die Beschaffung des File-Servers und durch das stärkere Eindringen von UNIX in die Universitäten weitgehend entbehrlich. Es stellte sich allerdings als unumgänglich heraus, einen leistungsstärkeren UNIX Server UFER (UNIX Front End Rechner) insbesondere für solche Benutzer des Vektorrechners zur Verfügung zu stellen, die lediglich über Terminals, aber nicht über eine eigene Workstation verfügen. Für diese Zwecke wurde ein Vierprozessorsystem SUN 4/670 beschafft. Über die Erfahrungen mit diesem System wird im Jahresbericht 1992 berichtet werden. Neben dem Supercomputer bedarf das Rechnernetz einer ständigen Anpassung und Erweiterung. Im Berichtszeitraum wurde die Ethernet-Technik bis an die Grenzen ihrer Leistungsmöglichkeiten ausgebaut und ausgelastet. Im Rahmen des weiteren Ausbaus wird das ZIB-Rechnernetz durch Einführung neuer Netzwerkkomponenten deutlich leistungsstärker werden müssen. Hierfür wurden im Berichtszeitraum bereits

erste Vorarbeiten geleistet. Auf die interne Rechnerausstattung des ZIB wird in diesem Bericht nicht näher eingegangen. Nach Möglichkeit verfügt jeder Mitarbeiter des ZIB über eine "eigene" UNIX-Workstation mit Zugriff zu Hochleistungs- und Spezialservern innerhalb und außerhalb des ZIB. Für die Datenhaltung stehen den Arbeitsgruppen Fileserver zur Verfügung, deren Daten vom Rechenzentrum gesichert werden. Das Workstation-Netz des ZIB bestand Ende 1991 aus mehr als 100 Workstations und wird in der Konfigurationsskizze nur angedeutet (ZIB-Teilnetze 1-5). Der Betrieb der Superrechner ist kooperativ organisiert: Die Partnerrechenzentren erhalten die in Abschnitt 3.3.2 aufgeführten Kontingente und verwalten sie so, als handele es sich um Rechner der jeweiligen eigenen Institution. Dazu gehört auch die Verantwortung für den sachgerechten Einsatz der Supercomputer und für die Beratung der Anwender. Zur Unterstützung der Rechenzentren der Berliner Universitäten bei dieser Aufgabe waren im Berichtszeitraum bis zu 7 Mitarbeiter des ZIB dort tätig. Hinsichtlich der Art der Beratungsprobleme ist im Berichtszeitraum eine deutliche Verschiebung eingetreten: Während in früheren Jahren die Vektorisierung und Optimierung der Benutzerprogramme zusammen mit der Organisation der Auftragsverarbeitung das wichtigste Beratungsthema waren, haben in neuerer Zeit inhaltliche Fragen, für deren Beantwortung spezifische Kenntnisse im Fach des Benutzers nötig sind, immer mehr zugenommen.

Typisch für den Einsatz eines Superrechners in der universitären Forschung ist die Verwendung von selbstentwickelten Programmen der Benutzer bzw. von Programmen, die innerhalb der wissenschaftlichen Gemeinschaft über die Rechnernetze kostenlos ausgetauscht werden. Im Laufe der Jahre wurde aber auch eine nicht unerhebliche Sammlung von Programmen und Bibliotheken aufgebaut, die vom ZIB zentral verwaltet und angeboten werden:

**Basisbibliotheken:** IMSL, NAG, BLAS, EISPACK, LINPACK, LAPACK

**Chemie:** GAUSSIAN 88/90, MOPAC, AMBER 3A, AMPAC 2.1, GAMESS-UK, GAMESS-USA, GRADSCF 9.6, GROMOS 87, MOPAC 6.0, RPAC 8.6

**Strukturmechanik:** ADINA, ABAQUS 4.8

**Computeralgebra:** REDUCE Graphik: GKS 4.x (Fortran), GRIPS (Fortran), NAG graph. lib. Mark 3.0 (Fortran), XGKS, BIZEPS

Darüber hinaus stehen den Benutzern der Superrechner auch die vom ZIB weltweit angebotenen rechnerunabhängigen Dienste eLib, netlib und redlib

zur Verfügung, über die in Kapitel 7 berichtet wird. Ein Vergleich der Liste der Ende 1991 angebotenen Software mit dem Stand ein Jahr zuvor zeigt, daß besonders im Bereich der Chemie, aber auch bei den Ingenieurwissenschaften eine erhebliche Verbesserung der Funktionalität erreicht wurde. Dies ist in erster Linie Folge eines neuen Konzeptes für die Benutzerberatung, weg von der technikbezogenen Benutzerberatung, hin zur fachspezifischen Beratung, wie es bereits im vorigen Jahresbericht des ZIB angedeutet wurde.

### 4.3 Nutzung der Vektorrechner

#### 4.3.1 Norddeutscher Vektorrechnerverbund (NVV)

Zwischen den Ländern Schleswig-Holstein, Niedersachsen und Berlin besteht ein Vertrag über die wechselseitige Nutzung von Vektorrechnern. Das ZIB verwaltet neben dem eigenen Rechner die Anteile des Landes Berlin auf den Rechnern der Partnerländer. Die Tabelle auf der folgenden Seite zeigt die Inanspruchnahme von Vektorrechnerkapazität im NVV seit 1984. Superrechner sind in manchen Forschungsdisziplinen das einzige Werkzeug der Forschung, in anderen Disziplinen sind sie ein unentbehrliches Hilfsmittel neben anderen Geräten. Der Bedarf an Rechenleistung übersteigt die technischen Möglichkeiten dermaßen, daß viele Projekte nicht in Angriff genommen werden, weil die verfügbare Rechenleistung viel zu gering ist. Dies erklärt die Beobachtung, daß Höchstleistungsrechner immer voll ausgelastet sind, und daß lange Wartezeiten für die Bearbeitung größerer Aufträge bestehen. Wegen der besseren Vergleichbarkeit wurden in vorstehender Tabelle daher nur die prozentualen Anteile der Partner im Norddeutschen Vektorrechnerverbund an den durchweg voll ausgelasteten Systemen aufgeführt. Wie von Anfang an geplant zeigt sich aufgrund der unterschiedlichen Installationstermine und Leistungscharakteristika eine deutliche Tendenz zum Kapazitätsausgleich zwischen Kiel und Berlin. Abweichend von der Planung ist hingegen zu beobachten, daß die Nutzung der ersten Ausbaustufe des niedersächsischen Vektorrechners von anderen Bundesländern aus nur zögerlich angelaufen ist. Das liegt in erster Linie daran, daß auf dem niedersächsischen Vektorrechner das Betriebssystem UNIX noch nicht angeboten werden konnte und daß diese Inkompatibilität zu den vorhandenen Systemen nicht durch überzeugende Leistungsvorteile ausgeglichen wurde. Erst nach Installation des Systems S400/40 Anfang 1992 und des Betriebssystems UNIX sind Änderungen in der Nutzungsstatistik eingetreten. Dies ist aber nicht mehr Gegenstand des vorliegenden Berichtes.

Wechselseitige anteilige Rechnernutzung im NVV				
Jahr	System	Nutzung durch		
		Berlin	Schleswig -Holstein	Nieder- sachsen
1984	CRAY 1-M/1200 (Berlin)	85 %	10 %	5 %
1985	CRAY 1-M/1200 (Berlin)	68 %	13 %	19 %
1986	CRAY 1-M/1200 (Berlin)	66 %	17 %	17 %
1987	CRAY X-MP/24* (Berlin)	65 %	16 %	19 %
1988	CRAY X-MP/24 (Berlin)	81 %	4 %	15 %
	CRAY X-MP/216** (Kiel)	17 %	82 %	1 %
1989	CRAY X-MP/24 (Berlin)	86 %	2 %	12 %
	CRAY X-MP/216 (Kiel)	12 %	79 %	9 %
1990	CRAY X-MP/24 (Berlin)	87 %	4 %	9 %
	CRAY X-MP/216 (Kiel)	16 %	79 %	5 %
	SIEMENS VP 200*** (Hannover)	2 %	0 %	98 %
1991	CRAY X-MP/24 (Berlin)	90 %	7 %	3 %
	CRAY Y-MP-2E/164 (Berlin)****	85 %	15 %	0 %
	CRAY X-MP/216 (Kiel)	14 %	85 %	1 %
	SIEMENS VP 400/10*** (Hannover)	8 %	3 %	89 %

\* Installiert Januar 1987

\* Installiert Dezember 1987 als CRAY X-MP/18, erweitert zur CRAY X-MP/216 im 4. Quartal 1988

\*\*\* Installiert Januar 1990 als SIEMENS VP200, Erweiterung zur SIEMENS S400/10 Ende 1990, geplante Erweiterung zur SIEMENS S400/40 Ende 1991

\*\*\*\* Installiert September 1991

#### 4.3.2 Berliner Nutzung im NVV

Insgesamt wurden 1991 von den Berliner Vektorrechnern folgende Leistungen abgegeben:

	CPU-Stunden
An der Cray X-MP/24:	15.109
An der Cray Y-MP 2E/164 (28.9.1991 - 31.12.1991):	2.254

Vor der Berechnung der Anteile der einzelnen Partner des ZIB an der Leistung der Berliner Supercomputer wird der Eigenverbrauch des ZIB, seiner unmittelbaren Forschungspartner und der außeruniversitären Nutzer ermittelt:

	X-MP	Y-MP
Eigene Forschungsprojekte des ZIB	1.033	118
Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung	302	25
Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH	43	72
Somit betrug der Anteil des ZIB:	1.378 (9 %)	215 (10 %)
Nach Abzug dieses Eigenanteils verblieben demnach zur Verteilung:		
An der Cray X-MP:	13.731	
An der Cray Y-MP:		2.039

In der folgenden Zusammenstellung sind diejenigen Fachbereiche aufgeführt, die 1991 mehr als 100 Stunden System-Zeit auf den Supercomputern im NVV verbraucht haben. In den ausgewiesenen Rechenzeiten sind "Bagatellprojekte" (Jahresverbrauch < 1 Stunde) nicht enthalten. Da der Berliner Vektorrechner nach Möglichkeit nur für große Projekte eingesetzt wird, bedeuten die oben beschriebenen Einschränkungen kaum einen Informationsverlust: Die in der folgenden Tabelle ausgewiesenen Rechenzeiten betragen in der Summe 99 % (X-MP) bzw. 97 % (Y-MP) der an Benutzer abgegebenen Rechenzeit.

