8.8. Angewandte Mathematik, Stochastik und praktische Informatik

8.8.1. Zwei-Ebenen-Optimierung: Modell, Transformation, Optimalitätsbedingungen, Anwendungen

S. Dempe (Institut für Numerische Mathematik und Optimierung)

Mathematische Optimierung / Lösungsalgorithmen / Verallgemeinerte Ableitungen / Optimalitätsbedingungen

Zwei-Ebenen-Optimierungsaufgaben sind Probleme der mathematischen Optimierung, bei denen die Nebenbedingungen zum Teil durch den Graphen der Optimalmengenabbildung einer zweiten (parametrischen) Optimierungsaufgabe beschrieben werden. Mathematisch sind dies nichtkonvexe, nichtdifferenzierbare Optimierungsaufgaben. Interessant sind sie auch wegen ihrer umfangreichen Anwendungen in Naturwissenschaften, Technik und Ökonomie.
Bearbeitet wurden unter anderem Anwendungsaufgaben bei der Bestimmung von Eigenschaften wie Innendurchmesser und Rauhigkeit der Rohre in bestehenden Wasserleitungsnetzen [10,11], der Bestimmung von Preisen für den Handel mit Erdgas [8] und optimaler Straßenbenutzungsgebühren [9].
Schwerpunkte bei der theoretischen Untersuchung dieser Modelle sind notwendige und hinreichende Optimalitätsbedingungen. Ergebnisse dieser Untersuchungen sind in den Arbeiten [4-6] enthalten. Untersuchungsgegenstand sind die Transformation der Zwei-Ebenen-Optimierungsaufgabe in eine Ein-Ebenen-Aufgabe unter Zuhilfenahme der Optimalwertfunktion der Aufgabe der unteren Ebene und die Beschreibung der Optimalitätsbedingungen mit Hilfe modernster Methoden der nichtdifferenzierbaren Optimierung (Zusammenarbeit mit J. Dutta und B. Mordukhovich (Wayne University, Detroit, U.S.A.)).
In der Arbeit [3] mit J. Dutta (Indian Institue of Technology Kanpur) wird beschrieben, dass der zumeist in der Literatur verwendete Zugang der Transformation der Aufgabe mit Hilfe der Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen für das Problem der unteren Ebene bei Betrachtung lokal optimaler Lösungen nicht anwendbar ist. Das ist eine wichtige Aussage, da Lösungsalgorithmen für die entstehende mathematische Optimierungsaufgabe mit Gleichgewichtsnebenbedingungen (MPEC) nur in der Lage sind, lokal optimale Lösungen (oder auch nur stationäre Punkte) zu berechnen. Diese Punkte sind im allgemeinen keine lokal optimalen Lösungen der Zwei-Ebenen-Optimierungsaufgabe. Damit ist der Nachweis gelungen, dass diese Algorithmen für die Lösung von Zwei-Ebenen-Optimierungsaufgaben nicht anwendbar sind. Modifikationen solcher Algorithmen sind deshalb zu untersuchen. Das war Gegenstand der Dissertationsschrift [1] von A. G. Mersha.
Im Jahre 2006 erschien ein Sammelband [7] zum Thema der Zwei-Ebenen-Optimierungsaufgaben unter Herausgeberschaft von V. Kalashnikov (ITESM, Campus Monterrey, Mexiko) und S. Dempe. Die Bibliographie [2] zählt zu den 20 am meisten zitierten Arbeiten der internationalen Zeitschrift „Optimization“. Gäste am Institut im Zusammenhang mit diesem Forschungsthema waren Prof. N. Gadhi (Sidi Mohamed Ben Abdellah University, Dhar El Mehrez, Fes, Marokko; Preisträger der Alexander-von-Humboldt Stiftung), Aaron Franco (Monterrey, Mexiko) und J. Dutta. S. Dempe wurde im Sommer 2008 als Gutachter für die Dissertationsschrift von Dr. Kadrani (Universität Sherbrooke, Kanada) auf dem Gebiet der mathematischen Optimierungsaufgaben mit Gleichgewichtsnebenbedingungen berufen.