	CPU-Stunden	
	X-MP	Y-MP
<b>Technische Universität Berlin</b>		
Fachbereich 4, Physik	3.100	601
Fachbereich 5, Synthetische und Analytische Chemie (Cray X-MP/216, Kiel) 252 (Siemens S400/10, Hannover) 54	869	388
Fachbereich 9, Physikalische Ingenieurwissenschaft	1.469	0
Fachbereich 6, Physikalische und Angewandte Chemie	424	66
Fachbereich 7, Bauingenieur- und Vermessungswesen	76	26
<b>Freie Universität Berlin</b>		
Fachbereich Physik (Cray X-MP/216, Kiel) 1.907 (Siemens S400/10, Hannover) 499	3.810	247
Fachbereich Chemie	1.183	318
Fachbereich Geowissenschaften	1079	6
<b>Land Niedersachsen</b>	466	1
<b>Land Schleswig-Holstein</b>	1061	334
Summe der Fachbereiche mit großem Verbrauch	13.537	1.987
Die Nutzung der Supercomputer des ZIB aus den Neuen Bundesländern resultierte im wesentlichen aus der Softwareadaption und aus der Erprobung neuer Methoden. Die Gesamtnutzung entsprach dem Äquivalent von etwas weniger als 100 Stunden CPU-Zeit einer Cray X-MP.		
<b>Projekte aus den Neuen Bundesländern</b>	80	10

## 5. Publikationen

### 5.1 Preprints

SC 91-1 F.A. Bornemann: *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations III. 2-D Error Estimation and Multilevel Preconditioning.*

**Abstract:** Part III of the paper is devoted to the construction of an adaptive FEM solver in two spatial dimensions, which is able to handle the singularly perturbed elliptic problems arising from discretization in time. The problems of error estimation and multilevel iterative solution of the linear systems – both uniformly well behaved with respect to the time step – can be solved simultaneously within the framework of preconditioning. A multilevel nodal basis preconditioner able to handle highly nonuniform meshes is derived. As a numerical example an application of the method to the bioheat-transfer equation is included.

SC 91-2 R. Kornhuber, R. Roitzsch: *Self Adaptive Computation of the Breakdown Voltage of Planar pn- Junctions with Multistep Field Plates.*

**Abstract:** The breakdown voltage highly depends on the electric field in the depletion area whose computation is the most time consuming part of the simulation. We present a self adaptive Finite Element Method which reduces dramatically the required computation time compared to usual Finite Difference Methods. A numerical example illustrates the efficiency and reliability of the algorithm.

SC 91-3 A. Griewank: *Sequential Evaluation of Adjoint and Higher Derivative Vectors by Overloading and Reverse Accumulation.*

**Abstract:** Most nonlinear computations require the evaluation of first and higher derivatives of vector functions defined by computer programs. It is shown here how vectors of such partial derivatives can be obtained automatically and efficiently if the computer language allows overloading (as is or will be the case for C++, PASCAL-XSC, FORTRAN90, and other modern languages). Here, overloading facilitates the extension of arithmetic operations and univariate functions from real or complex arguments to truncated Taylor-series (or other user-defined types), and it generates instructions for the subsequent evaluation of adjoints. Similar effects can be achieved by precompilation of FORTRAN77 programs. The proposed differentiation algorithm yields gradients and higher derivatives at a small multiple of the run-time and RAM requirement of the original function evaluation program.

SC 91-4 P. Deuffhard, F. Potra: *A Refined Gauss-Newton- Mysovskii Theorem.*

**Abstract:** The present paper contains a generalization of a refinement of the Newton- Mysovskii theorem, recently obtained by the authors, to the case of Gauss-Newton procedures for solving nonlinear least-squares problems with full Jacobians. Invariant sufficient conditions are given that ensure the convergence of the Gauss-Newton iterates towards a solution of the problem, as well as the uniqueness of that solution in an explicitly defined neighborhood. It is shown by a counter-example that the results do not carry over to the rank deficient case.

SC 91-5 B. Fiedler, J. Scheurle: *Discretization of Homoclinic Orbits, Rapid Forcing and "Invisible" Chaos.*

**Abstract:** One-step discretizations of order  $p$  and step size  $\varepsilon$  of ordinary differential equations can be viewed as time- $\varepsilon$  maps of

$$\dot{x}(t) = f(\lambda, x(t)) + \varepsilon^p g(\varepsilon, \lambda, t/\varepsilon, x(t)), \quad x \in \mathbb{R}^N, \lambda \in \mathbb{R},$$

where  $g$  has period  $\varepsilon$  in  $t$ . This is a rapidly forced nonautonomous system. We study the behavior of a homoclinic orbit  $\Gamma$  for  $\text{varepsilonpsilon} = 0$ ,  $\lambda = 0$ , under discretization. Under generic assumptions we show that  $\Gamma$  becomes transverse for positive  $\varepsilon$ . The transversality effects are estimated from above to be exponentially small in  $\varepsilon$ . For example, the length  $\ell(\varepsilon)$  of the parameter interval of  $\lambda$  for which  $\Gamma$  persists can be estimated by

$$\ell(\varepsilon) \leq C \exp(-2\pi\eta/\varepsilon),$$

where  $C, \eta$  are positive constants. The coefficient  $\eta$  is related to the minimal distance from the real axis of the poles of  $\Gamma(t)$  in the complex time domain. Likewise, the region where complicated, "chaotic" dynamics prevail is estimated to be exponentially small, provided  $x \in \mathbb{R}^2$  and the saddle quantity of the associated equilibrium is nonzero. Our results are visualized by high precision numerical experiments. The experiments show that, due to exponential smallness, homoclinic transversality becomes practically invisible under normal circumstances, already for only moderately small step size.

SC 91-6 R.H.W. Hoppe, R. Kornhuber: *Multilevel Preconditioned cg-Iterations for Variational Inequalities.*

**Abstract:** We consider such variational inequalities which either describe obstacle problems or result from an implicit time discretization of moving boundary problems of two phase Stefan type. Based on a discretization in space by means of continuous, piecewise linear finite elements with respect to a nested hierarchy of triangulations, in both

cases we use iterative processes consisting of inner and outer iterations. The outer iterations are either active set strategies or generalized Newton methods while the inner iterations are preconditioned cg- iterations with multilevel preconditioners.

SC 91-7 J. Lang, A. Walter: *An Adaptive Discontinuous Finite Element Method for the Transport Equation.*

**Abstract:** In this paper we introduce a discontinuous finite element method. In our approach, it is possible to combine the advantages of finite element and finite difference methods. The main ingredients are numerical flux approximation and local orthogonal basis functions. The scheme is defined on arbitrary triangulations and can be easily extended to nonlinear problems. Two different error indicators are derived. Especially the second one is closely connected to our approach and able to handle arbitrary varying flow directions. Numerical results are given for boundary value problems in two dimensions. They demonstrate the performance of the scheme, combined with the two error indicators.

SC 91-8 K. Gatermann, A. Hohmann: *Hexagonal Lattice Dome - Illustration of a Nontrivial Bifurcation Problem.*

**Abstract:** The deformation of a hexagonal lattice dome under an external load is an example of a parameter dependent system which is equivariant under the symmetry group of a regular hexagon. In this paper the mixed symbolic-numerical algorithm SYMCON is applied to analyze its steady state solutions automatically showing their different symmetry and stability properties.

SC 91-9 F.A. Bornemann: *A Sharpened Condition Number Estimate for the BPX Preconditioner of Elliptic Finite Element Problems on Highly Nonuniform Triangulations.*

**Abstract:** In this paper it is shown that for highly nonuniformly refined triangulations the condition number of the BPX preconditioner for elliptic finite element problems grows at most linearly in the depth of refinement. This is achieved by viewing the computational available version of the BPX preconditioner as an abstract additive Schwarz method with exact solvers.

SC 91-10 G.M. Ziegler: *Higher Bruhat Orders and Cyclic Hyperplane Arrangements.*

**Abstract:** We study the higher Bruhat orders  $B(n, k)$  of Manin and Schechtman and

- characterize them in terms of inversion sets,

- identify them with the posets  $\mathcal{U}(C^{n+1,r}, n+1)$  of uniform extensions of the alternating oriented matroids  $C^{n,r}$  for  $r := n - k$  (that is, with the extensions of a cyclic hyperplane arrangement by a new oriented pseudoplane),
- show that  $B(n, k)$  is a lattice for  $k = 1$  and for  $r \leq 3$ , but not in general,
- show that  $B(n, k)$  is ordered by inclusion of inversion sets for  $k = 1$  and for  $r \leq 4$ .

However,  $B(8, 3)$  is not ordered by inclusion. This implies that the partial order  $B_{\subseteq}(n, k)$  defined by inclusion of inversion sets differs from  $B(n, k)$  in general. We show that the proper part of  $B_{\subseteq}(n, k)$  is homotopy equivalent to  $S^{r-2}$ . Consequently,

- $B(n, k) \simeq S^{r-2}$  for  $k = 1$  and for  $r \leq 4$ .

In contrast to this, we find that the uniform extension poset of an affine hyperplane arrangement is in general not graded and not a lattice even for  $r = 3$ , and that the proper part is not always homotopy equivalent to  $S^{r(\mathcal{M})-2}$ .

SC 91-11 B. Sturmfels, G.M. Ziegler: *Extension Spaces of Oriented Matroids.*

**Abstract:** We study the space of all extensions of a real hyperplane arrangement by a new pseudo-hyperplane, and, more generally, of an oriented matroid by a new element. The question whether this space has the homotopy type of a sphere is a special case of the "Generalized Baues Problem" of Billera, Kapranov & Sturmfels, via the Bohne-Dress Theorem on zonotopal tilings. We prove that the extension space is spherical for the class of strongly euclidean oriented matroids. This class includes the alternating matroids and all oriented matroids of rank at most 3 or of corank at most 2. In general it is not even known whether the extension space is connected. We show that the subspace of realizable extensions is always connected but not necessarily spherical.

SC 91-12 F. Schmidt: *An Adaptive Approach to the Numerical Solution of Fresnel's Wave Equation.*

**Abstract:** An adaptive approach to the numerical solution of the wave propagation in integrated optics devices with 1-D cross sections is described. First, Fresnel's approximation of the exact wave equation resulting from Maxwell's equations is considered. A criterion to estimate the validity of this approximation is derived. Fresnel's wave equation being formally equivalent to Schroedinger's equation uniquely defines

an initial-boundary-value problem, which is solved numerically by a stepwise calculation of the propagating field. Discretization in longitudinal direction first with stepsize control leads to a stationary subproblem for the transversal field distribution, which is then handled by an adaptive finite element method. Thus full adaptivity of the algorithm is realized. The numerical examples are concentrated on taper structures playing an essential role in integrated optics devices for telecommunication systems.

**SC 91-13** R. Schöpf, P. Deuffhard: *OCCAL - A mixed symbolic-numeric Optimal Control CALCulator.*

**Abstract:** The numerical solution of optimal control problems by indirect methods (such as multiple shooting or collocation) requires a considerable amount of analytic calculation to establish a numerically tractable system. These analytic calculations, though being rather tedious in realistic examples, are nowadays mostly still done by hand and thus prone to calculation errors. The paper aims at automating this analytic processing to a reasonable extent by means of a modern symbolic manipulation language (here: REDUCE). In its present stage of development the package OCCAL (mnemotechnically for Optimal Control CALCulator) permits an interactive use, covering tasks like automatic determination of control and, in case of a singular control, of its order. In simpler problems, the present version of OCCAL automatically produces the full subroutine input for a MULTiple shooting code (MULCON) with adaptive numerical CONTinuation. In more complicated problems where singular sub-arcs may occur or where the sequence of sub-arcs of the optimal trajectory is unclear OCCAL is a significant help in reducing analytic pre-processing. Numerical examples illustrate the performance of OCCAL/MULCON.

**SC 91-14** G.M. Ziegler: *On the Difference Between Real and Complex Arrangements.*

**Abstract:** If  $B$  is an arrangement of linear complex Hyperplanes in  $C^d$ , then the following can be constructed from knowledge of its intersection lattice:

1. the cohomology groups of the complement [Br],
2. the cohomology algebra of the complement [OS],
3. the fundamental group of the complement, if  $d \leq 2$ ,
4. the singularity link up to homeomorphism, if  $d \leq 3$ ,
5. the singularity link up to homotopy type [ZZ].

If  $B'$  is, more generally, a 2-arrangement in  $R^{2d}$  (an arrangement of real subspaces of codimension 2 with even-dimensional intersections),

then the intersection lattice still determines (a) the cohomology groups of the complement [GM] and (e) the homotopy type of the singularity link [ZZ]. We show, however, that for 2-arrangements the data (b), (c) and (d) are not determined by the intersection lattice. They require the knowledge of extra information on sign patterns, which can be computed as determinants of linear relations, or (equivalently) as linking coefficients in the sense of knot theory.

SC 91-15 G.M. Ziegler, R.T. Zivaljevic: *Homotopy Types of Subspace Arrangements via Diagrams of Spaces.*

**Abstract:** We prove combinatorial formulas for the homotopy type of the union of the subspaces in an (affine, compactified affine, spherical or projective) subspace arrangement. From these formulas we derive results of Goresky & MacPherson on the homology of the arrangement and the cohomology of its complement. The union of an arrangement can be interpreted as the direct limit of a diagram of spaces over the intersection poset. A closely related space is obtained by taking the homotopy direct limit of this diagram. Our method consists in constructing a combinatorial model diagram over the same poset, whose homotopy limit can be compared to the original one by usual homotopy comparison results for diagrams of spaces.

SC 91-16 R.H.W. Hoppe, R. Kornhuber: *Adaptive Multilevel-Methods for Obstacle Problems.*

**Abstract:** We consider the discretization of obstacle problems for the Laplacian by piecewise linear finite elements. Assuming that the discrete problems are reduced to a sequence of linear problems by suitable active set strategies, the linear problems are solved iteratively by preconditioned cg- iterations. The proposed preconditioners are treated theoretically as abstract additive Schwarz methods and are implemented as truncated hierarchical basis preconditioners. To allow for local mesh refinement we derive semi-local and local a posteriori error estimates, providing lower and upper estimates for the discretization error. The theoretical results are illustrated by numerical computations.

SC 91-17 M. Wulkow: *Adaptive Treatment of Polyreactions in Weighted Sequence Spaces.*

**Abstract:** Countable systems of ordinary differential equations appear frequently in chemistry, physics, biology and statistics. They can be considered as ordinary differential equations in sequence spaces. In this work, a fully adaptive algorithm for the computational treatment of such systems is developed. The method is based on a time discretization of an abstract Cauchy problem in Hilbert space and a discrete Galerkin approach for the discretization of the arising stationary subproblems.

The Galerkin method uses orthogonal functions of a discrete variable, which are generated by certain weight functions. A theory of countable systems in the associated weighted sequence spaces is developed as well as a theory of the Galerkin method. The Galerkin equations are solved adaptively either by use of analytical properties of the orthogonal functions or by an appropriate numerical summation. The resulting algorithm CODEX is applied to examples of technological interest, in particular from polymer chemistry.

SC 91-18 J. Ackermann, M. Wulkow: *The Treatment of Macromolecular Processes with Chain-Length-Dependent Reaction Coefficients - An Example from Soot Formation.*

**Abstract:** The description of chain length distributions in macromolecular reaction kinetics leads to so-called countable systems of differential equations. In particular, when the appearing reaction rate coefficients depend on the chain length of the reacting macromolecules itself, an efficient numerical treatment of these systems is very difficult. Then even the evaluation of the right-hand side of the system can become prohibitively expensive with respect to computing time. In this paper we show how the discrete Galerkin method can be applied to such problems. The existing algorithm CODEX is improved by use of a multiplicative error correction scheme for time discretization and a new type of numerical preprocessing by means of a Gauss summation. Both ideas are exemplary for a wide class of approximation types and are described very briefly here. The new numerical techniques are tested on an example from soot formation, where the coagulation of molecules is modeled in terms of reaction coefficients depending on the surface of the particles and their collision frequency.

SC 91-19 C.D. Godsil, M. Grötschel, D.J.A. Welsh: *Combinatorics in Statistical Physics.* A Chapter for the Handbook of Combinatorics. (Eds. R.L. Graham, M. Grötschel, L. Lovász)

SC 91-20 A. Hohmann: *An Adaptive Continuation Method for Implicitly Defined Surfaces.*

**Abstract:** A new method for the numerical approximation of an implicitly defined surface is presented. It is a generalization of the Euler-Gauss-Newton method for implicitly defined (one-parameter) curves to the case of (two-parameter) surfaces. The basic task in the more general case is an efficient combination of modern CAGD techniques (such as triangular Bernstein-Bézier patches and the nine parameter Hermite interpolant) and the rank deficient Gauss-Newton method.

## 5.2 Technical Reports

TR 91-1 B. Erdmann, R. Roitzsch, F.A. Bornemann: *KASKADE - Numerical Experiments.*

**Abstract:** The C-implementation of KASKADE, an adaptive solver for linear elliptic differential equations in 2-D, is object of a set of numerical experiments to analyze the use of resources (time and memory) with respect to numerical accuracy. We study the dependency of the reliability, robustness, and efficiency of the program from the parameters controlling the algorithm.

TR 91-2 J. Lügger, W. Dalitz. *Verteilung mathematischer Software mittels elektronischer Netze: Die elektronische Softwarebibliothek eLib.*

**Abstract:** Mit zunehmender Dezentralisierung im Bereich des wissenschaftlichen Rechnens steigt auch der Bedarf an Softwarequellen qualitativ hochwertiger mathematischer Algorithmen. Für den Software- und Informationsaustausch wird die Einrichtung öffentlicher, elektronischer Softwarebibliotheken vorgeschlagen. Am Beispiel der eLib des ZIB werden die notwendigen technischen Konzepte, die u.a. auch in den heutigen Gegebenheiten der technischen Kommunikation begründet sind, diskutiert. Die eLib ist fenster- und menüorientiert aufgebaut und folglich im Dialog sehr einfach zu benutzen. Sie kann aber auch mit ihrer Kommandosprache allein auf dem Wege über elektronische Post abgefragt werden. Über die eLib sind, nach dem Verbund mit den Netzbibliotheken NetLib und Reduce-NetLib jetzt etwa 6000 mathematische Programme und allgemeine Dokumente verfügbar. Das Dienstleistungsangebot der eLib setzt Beiträge aus einer aktiven Benutzergemeinschaft voraus. Es besteht die Hoffnung, daß sich Entwickler und Anwender durch den öffentlichen Softwareaustausch wechselseitig in ihrer Arbeit befruchten.

TR 91-3 S.W.C. Noelle: *On the Limits of Operator Splitting: Numerical Experiments for the Complex Burgers Equation.*

**Abstract:** A high resolution Godunov-type method is developed and applied to a two-dimensional version of the Burgers equation. On one-dimensional testproblems the scheme is second order accurate for smooth flow and resolves discontinuities sharply. On two-dimensional problems, however, large numerical oscillations are introduced when discontinuities traveling obliquely to the grid directions are present. These oscillations are caused by a Strang-type operator splitting, and cannot be eliminated using flux limiters or small timesteps.

TR 91-4 J. Lang: *An Adaptive Finite Element Method for Convection-Diffusion Problems by Interpolation Techniques.*

**Abstract:** For adaptive solution of convection-diffusion problems with the streamline-diffusion finite element method, an error estimator based on interpolation techniques is developed. It can be shown that for correctness of this error estimator a restriction of the maximum angle is to be sufficient. Compared to usual methods, the adaptive process leads to more accurate solutions at much less computational cost. Numerical tests are enclosed.

**TR 91-5** J. Gottschewski: *Supercomputing During the German Reunification.*

**Abstract:** The success of the German Reunification requires a unique migration from the traditional Eastern Block system to a modern free society. The successful migration must include a shift from a low state of the art in technology to the high level of science and technology present in the Western Community. The role of supercomputing in this transition will include leading the process of organizational change in research and development. The paper contains a short overview on the current state of this evolution, on the currently used political and administrative tools to keep this evolution on track, and on the influence on the Konrad-Zuse-Zentrum, which is, as a Berlin institution, in the geographical and cultural center of this transformation.

**TR 91-6** K. Schöffel: *Computational Chemistry Software for CRAY X-MP/24 at Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (ZIB).*

**Abstract:** The following report intends to provide a survey over the computational chemistry molecular structure software installed on CRAY X-MP/24 at ZIB. It shows what kind of problems can be tackled with the existing chemistry software, which covers a wide range of ab initio, semiempirical, molecular mechanics, and dynamics applications.

**TR 91-7** F.A. Bornemann: *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations in Two Space Dimensions.*

**Abstract:** A new adaptive multilevel approach for linear partial differential equations is presented, which is able to handle complicated space geometries, discontinuous coefficients, inconsistent initial data. Discretization in time first (Rothe's method) with order and stepsize control is perturbed by an adaptive finite element discretization of the elliptic subproblems, whose errors are controlled independently. Thus the high standards of solving adaptively ordinary differential equations and elliptic boundary value problems are combined. A theory of time discretization in Hilbert space is developed which yields to an optimal variable order method based on a multiplicative error correction. The problem of an efficient solution of the singularly perturbed elliptic subproblems and the problem of error estimation for them can be

uniquely solved within the framework of preconditioning. A multilevel nodal basis preconditioner is derived, which allows the use of highly nonuniform triangulations. Implementation issues are discussed in detail. Numerous numerical examples in one and two space dimensions clearly show the significant perspectives opened by the new algorithmic approach. Finally an application of the method is given in the area of hyperthermia, a recent clinical method for cancer therapy.

**TR 91-8** H. Gajewski, P. Deuffhard; P.A. Markowich (eds.): *Tagung NUMSIM'91 5.-8. Mai 1991, Collected Abstracts and Papers.*

NUMSIM'91 fand vom 6.-8. Mai 1991 im Wissenschaftlichen Kommunikations- und Konferenz-Zentrum der Humboldt-Universität in Gosen bei Berlin statt. Im Mittelpunkt dieses Seminars standen Probleme der numerischen Simulation von Ladungstransport- und Technologieprozessen der Mikro- und Optoelektronik. Es führte Spezialisten der physikalischen Modellierung, der numerischen Mathematik und mathematischen Analysis sowie Nutzer von Simulationsprogrammen aus dem deutschsprachigen Raum zusammen. Ziel war die Vermittlung und der Austausch von Erfahrungen, die Diskussion gemeinsamer Aufgabenstellungen und Projekte und - in Anbetracht der deutschen Vereinigung nicht zuletzt - das gegenseitige Kennen- und Verstehenlernen.

**TR 91-9** B.Ch. Schmidt, J. Weyer, P. Deuffhard, U. Nowak, U. Pöhle: *Die Ausbreitung von HIV/AIDS in Ballungsgebieten.*

**Abstract:** The rapidly increasing number of AIDS cases requires a realistic estimation of the future development of the HIV/AIDS disease. For that purpose we develop a large system of coupled nonlinear differential equations describing simultaneously the dynamics of the development of the disease, the population size, the gender and age structure. A set of 1650 coupled equations are linked by balanced parameters. The balancing procedure is described by a set of (formally) 2,178,000 additional algebraic conditions. As the considered system is stiff, it requires new special extrapolation methods combined with techniques of dynamical sparsing for the solution of sparsely filled systems. According to our simulations we expect 19,000-31,000 deaths caused by AIDS in the Federal Republic of Germany (former territories) in the year 2000. Such an epidemical spread would tie up about 4-7% of the actual health care workers.

**TR 91-10** U. Nowak, L. Weimann: *A Family of Newton Codes for Systems of Highly Nonlinear Equations.*

**Abstract:** This report presents new codes for the numerical solution of highly nonlinear systems. They realize the most recent variants of affine invariant Newton Techniques due to Deuffhard. The standard method

is implemented in the code NLEQ1, whereas the code NLEQ2 contains a rank reduction device additionally. The code NLEQ1S is the sparse version of NLEQ1, i.e. the arising linear systems are solved with sparse matrix techniques. Within the new implementations a common design of the software in view of user interface and internal modularization is realized. Numerical experiments for some rather challenging examples illustrate robustness and efficiency of algorithm and software.

### 5.3 Beiträge in Zeitschriften

1. J. Ackermann, K. Helfrich: *Simultaneous ab initio calculations of iso-electronic diatomic molecules*. Z. Phys. D-Atoms, Molecules and Clusters, **18**, p. 365 (1991)
2. J. Ackermann, H. Hogreve: *Adiabatic calculations and properties of the  $He_2^+$  molecular ion*. Chemical Physics, **157**, p. 75 (1991)
3. A. Björner, G.M. Ziegler: *Broken Circuit Complexes: Factorizations and Generalizations*. Journal of Combinatorial Theory, Series B **51**, p. 96-126 (1991)
4. A. Björner, G.M. Ziegler: *Introduction to greedoids*. In: N. White (ed.), Matroid Applications, Cambridge University Press, p. 284-357 (1991)
5. F.A. Bornemann: *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations II. Variable-Order Time Discretization Based on a Multiplicative Error Correction*. IMPACT Comput. Sci. Eng. **3**, p. 93-122 (1991)
6. M. Deza, M. Grötschel, M. Laurent: *Complete descriptions of small multicut polytopes*. In: Gritzmann/Sturmfels (Hrsg.), *Applied Geometry and Discrete Mathematics*, The "Victor Klee Festschrift" DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science, AMS/ACM, **4**, p. 221-252 (1991)
7. P. Deuffhard: *Global Inexact Newton Methods for Very Large Scale Nonlinear Problems*. IMPACT Comput. Sci. Eng. **3**, p. 366-393 (1991)
8. K. Gatermann, A. Hohmann: *Symbolic Exploitation of Symmetry in Numerical Pathfollowing*. Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (ZIB), Preprint SC 90-11 (1990). IMPACT Comput. Sci. Eng. **3** p. 330-365 (1991)
9. K. Gatermann, Ch. Hoffmann, G. Opfer: *Explicit Faber Polynomials on Circular Sectors*. Hamburger Beiträge zur Angewandten Mathematik, Preprint 40, 1991.

10. K. Gatermann: *Mixed symbolic-numeric solution of symmetrical nonlinear systems*. In St. Watt (Ed.), Proceedings of ISSAC-91, Bonn/Germany July 15-17, 1991 ACM New York, p. 431-432 (1991)
11. M. Grötschel, O. Holland: *Solution of large-scale symmetric traveling salesman problems*. In: Mathematical Programming **51**, p. 141-202 (1991)
12. M. Grötschel, C.L. Monma, M. Stoer: *Polyhedral approaches to network survivability*. In: F. Roberts et al. (eds.), Reliability of Computer and Communications networks, DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science **5**, AMS/ACM p. 121-141 (1991)
13. H.C. Hege, H. Stüben: *Vectorization and Parallelization of Irregular Problems via Graph Coloring*. Proc. of the ACM 1991 Int. Conf. on Supercomputing, p. 47-56 (1991)
14. K. Helfrich, C. Cornelißen, J. Ackermann: *Broken  $H_2^+$  symmetry of singly excited  $HeH^+$* . 12. Arbeitsbericht der Arbeitsgruppe energiereiche atomare Stöße, Ed. B. Fricke, Kassel, ISSN 0724-4975 (1991)
15. R.H.W. Hoppe, R. Kornhuber: *Multilevel Preconditioned CG-Iterations for Variational Inequalities*. Proceedings of the 5th Copper Mountain Conference on Multigrid Methods, (S. McCormick et al., eds.), Copper Mountain, Colorado (1991)
16. M. Jünger, M. Grötschel, G. Reinelt: *Optimal control of plotting and drilling machines: a case study*. In: ZOR - Methods and Models of Operations Research. **35**, p. 61-84 (1991)
17. R. Kornhuber, R. Roitzsch: *Self Adaptive Computation of the Break-down Voltage of Planar pn-Junctions with Multistep Field Plates*. Proceedings of the 4th International Conference of Simulation of Semiconductor Devices and Processes. Fichtner et al., (eds.) p. 535-543, Zürich (1991)
18. J.C. Lagarias, G.M. Ziegler: *Bounds for lattice polytopes containing a fixed number of interior points in a sublattice*. Canadian Journal of Mathematics **43**, p. 1022-1035 (1991)
19. H. Melenk: *REDUCE*. MathPad 1, Heft 3, Paderborn, September 1991
20. M. Stoer: *Design of survivable networks*. Dissertation, Universität Augsburg, Augsburg 1991

21. A. Walter: *Sparse Secant Methods for the Iterative Solution of Large Nonsymmetric Linear Systems*. Proceedings of the IMACS International Symposium on Iterative Methods in Linear Algebra, Brüssel, 2-4 April 1991
22. Th. Wanner, G.M. Ziegler: *Supersolvable and modularly complemented matroid extensions*. European Journal of Combinatorics **12** p. 341-360 (1991)
23. P. Wust, J. Nadobny, R. Felix, P. Deuffhard, A. Louis, W. John: *Strategies for Optimized Applications of Annular-Phased-Array Systems in Clinical Hyperthermia*, Int. J. Hyperthermia **7**, pp. 157-173 (1991)
24. G.M. Ziegler: *Some minimal non-orientable matroids of rank three*. Geometriae Dedicata **38** p. 365-371 (1991)
25. G.M. Ziegler: *Posets with maximal Möbius function*. Journal of Combinatorial Theory, Series A, **56** p. 203-222 (1991)
26. G.M. Ziegler: *Binary supersolvable matroids and modular constructions*. Proceedings of the American Mathematical Society **3**, 113, p. 817-829 (1991)

## 5.4 Monographien

- P. Deuffhard, A. Hohmann: *Numerische Mathematik. Eine algorithmisch orientierte Einführung*. Verlag de Gruyter: Berlin, New York (1991)

## 5.5 Dissertationen

15.02.91 M. Wulkow

Gutachter: P. Deuffhard, Berlin  
H. Ray, Madison

Thema der Dissertation: *Numerical Treatment of Countable Systems of Ordinary Differential Equation*

Thema der Disputation: *Numerische Lösung differentiell-algebraischer Systeme vom Index 2*

**11.11.91 F. A. Bornemann**

Gutachter: P. Deuffhard, Berlin  
H. Yserentant, Tübingen

Thema der Dissertation: *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations  
in Two Space Dimensions*

Thema der Disputation: *Theorie der mittleren Effizienz von Algorithmen  
nach S. Smale*

## 5.6 Herausgabe von Zeitschriften

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

**M. Grötschel** ist Mitherausgeber der Zeitschriften

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

## 6. Produkte

### 6.1 Fachinformation und Dokumentation

#### DMV-Projekt "Fachinformation"

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

**Kooperation:** K.-D. Bierstedt (Fachbereich Mathematik/Informatik, Universität Paderborn), W. Scharlau (Vorsitzender der Deutsche Mathematiker-Vereinigung e.V.)

Das Projekt wird gefördert durch das BMFT.

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Die "Deutsche Mathematiker-Vereinigung" (DMV) hat – mit einer Vorphase – ein Vorhaben "Verbesserung des benutzerorientierten Zugriffs auf fachspezifische Online-Datenbanken und CD-ROM für mathematische Institute in der Bundesrepublik Deutschland" begonnen, das den mathematischen Fachbereichen bei der Einführung, Nutzung und Konsolidierung elektronischer Fachinformation finanzielle, technische und organisatorische Unterstützung bieten soll.

Das Vorhaben wird im Rahmen des "Fachinformationsprogramms der Bundesregierung 1990–1994" durchgeführt und soll auf eine arbeitsplatznahe, einfach handhabbare und finanziell kalkulierbare Nutzung elektronischer Fachinformation hinwirken. Es orientiert sich auch an den Empfehlungen einer Studie zur Nutzung externer Datenbanken an Universitäten und Fachhochschulen (GEWIPLAN, Mai 1990) und der Westdeutschen Rektorenkonferenz (WRK).

Die Ziele des DMV-Vorhabens sollen durch folgende personelle, organisatorische und technische Infrastrukturmaßnahmen in den mathematischen Fachbereichen erreicht werden:

1. Schaffung der Funktion eines Fachinformationsbeauftragten und damit Institutionalisierung der elektronischen Fachinformation.
2. Konzeption und Realisierung einer auf den Fachbereich zugeschnittenen technischen Ausstattung zum Zugriff auf Online- und Inhouse-Datenbanken (Recherche-Arbeitsplatz bzw. dezentraler Zugriff über Workstations).
3. Progressive Eigenbeteiligung des Fachbereichs an den Recherchekosten und Schaffung eines Fachinformationsetats mit dem Ziel, auch über das Projektende hinaus, elektronische Fachinformation zu garantieren.

#### 4. Konzeption und Realisierung eines Schulungs- und Beratungskonzeptes.

Zur Durchführung kooperiert die DMV mit dem ZIB, bei dem die DMV die Projektleitung eingerichtet hat. Die zentrale fachliche Leitung wird von Prof. Grötschel wahrgenommen. Er wird – in der Vorphase – von Prof. Bierstedt unterstützt, der das Vorhaben innerhalb der DMV zur Entscheidungsreife getrieben hat. Die DMV hat, mit Unterstützung durch das ZIB, im November 1991 beim BMFT einen Antrag auf Förderung einer Vorphase gestellt, in der das Vorhaben fachlich und organisatorisch ausgestaltet wird.

Der BMFT hat sich inzwischen (im Januar 1992) entschieden, das gesamte DMV-Vorhaben als Modellprojekt zur Verbesserung der Rahmenbedingungen in den mathematischen Fachbereichen durchzuführen. Die Resonanz auf den Aufruf zur Teilnahme am DMV-Vorhaben (im Januar 1992) war erfreulich groß: Über 50 mathematische Fachbereiche und Institute waren an einer Teilnahme interessiert. Die Hauptphase soll am 1.9.1992 beginnen und eine Laufzeit von drei Jahren haben.

## 6.2 Software-Bibliotheken

### Elektronische Softwarebibliothek eLib

**Bearbeiter:** J. Lügger, W. Dalitz, B. Kirkorowicz, W. Neun

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

**Beschreibung der Forschungsarbeit:** Als kostenfreie Dienstleistung für die mathematische Community wird die elektronische Softwarebibliothek eLib entwickelt und eingesetzt. Über die eLib wurden im Berichtszeitraum etwa 8000 mathematische Algorithmen und Dokumente aus allen Bereichen des Wissenschaftlichen Rechnens angeboten, insbesondere ZIB-eigene Entwicklungen, wie die CodeLib, die jetzt im Wissenschaftsbereich gebührenfrei erhältlich ist. In den Grundstock der eLib wurden die (bis zum Jahresende) über 140 "Libraries" mit ihren etwa 6500 Softwarebausteinen und Dokumenten der international bekannten NetLib von J.J. Dongarra und E. Grosse und die etwa 400 Module der REDUCE Network Library (am ZIB RedLib genannt) von A.C. Hearn integriert. Der Einsatz der eLib erfolgte in Abstimmung mit der Fachgruppe "Numerische Software" (diverse Ankündigungen im Rundbrief). Für die Fachgruppe "Computeralgebra" ist in der eLib ein eigenständiger Bereich eingerichtet, dessen Dokumente von G. Schneider redaktionell betreut werden. Der Kern der eLib, der in der Version 2.0 etwa 1000 nach dem GAMS-Index des NIST klassifizierte Softwarebausteine enthält, ist Dialog-orientiert angelegt: Ein eLib-Benutzer kann Online- und mit Menü-Unterstützung direkt auf die Software zugreifen und sie inspizieren, bevor er sie (in der Regel per elektronischer Post) zu seinem Arbeitsplatz überträgt. Auf dieser Grundlage wurde ein mehrstufiges Verbundkonzept für eLib, NetLib und RedLib entwickelt, das es erlaubt, alle Bibliotheken in der eLib uniform anzusprechen: Software der NetLib und der RedLib, deren Originalversionen ausschließlich per e-mail bedient werden müssen, wird damit unmittelbar interaktiv zugreifbar. Für die eLib wurde hierdurch auch eine deutliche Verbesserung des Offline-Zugriffs erreicht. In diesem Zusammenhang gehört die Entwicklung eines Verfahrens zur automatischen Erzeugung von eLib-Menüs aus NetLib- und RedLib-Index-Dokumenten, die Realisierung eines universellen send-Mechanismus und die Implementierung einer

Zugriffsmöglichkeit mittels anonymen ftp's. Ein Auto-Register-Verfahren und ein Help-System waren weitere Neuerungen für Online-Anwender der eLib. Besonderer Wert wurde auf Verbesserungen beim Betrieb der eLib und ihrer Verbundbibliotheken gelegt (Monitoring, Statistik, Automatisierung von Updates und Testverfahren). Parallel betreibt das ZIB die NetLib und die RedLib als eigenständige Mailer. Die NetLib wird auf der Basis von Updates von E. Grosse etwa alle zwei bis drei Monate auf den neuesten Stand gebracht. Die RedLib wird in Zusammenarbeit mit A.C. Hearn und der Abteilung Symbolik wöchentlich aktualisiert. Die eLib ist aus praktisch allen Wissenschaftsnetzen erreichbar. 589 Benutzer haben sich für den Dialog ein eigenes Paßwort verschafft (für die Nutzung per e-mail und per ftp ist kein Paßwort notwendig). An der eLib wurden im Berichtszeitraum insgesamt 11106 "Sitzungen" durchgeführt, 8103 davon im Dialog und 3003 per elektronischer Post. Dabei wurden 71758 Dokumente bearbeitet bzw. inspiziert - etwa drei Viertel davon waren Menü- oder Index-Dokumente. Insgesamt wurden 7613 Files (157 MByte) von eLib-Anwendern verschickt und 1622 Files (47,8 MByte) in den ftp-Bereich geladen.

Bei der NetLib und der RedLib wurden nur einzelne "requests" gezählt, von denen mehrere innerhalb einer Dialog-Sitzung oder einer e-mail-Anfrage auftreten können: NetLib: insgesamt 8683 requests, davon 7119 im Dialog und 1564 per e-mail. RedLib: insgesamt 1683 requests, davon 730 im Dialog und 953 per e-mail. In diesen Angaben sind keine Zugriffe auf die Software von NetLib oder RedLib enthalten, die auf dem Wege über eLib-Menüs direkt erreichbar ist ("path" oder "Library-Index").

## Literatur

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

## 6.3 Verfügbare Produkte

### Programmpakete

#### CODELIB

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

#### 1. Große nichtsymmetrische lineare Gleichungssysteme

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

#### 2. Nichtlineare Gleichungssysteme und Ausgleichsrechnung

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

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

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

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

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

#### 3. Lösung von Anfangswertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen

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

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

- DIFEXM Nichtsteife Systeme zweiter Ordnung, Störmer-Diskretisierung mit  $h^2$ -Extrapolation
- KEPLEX Nichtsteife Systeme zweiter Ordnung, Kepler-Diskretisierung mit  $h^2$ -Extrapolation
- EULSIM Steife Systeme erster Ordnung, semi-implizite Euler-Methode mit  $h$ -Extrapolation
- METAN1 Steife Systeme erster Ordnung, semi-implizite Mittelpunktsregel mit  $h^2$ -Extrapolation
- LIMEX Extrapolationsverfahren mit  $h$ -Extrapolation, linear-implizite differentiell-algebraische Systeme
- LARKIN Simulation großer chemischer Reaktionskinetik

#### 4. Lösung von Randwertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen

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

#### 5. Stationäre partielle Differentialgleichungen

- ELLKASK Adaptive Multilevel-Verfahren mit linearen finiten Elementen für skalare, lineare elliptische Probleme auf beliebigen Gebieten in 2-D

#### REDUCE/PSL

Das ZIB vertreibt den LISP Dialekt Portable Standard LISP (PSL) und das darauf aufbauende Programmsystem REDUCE für symbolische Mathematik (Anthony C. Hearn et al.) weltweit für zahlreiche Rechnersysteme.

Zusätzlich wurden vom ZIB Vertriebslizenzen vergeben an CALCODE (Venice, CA, REDUCE für MS-DOS), Universität zu Köln (REDUCE für IBM/370), Joint Institute for Nuclear Research (Dubna, Rußland) und Queen Mary and Westfield College (London). Die folgenden im ZIB entwickelten Pakete für REDUCE sind erhältlich:

## 1. Anwendungspaket

SYMCON – K. Gatermann, A. Hohmann: *Lösung von Gleichungssystemen mit SYMMETRY mit Hilfe von Fortsetzungsmethoden* Erhältlich via ftp von elib am ZIB, 1991.

## 2. Bestandteile von REDUCE bzw. der REDUCE Network Library

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

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

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

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

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

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

## GOS

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

## 7. Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern

### 7.1 Vorträge und Gastaufenthalte

#### N. Ascheuer

08.08.91 *Hamiltonian path problems encountered in the optimization of an automatic storage system.* 14th International Symposium on Mathematical Programming, Amsterdam

10.09.91 *The optimization of an automatic storage system.* 16. Symposium on Operations Research, Trier

#### F.A. Bornemann

07.05.91 *An Adaptive Algorithm for the Solution of Parabolic Equations.* NUMSIM-Konferenz, Gosen bei Berlin

05.06.91 *Adaptive Multilevel Methoden, ein Überblick.* Mercedes-Benz AG, Stuttgart

08.07.91 *Adaptive Multilevel Discretization for Time Dependent PDE's.* ICIAM Conference, Washington D.C., USA

03.09.91 *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations in Two Space Dimensions.* The Summer Conference on Domain Decomposition, Lambrecht/Pfalz

16.10.91 *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations in Two Space Dimensions.* Second Workshop on Reliability and Adaptive Methods in Computational Mechanics, Krakau/Polen

22.11.91 *Ein in Zeit und Raum adaptiver Zugang zu parabolischen Differentialgleichungen in zwei Raumdimensionen.* Universität Kiel

#### H. Busch

06.06./17.10.91 *UNICOS auf der CRAY.* Benutzerkolloquium der ZRZ, Technische Universität Berlin

01.10.91 *Überblick über Parallelrechner.* Arbeitskreis Parallelsoftware, EDV-Zentrum der TU Wien

**23.10.91** *Erfahrungen mit NQS/RQS.* Arbeitskreis UNICOS, Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, Garching

**P. Deuffhard**

**22.02.91** *Inexakte Newtonverfahren für sehr große nichtlineare Gleichungssysteme.* Institut für Integrierte Systeme, ETH Zürich

**03.04.91** *Scientific Computing im geeinten Berlin.* Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Berlin

**11.04.91** *Iterative Lösung sehr großer nichtlinearer Gleichungssysteme.* TU "Otto von Guericke", Magdeburg

**05.-08.05.91** *Behandlung nichtlinearer Modelle im adaptiven Multilevelkonzept.* Tagung NUMSIM'91, Gosen (bei Berlin)

**31.05.91** *Simulationsmethoden in der Polymerchemie,* FMF-Kolloquium, Fakultät für Physik, Universität Freiburg

**08.-12.07.91** *Adaptive Multilevel Finite Element Methods — the next generation.* ICIAM 91/Minisymposium, Washington, D.C., USA

**16.07.91** *Numeric-Symbolic Pathfollowing Algorithms.* Conference on Numerical Optimization Methods in Differential Equations and Control, Raleigh, North Carolina, USA

**03.09.92** *New Results on Asymptotic Mesh Independence of Newton-Galerkin Methods,* Int'l. Conference on Domain Decomposition, Pfalz-Akademie, Lambrecht

**04.09.91** *Adaptive Multilevel-Methoden zur Lösung partieller Differentialgleichungen.* Abt. Technische Entwicklung, BASF, Ludwigshafen

**02.10.91** *Neue Simulationsmethoden des Chemical Engineering.* Informationstag, Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh), Fortbildung Chemie, Frankfurt/Main

**14.10.91** *Adaptive Newton-multilevel FEM for nonlinear PDEs.* Second Workshop on Reliability and Adaptive Methods in Computational Mechanics, TU Krakow, Polen

**15.11.91** *Adaptive gewichtete Galerkinmethoden am Beispiel von makromolekularen Prozessen.* Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen (IWR), Universität Heidelberg

- 21.11.91** *Numerische Methoden zur nichtlinearen Ausgleichsrechnung.* Quantitativ Ökonomisches Colloquium, Institut für Statistik und Ökonometrie, FU Berlin
- 06.12.91** *Kooperationsmöglichkeiten mit dem Konrad-Zuse-Zentrum.* Tagung "Scientific Computing bei Differentialgleichungen", Universität-GH Essen
- 12.12.91** *Modellierung und Computer-Simulation der AIDS-Ausbreitung.* Öffentlicher Vortrag, Urania, Berlin
- 16.12.91** *Adaptive gewichtete Galerkin-Methoden für makromolekulare Prozesse.* Mathematisches Kolloquium, Mathematisches Institut, Universität Stuttgart

#### **C. Ferreira**

- 24.09.91** *Das Mehrfachpartitionierungsprojekt - ein Überblick.* Siemens AG, München

#### **H.-H. Frese**

- 24.01.91** *UNIX Programmers Workbench.* Benutzerkolloquium der ZEDAT, Freie Universität Berlin
- 13.02.91** *UNIX Programmers Workbench.* Benutzerkolloquium der ZRZ, Technische Universität Berlin
- 18.-22.02.91** *UNIX Einführung.* Mitwirkung am Benutzerkursus der ZEDAT, Freie Universität Berlin
- 13.06.91** *FORTRAN90.* Benutzerkolloquium der ZEDAT, Freie Universität Berlin
- 27.06.91** *Numerik-Software.* Benutzerkolloquium der ZEDAT, Freie Universität Berlin
- 14.-18.10.91** *UNIX Einführung.* Mitwirkung am Benutzerkursus der ZEDAT, Freie Universität Berlin
- 24.10.91** *Die neue Rechnerausstattung am ZIB.* Benutzerkolloquium der ZEDAT, Freie Universität Berlin

## K. Gatermann

- 24.04.91 *Symbolic Exploitation of Symmetry in Numerical Pathfollowing*,  
3. Workshop Bifurcation Theory and Application, Woltersdorf
- 06.06.91 *Symbolic Exploitation of Symmetry in Numerical Pathfollowing*,  
Bifurcation and Symmetry, Marburg
- 18.06.91 *Linear Representations of Finite Groups and the Idealtheoretical Construction of G-invariant Cubature Formulas*, Numerical Integration Recent Developments, Software and Applications, Bergen/Norwegen
- 15.07.91 *Mixed symbolic-numeric solution of symmetrical nonlinear systems*, ISSAC'91 International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation, Bonn
- 21.09.91 *Gruppentheoretische Anwendung bei parameter-abhängigen Systemen*, Konstruktive Anwendungen der Algebra und Kombinatorik, Sommerschule in Thurnau

## J. Gottschewski

- 23.04.91 *Supercomputing during the German Reunification*. CRAY USER GROUP Conference, University of London
- 03.06.91 *Supercomputing im Konrad-Zuse-Zentrum*. Seminar des Interdisziplinären Arbeitskreises Computersimulation, Humboldt-Universität zu Berlin
- 23.-27.09.91 *CUG'92 in Berlin (6.-10.4.92)*. CRAY USER GROUP Conference, Santa Fe

## M. Grötschel

- 06.08.91 *Progress in Cutting Plane Methods*. 14th International Symposium on Mathematical Programming, Amsterdam, Niederlande
- 23.09.91 *Kombinatorische Optimierung in der Produktionsplanung*. Siemens Nixdorf AG, Augsburg
- 15.11.91 *Polyhedral Combinatorics I*. Vien Toan Hoc, Institute of Mathematics, Hanoi, Vietnam
- 15.11.91 *Polyhedral Combinatorics II*. Vien Toan Hoc, Institute of Mathematics, Hanoi, Vietnam

- 19.11.91** *Modern Cutting Plane Algorithms.* Vien Toan Hoc, Institute of Mathematics, Hanoi, Vietnam
- 19.11.91** *The Traveling Salesman Problem.* Vien Toan Hoc, Institute of Mathematics, Hanoi, Vietnam
- 21.11.91** *Computational Convexity.* Vien Toan Hoc, Institute of Mathematics, Hanoi, Vietnam
- 22.11.91** *Communication Networks.* Vien Toan Hoc, Institute of Mathematics, Hanoi, Vietnam
- 05.12.91** *Optimierungsprobleme auf binären Matroiden.* Fachbereich Mathematik, Humboldt-Universität Berlin
- 10.12.91** *Kombinatorische Optimierung: Theorie und Praxis.* Mathematisches Kolloquium, Universität Greifswald
- 16.12.91** *Algorithmische Aspekte konvexer Mengen.* Mathematisches Kolloquium, Technische Universität Wien, Österreich

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

- 21.05.91** *Visualisierung im wissenschaftlichen Rechnen.* Zentraleinrichtung für Datenverarbeitung (ZEDAT), FU Berlin
- 18.06.91** *Vectorization and Parallelization of Irregular Problems via Graph Coloring.* ACM Int. Conf. on Supercomputing, Köln
- 03.09.91** *Using Graph Coloring to Parallelize Irregular Problems.* Parallel Computing 91, London

#### **D. Kehl**

- 30.01./25.4./24.10.91** *Interleaf TPS: Hochleistungs-Dokumenten-Verarbeitung auf Workstations.* Benutzerkolloquium der ZRZ, Technische Universität Berlin
- 27.06.91** *Nutzung des Vektorrechners S400 am RRZN Hannover.* Benutzerkolloquium der ZRZ, Technische Universität Berlin

## R. Kornhuber

- 22.-26.4.91 *Numerical Simulation of High-Voltage Planar pn-Junctions by Self Adaptive Finite Element Methods*, IV. German-Italian Symposium on the Applications of Mathematics in Industry and Technology, TU München
- 04.07.91 *Multilevel-Vorkonditionierer für variationelle Ungleichungen*, Numerik-Seminar des Karl-Weierstraß-Instituts für Mathematik, Berlin
- 12.-14.09.91 *Self Adaptive Computation of the Breakdown Voltage of Planar pn-Junctions with Multistep Field Plates*, Poster-Session, 4th International Conference of Simulation of Semiconductor Devices and Processes, ETH Zürich
- 15.-20.09.91 *Adaptive Multilevel-Methoden für elliptische Randwertprobleme*, Sektionshauptvortrag in der Sektion "Wissenschaftliches Rechnen", Jahrestagung der Deutschen Mathematiker Vereinigung, Bielefeld

## H. Melenk

- 08.-10.07.1991 *REDUCE als Werkbank für technisch-wissenschaftliches Rechnen*. Universität Rostock
- 15.-20.09.91 *Einführung in REDUCE 3.4*. DMV Jahrestagung, Bielefeld

## U. Nowak

- 27.02.91 *Numerische Software des ZIB zur Lösung von DAEs und PDEs*. Fa. Henkel, Bereich Verfahrenstechnik, Düsseldorf
- 10.04.91 *Numerische Lösung sehr großer nichtlinearer Gleichungssysteme*. Institut für Integrierte Systeme, ETH Zürich
- 07.03.91 *Numerische Lösung von eindimensionalen parabolischen Systemen mit adaptiven und bewegten Gittern*. Institut für Chemische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart
- 02.11.91 Im Rahmen des Fortbildungstages "Neue Simulationenmethoden für das Chemical Engineering": *Integration von Differentialgleichungen und differentiell-algebraischen Systemen, Simulation großer Reaktionssysteme und verfahrenstechnischer Anlagen*, Frankfurt

## O. Paetsch

10.10.91 *apE - der Visualisierungswerzeugkasten*. Informationsveranstaltung über Visualisierungssoftware, Rechenzentrum, Universität zu Köln

## R. Roitzsch

07.05.91 *Numerical Simulation of High-Voltage Planar pn-Junctions by Self Adaptive Finite Element Methods*. NUMSIM'91, Gosen bei Berlin

## K. Schöffel

März 91 *Molecular Modelling for NonChemists*. Center for Industrial Mathematics, NTH Trondheim, Norwegen

März 91 *Biradicals, Potential Intermediates in Photochemical Reactions*. Kjemisk Institutt Tromsø, Norwegen

April 91 *Paralleles Rechnen in der Chemie*. Fachbereich Chemie, Universität Leipzig

April 91 *Die UNIX-Programmierungsumgebung*. Fachbereich Chemie, Universität Leipzig

04.06.91 *Semiempirische Molekül-Orbital-Methoden - ein kritischer Überblick*. Benutzerkolloquium der ZEDAT, Freie Universität Berlin

01.10.91 *Software für paralleles Rechnen in der Computerchemie*. Arbeitskreis Parallelsoftware, EDV-Zentrum der TU Wien

Oktober 91 *Suche nach geladenen Biradikalen zur Klärung einiger photochemischer Reaktionen*. Theoretische Chemie, Schering AG, Berlin

## H. Schulz

13.02.91 *Organisatorische Aspekte bei der Programmentwicklung in einer UNIX-Workstation-Umgebung*. Benutzerkolloquium der ZRZ, Technische Universität Berlin

18.04.91 *Grafikarbeitsplatz zur Farbfolien- und Dia-Erstellung*. Benutzerkolloquium der ZRZ, Technische Universität Berlin

**W. Stech**

**02.07.91** *Framemaker*. Benutzerkolloquium der ZEDAT, Freie Universität Berlin

**M. Stolle**

**23.05./21.11.91** *Das X-Window-System, eine graphische Benutzeroberfläche unter UNIX*. Benutzerkolloquium der ZEDAT, Freie Universität Berlin

**20.06.91** *Nützliche kleine C-Tools in Shell-Skripten auf UNIX-Systemen*. Benutzerkolloquium der ZEDAT, Freie Universität Berlin

**A. Walter**

**02.-04.4.91** *Sparse Secant Methods for the Iterative Solution of Large Nonsymmetric Linear Systems*. IMACS International Symposium on Iterative Methods in Linear Algebra, Brüssel

**R. Wesel**

**02.05./06.06./4.07.91** *Das Arbeiten auf der CD-Anlage unter dem Betriebssystem NOS/VE*. Mitwirkung am Benutzerkolloquium der ZEDAT, Freie Universität Berlin

## **7.2 Vorlesungen und Seminare**

### **Vorlesungen**

**P. Deuffhard**

**WS 90/91** *Numerik von Anfangswertmethoden für gewöhnliche Differentialgleichungen*, FU Berlin

**SS 91** *Numerik von partiellen Differentialgleichungen*, FU Berlin

**WS 91/92** *Adaptive Lösung von partiellen Differentialgleichungen*, FU Berlin

## Seminare

**F.A. Bornemann, M. Wulkow**

**WS 90/91** *Halbgruppentheorie und adaptive Algorithmen für Differentialgleichungen in Hilberträumen* (Lehrauftrag), FU Berlin

**P. Deuffhard, A. Hohmann**

**SS 91** *Numerik dynamischer Systeme I*, FU Berlin

**WS 91/92** *Numerik dynamischer Systeme II*, FU Berlin

## 7.3 Tagungen

**H. Gajewski, P. Deuffhard, P.A. Markowich**

**05.-08.05.91 NUMSIM'91.** NUMSIM'91 fand vom 6.-8. Mai 1991 im Wissenschaftlichen Kommunikations- und Konferenz-Zentrum der Humboldt-Universität in Gosen bei Berlin statt. Im Mittelpunkt dieses Seminars standen Probleme der numerischen Simulation von Ladungstransport- und Technologieprozessen der Mikro- und Optoelektronik. Es führte Spezialisten der physikalischen Modellierung, der numerischen Mathematik und mathematischen Analysis sowie Nutzer von Simulationsprogrammen aus dem deutschsprachigen Raum zusammen. Ziel war die Vermittlung und der Austausch von Erfahrungen, die Diskussion gemeinsamer Aufgabenstellungen und Projekte und – in Anbetracht der deutschen Vereinigung nicht zuletzt – das gegenseitige Kennen- und Verstehenlernen.

## 8. Gäste am ZIB

### 8.1 Gastvorträge

- 15.01.91 Dr. Martin Seebaß, Heidelberg: *3-D Simulation der interstitiellen Mikrowellen-Hyperthermie von Hirntumoren*
- 23.04.91 Dr. Richard Liska, Prag: *Towards Automation of Finite Difference Method for Solving PDE*
- 04.06.91 Prof. Qin Meng-zhao, Beijing: *Construction of Higher Order Schemes for ODEs by Composing Selfadjoint Ones*
- 18.06.91 Dr. Eckhard Platen, Karl-Weierstraß-Institut, Berlin: *Numerik stochastischer Differentialgleichungen*
- 08.10.91 Gerhard Zumbusch jr., München: *Implementation multilevel vorkonditionierter cg-Verfahren auf Parallelrechnern*
- 22.10.91 Prof. Dr. Peter Oswald, Jena: *Über Multilevel-Verfahren mit nichtkonformen Finiten Elementen*
- 04.11.91 Prof. Dr. M. Jünger, Universität zu Köln: *Implementierung von Branch and Cut Verfahren*
- 11.11.91 Prof. Martine Marion, Lyon: *Nonlinear Galerkin Methods in Large Scale Scientific Computing*
- 09.12.91 Dr. Grüter, Siemens, München: *(Ungelöste) Mathematische Probleme eines Industrieentwicklers*
- 12.12.91 Prof. Dr. Y. Wakabayashi, Universität São Paulo: *Odd/Even Cycles, Paths and Holes in Graphs: algorithms and complexity*

### 8.2 Gastaufenthalte

Atef Abdel-Aziz (Universität Kairo, Ägypten)  
vom 01.08.1991 – 31.2.1991  
(DAAD-Stipendiat)

Prof. Dr. Adrian Bondy (University of Waterloo, Kanada)  
vom 09.09.1991 – 13.9.1991

Alexander Eichberger (DLR Oberpfaffenhofen)  
vom 26.04.1991 – 27.04.1991

Carlos Ferreira (Universität São Paulo, Brasilien)  
vom 01.08.1991 – 31.12.1991  
(DAAD–Stipendiat)

Prof. Dr. Bernold Fiedler (Universität Stuttgart)  
vom 20.04.1991 – 23.04.1991

Dr. Roland Freund (NASA Ames Research Center, USA)  
vom 25.02.1991 – 02.03.1991

Dr. Claus Führer (DLR Oberpfaffenhofen)  
vom 26.04.1991 – 27.04.1991

Prof. Dr. Martin Grötschel (Universität Augsburg)  
vom 19.03.1991 – 21.03.1991

Dr. Vladimir P. Gerdt (JINR, Dubna, UDSSR)  
vom 09.11.1991 – 15.11.1991

Dr. Anthony C. Hearn (RAND Corporation, Santa Monica, USA)  
vom 13.10.1991 – 27.10.1991

Prof. Dr. Ronald H.W. Hoppe (Technische Universität München)  
vom 07.10.1991 – 12.10.1991

Dr. Richard Liska (Technische Universität Prag, CSSR)  
vom 22.04.1991 – 24.04.1991

Prof. Dr. Christian Lubich (Universität Innsbruck, Österreich)  
vom 23.04.1991 – 27.04.1991

Bertrand Maury (Palaiseau Cedex, Frankreich)  
vom 22.04.1991 – 06.07.1991  
(Stipendiat Ecole Polytechnique, Paris)

Dr. Stephan Müller (ETH Zürich, Schweiz)  
vom 02.05.1991 – 08.05.1991

André Nieuwland (Delft, Niederlande)  
vom 12.08.1991 – 11.11.1991

Dr. Claude Pommerell (ETH Zürich, Schweiz)  
vom 02.05.1991 – 08.05.1991

Prof. Dr. Florian Potra (University of Iowa, USA)  
vom 26.05.1991 – 28.05.1991

Prof. Mengzhao Qin (Academia Sinica, Beijing, China)  
vom 03.06.1991 – 07.06.1991

Janusz Rydel (Universität Warschau, Polen)  
vom 01.10.1991 – 31.12.1991  
(DAAD–Stipendiat)

Dr. E. Schrüfer (GMD Bonn)  
vom 16.10.1991 – 19.10.1991

Dr. Bernhard Schmidt (Universität Köln)

vom 25.08.1991 – 30.08.1991

Prof. Dr. Yoshiko Wakabayashi (Universität São Paulo, Brasilien)

vom 01.10.1991 – 31.12.1991

(DFG-Förderung)

Dr. Daoliu Wang (Academia Sinica, Beijing, China)

vom 01.01.1991 – 31.07.1991

(Stipendiat der Alexander von Humboldt-Stiftung)

Prof. Dr. Jürgen Weyer (Universität Köln)

vom 28.08.1991 – 30.08.1991

### **8.3 Tagungen und Veranstaltungen im ZIB**

**05.03.91** Einführungskursus der ABACOM Software GmbH über "BACUS"

**16.10.91** Informationsveranstaltung CRAY/ZIB/DFN *Supercomputer-Lösungen für Wissenschaft und Industrie*

**21./22.10.91** ADINA-Seminar und Anwendertreffen *Lineare und nicht-lineare Finite-Elemente-Analysen mit ADINA in Forschung und Industrie*

**27.11.91** Informationsveranstaltung der CRAY Research GmbH unter Beteiligung des ZIB für die HUB *Der Einsatz von Supercomputern an Universitäten*

**29.11.91** Colloquium BAM/ZIB über Probleme der Materialforschung

## 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 1991 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr.-Ing. Klaus Dierks, TUB, Vorsitzender – bis 31.3.1991  
Prof. Dr. Kurt Kutzler, TUB, Vorsitzender – ab 1.4.1991
- Prof. Dr.Dr. Walter Schunack, FUB
- StS Dr. Hans Kremendahl, Senatsverwaltung WiFo – bis 28.1.1991  
StS Steffie Schnoor, Senatsverwaltung WiFo – ab 29.1.1991
- Dr. Reinhard Baumgarten, Senatsverwaltung Wirtsch. u. Technologie
- Prof. Dr. Gerhard W. Becker, Bundesanstalt für Materialforschung
- Prof. Dr. Hans H. Stiller, Hahn-Meitner-Institut – bis 31.8.1991  
Prof. Dr. Erich te Kaat, Hahn-Meitner-Institut – ab 1.9.1991

Im Jahre 1991 tagte der Verwaltungsrat am 17. Januar und am 18. Dezember.

Präsident des ZIB ist Prof. Dr. Peter Deuffhard. Als Vizepräsident amtiert seit dem 1.8.1991 Prof. Dr. Martin Grötschel (vormals Universität Augsburg).

## 9.2 Wissenschaftlicher Beirat

Der Wissenschaftliche Beirat setzt sich unverändert wie folgt zusammen:

Prof. Dr.-Ing. Konrad Zuse	-	Ehrevorsitzender
Prof. Dr. Clemens Baack	-	Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin GmbH
Prof. Dr. Karl Ganzhorn	-	ehemals IBM Deutschland, Stuttgart
Herr Lebrecht Metzger	-	Siemens-Nixdorf GmbH, Berlin
Dr. Heinz Schwärzel	-	Siemens AG, München
Prof. Dr. Ulrich Trottenberg	-	Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung (GMD), Bonn
Prof. Dr. Karl Zander	-	ehemals Hahn-Meitner-Institut Berlin

## 9.3 Personalrat

Dem Personalrat gehören unverändert an:

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

Vertrauensmann der Schwerbehinderten ist Wolfgang Maibauer.

## 9.4 Satzung

Der Entwurf einer Satzung soll im Frühjahr 1992 erstellt werden. Mit einer Beratung und Verabschiedung durch den Verwaltungsrat ist im Laufe des Jahres 1992 zu rechnen.

## 9.5 ZIB-Fellows

Präsident und Vizepräsident vergeben an wenige ausgewählte Wissenschaftler das Konrad-Zuse-Fellowship, in dessen Rahmen im Jahre 1991 die folgenden Projekte bearbeitet wurden:

Prof. Dr. B. Fiedler (Universität Stuttgart)  
*Dynamische Systeme*

Prof. Dr. R. Hoppe (TU München)  
*Numerische Lösung freier Randwertprobleme*

Prof. Dr. Chr. Lubich (ETH Zürich, Schweiz)  
*Mehrkörpersysteme*

Prof. Dr. M. Möller (Fernuniversität Hagen)  
*Gröbner-Basis-Algorithmen*

Dr. E. Schrüfer (GMD Bonn)  
*I. Symbolisch-numerische Algorithmen*  
*II. Parallele Symbolik*

Prof. Dr. J. Weyer (Universität Köln)  
*AIDS-Ausbreitungsmodelle*

Prof. Dr. G. Wittum (Universität Heidelberg)  
*Unvollständige LU-Zerlegung auf irregulären Gittern*

## 9.6 Mitgliedschaften

Das ZIB ist Mitglied folgender Organisationen:

1. DFN
2. ECUDO
3. Forum für Zukunftsenergien
4. NAG Users Association
5. SIAM
6. CRAY User Group

## 9.7 Wirtschaftliche Situation

Die wirtschaftliche Situation des ZIB zeichnete sich durch Kontinuität aus. Verfügungsbeschränkungen durch den Senat von Berlin konnten durch sparsame Wirtschaftsführung aufgefangen werden.

Der im Jahre 1991 erfreulicherweise erfolgte Amtsantritt des Vizepräsidenten hatte erhebliche personelle und finanzielle Anstrengungen zur Folge. Dank

der in den vergangenen Jahren geübten Zurückhaltung bei den Ausgaben und der hieraus resultierenden Vorsorge gelang es, die gewünschte Ausstattung in dem erforderlichen Umfang bereitzustellen und dem Vizepräsidenten und seiner Arbeitsgruppe gute Startbedingungen zu verschaffen.

Ohne die Gehälter und Dienstbezüge der planmäßigen Mitarbeiter beliefen sich die Aufwendungen im Berichtsjahr auf 10.320 TDM, wovon auf Investitionen 1.737 TDM entfielen.

Das Land Berlin leistete einen Zuschuß von 9.550 TDM. Die eigenen Erträge aus Kooperationen und Drittmittelprojekten betragen im Berichtsjahr 770 TDM.

## 9.8 Personelle Entwicklung

Für die planmäßigen Mitarbeiter (92,5 Stellen, davon 8 für Beamte und 84,5 für Angestellte) waren im Haushaltsplan des Landes Berlin nach Durchschnittssätzen 6.640 TDM ausgewiesen.

Die Zahl der Beschäftigten entwickelte sich wie folgt:

	31.12.90	31.12.91
Leitung	3	5
Wiss. Personal	35	35
Drittmittelpersonal	4	5,75
Projektpersonal	3	3
Programmierer und DV-Personal	27,5	28,5
Technisches Personal/Bibliothek	6	6,5
Verwaltungspersonal	9,5	11,5
Studentische Hilfskräfte	7	11
<b>Insgesamt</b>	<b>95,0</b>	<b>106,25</b>

## Ansprechpartner

<b>Präsident:</b>	<b>Prof. Dr. Peter Deuffhard</b> Inhaber des Lehrstuhls Scientific Computing am Fachbereich Mathematik der Freien Universität Berlin Tel. 8 96 04-101	
<b>Vizepräsident:</b>	<b>Prof. Dr. Martin Grötschel</b> Inhaber des Lehrstuhls <i>Diskrete Mathematik</i> am Fachbereich Mathematik der Technischen Universität Berlin Tel. 8 96 04-210	
<b>Numerik:</b>	<b>P. Deuffhard/</b> <b>R. Kornhuber</b>	<b>8 96 04-101</b> <b>8 96 04-174</b>
<b>Numerische Software- Entwicklung:</b>	<b>U. Nowak</b>	<b>8 96 04-175</b>
<b>Symbolik:</b>	<b>H. Melenk</b>	<b>8 96 04-195</b>
<b>Kombinatorische Optimierung:</b>	<b>M. Grötschel/</b> <b>G. M. Ziegler</b>	<b>8 96 04-210</b> <b>8 96 04-211</b>
<b>Visualisierung und Paralleles Rechnen:</b>	<b>H.-Ch. Hege</b>	<b>8 96 04-141</b>
<b>Software- Information:</b>	<b>J. Lügger</b>	<b>8 96 04-173</b>
<b>Rechenzentrum:</b>	<b>J. Gottschewski</b>	<b>8 96 04-130</b>
<b>Vektorrechner:</b>	<b>H. Busch</b>	<b>8 96 04-135</b>
<b>Wissenschaftlich- Technische Dienste:</b>	<b>K. André</b>	<b>8 96 04-180</b>
<b>Verwaltung:</b>	<b>H. Thieme</b>	<b>8 96 04-100</b>

---

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB)

Heilbronner Straße 10 D-1000 Berlin 31 (Halensee)

Telefon: (0 30) 8 96 04-0

Telefax: (0 30) 8 96 04-125

e-mail: *Nachname*@zib-berlin.de