Literatur:
1. Ayalew Getachew Mersha: Solution Methods for Bilevel Programming Problems. Dissertationsschrift, TU Bergakademie Freiberg, eingereicht September 2008.
2. S. Dempe: Annotated Bibliography on Bilevel Programming and Mathematical Programs with Equilibrium Constraints, Optimization, 52 (2003) 333-359.
3. S. Dempe, J. Dutta: Is bilevel programming a special case of a mathematical program with complementarity constraints? Preprint, TU Bergakademie Freiberg, 2008.
4. S. Dempe, J. Dutta, S. Lohse: Optimality conditions for bilevel programming problems, Optimization, 55 (2006), 505-524.
5. S. Dempe, J. Dutta, B. Mordukhovich: New necessary optimality conditions in optimistic bilevel programming, Optimization 56 (2007) 5 & 6, 577-604.
6. S. Dempe, J. Dutta, B. Mordukhovich: Variational Analysis in Bilevel Programming. In: Mathematical Programming and Game Theory for Decision Making, S. K. Neogy et al. (eds), World Scientific, 2008.
7. S. Dempe, V. Kalashnikov (Eds.): Optimization with Multivalued Mappings: Theory, Applications and Algorithms. Springer Science+Business Media, LLC, 2006.
   S. Dempe, V. Kalashnikov, R. Z. Rios-Mercado: Discrete bilevel programming: Application to a natural gas cash-out problem. European Journal on Operational Research, 166 (2005), pp. 469-488.
8. S. Dempe, S. Lohse: Optimale Mautgebühren. In: B. Luderer (Hrsg.): Kunst des Modellierens, Vieweg+Teubner, Wiesbaden, 2008, S. 113-125.
9. J. Deuerlein, R. Cembrowicz, S. Dempe: Simulation der Hydraulik von Wasserversorgungsnetzen mit Kontrollarmaturen, gwf - Wasser/Abwasser, 144 (2003) 7-8, 509-515.
10. J. Deuerlein, R. Cembrowicz, S. Dempe: Hydraulic simulation of water supply networks under control. World Water and Environmental Resources Congress 2005. Proceedings. Anchorage Convention Center, Anchorage, Alaska, U.S.A., 15.-19.5.2004.

8.8.2. Effiziente numerische Verfahren für die Auswertung von Funktionen hochdimensionaler Matrizen

M. Afanasjew, M. Eiermann, O. G. Ernst, S. Güttel (Institut für Numerische Mathematik und Optimierung)

Matrixfunktion / Restarted Krylow-Verfahren / Stabile Implementierung / Konvergenzanalyse

Die Berechnung von Matrixfunktionen f(A)b ist eine Aufgabe, die zum Beispiel im Zusammenhang mit der Lösung von algebraischen und Differentialgleichungen auftritt. Hier sind f eine Funktion, A eine quadratische Matrix und b ein gegebener Vektor. Häufig handelt es sich bei f um die Exponentialfunktion wie beispielsweise bei exponentiellen Integratoren, einer Klasse von Verfahren zur Lösung steifer Differentialgleichungen. In vielen Anwendungen ist die Matrix A dünn besetzt und so groß, dass der Vektor f(A)b direkt bestimmt werden muss, d.h. ohne Berechnung der voll besetzen Matrix f(A).
Im Rahmen eines von der DFG geförderten Projekts wurden speichereffiziente und hoch parallele Algorithmen (so genannte Restarted Krylow-Verfahren) zur Lösung dieser Aufgabe entwickelt. Entscheidend ist eine stabile Implementierung dieser Verfahren, ein Problem, das wir in der Zwischenzeit gelöst haben (vgl. http://www.mathe.tu-freiberg.de/~guettels/funm_kryl/). In Anwendungen ist es erforderlich, die Approximationsgüte des Verfahrens beurteilen zu können. Zu diesem Zweck wurde eine Konvergenzanalyse durchgeführt, die a priori sowie a posteriori Abschätzungen liefert. Zu unserer Überraschung treten in diesem

Zusammenhang „chaotische Phänomene“ auf, wie man sie aus der Theorie dynamischer Systeme kennt (vgl. Abbildung).

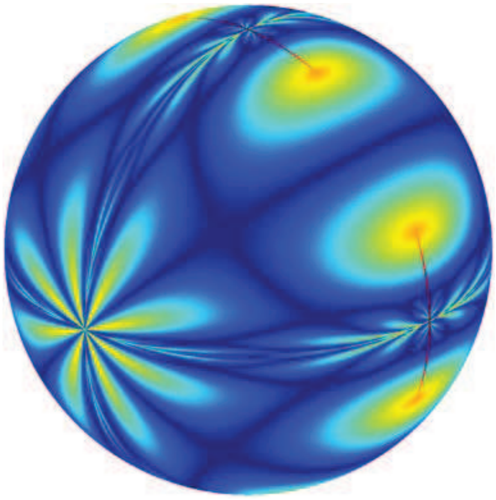


Abb.: Konvergenzgeschwindigkeit eines Restarted Krylow-Verfahrens in Abhängigkeit des Startvektors für ein Modellproblem

Die Untersuchungen der theoretischen Eigenschaften dieser Methoden werden fortgesetzt in Zusammenarbeit mit dem National Institute of Informatics, Tokyo, sowie dem Laboratoire de Mathématiques Paul Painlevé der Université des Sciences et Technologies de Lille.

8.8.3. Thick Restarts für Matrixfunktionen

M. Eiermann, O. G. Ernst, S. Güttel (Institut für Numerische Mathematik und Optimierung)

Matrixfunktion / Thick Restart / Maxwell-Gleichungen / Konvergenzbeschleunigung

TEM (Transiente Elektromagnetik) ist ein geophysikalisches Verfahren zur Erkundung der Leitfähigkeitsverteilung im Untergrund. In diesem Zusammenhang spielt die numerische Lösung der Maxwell-Gleichungen eine wichtige Rolle. Nach geeigneter Diskretisierung kann diese Aufgabe auf die Auswertung der Exponentialfunktion für eine sehr große Matrix reduziert werden. Das momentan effizienteste Lösungsverfahren ist unter dem Namen Spectral Lanczos Decomposition Method (SLDM) bekannt. Will man das elektromagnetische Feld im gesamten Simulationsbereich bestimmen (und nicht an wenigen Punkten), so wird der Speicherbedarf von SLDM unvertretbar groß. Durch Anwendung von Restart Techniken kann dieser Speicherbedarf drastisch reduziert werden, was allerdings auf Kosten der Konvergenzgeschwindigkeit geht. Diese Verzögerung der Konvergenz kann durch den Einsatz einer neuen Thick Restart Technik weitestgehend kompensiert werden, was in der folgenden Abbildung an einem Maxwell-Problem mit 565.326 Feldkomponenten illustriert wird:

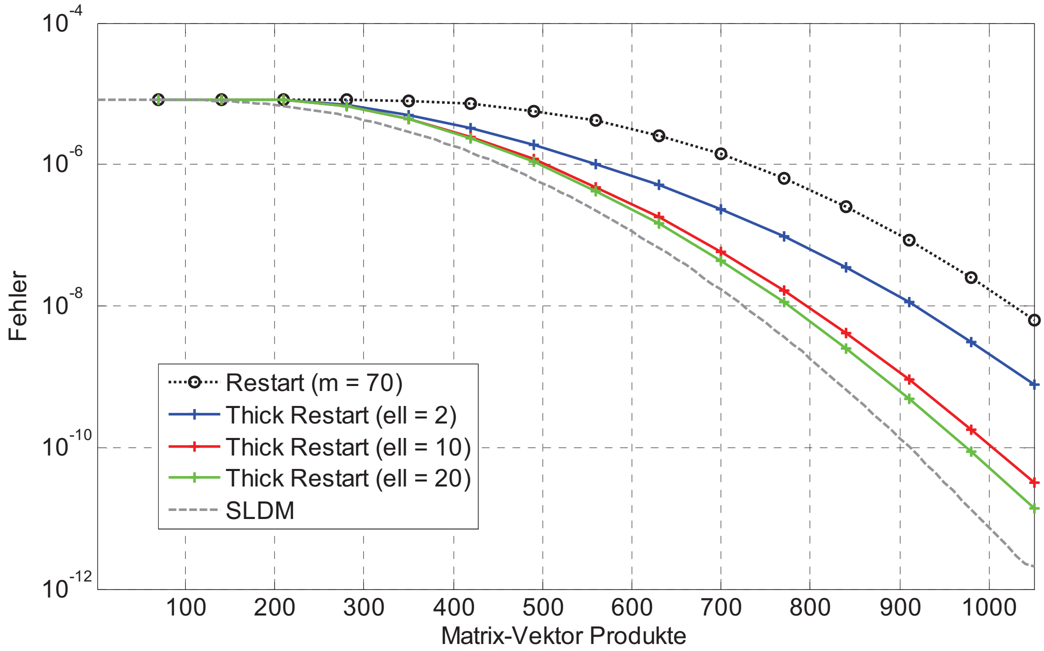


Abb.: Konvergenzgeschwindigkeit von SLDM und eines Restarted Krylow-Verfahrens mit einem (fixen) Speicherbedarf von m=70 Vektoren für verschiedene Thick-Restart Parameter ell

Die Untersuchungen der Thick-Restart Techniken werden in Zusammenarbeit mit dem Institut für Geophysik fortgesetzt und teilweise von der DFG finanziert.

8.8.4. Eigenwertprobleme für Integraloperatoren mit Kovarianzkernen

I. Busch, O. Ernst, E. Ullmann (Institut für Numerische Mathematik und Optimierung)

Integraloperatoren / Zufallsfelder / KL-Entwicklung / Hierarchische Matrizen

Am Institut für Numerische Mathematik und Optimierung werden seit einigen Jahren die Stochastische Finite-Element-Methode (SFEM) bzw. Stochastische Galerkin-Verfahren (SG) untersucht. Für diese Methoden müssen Unsicherheiten in den Daten mathematisch beschrieben werden. Dabei ist ein Ansatz die stochastische Beschreibung der Daten mittels Zufallsfelder. Um diese Zufallsfelder numerisch behandeln zu können, müssen sie durch eine endliche Darstellung approximiert werden. Eine Möglichkeit dieser Approximation ist die abgebrochene Karhunen-Loève-Entwicklung (KL-Entwicklung).

Diese Darstellung erfordert die Berechnung einiger Eigenpaare eines Integraloperators, der die Kovarianzfunktion des Zufallsfeldes als Kern besitzt. Eine Galerkin-Diskretisierung dieses Integraloperators führt auf ein sehr großes verallgemeinertes Eigenwertproblem für (vollbesetzte) Matrizen.

Die Einträge der entstehenden Matrizen sind dabei Integrale, die durch Quadraturformeln approximiert werden. In einigen Fällen ergeben sich aber Integranden, die mit Standardmethoden nicht berechnet werden können. Um den Integraloperator also effizient zu diskretisieren, ist es notwendig, geeignet an die Kernfunktion angepasste Quadraturformeln zu verwenden. Am Institut für Numerische Mathematik und

Optimierung werden hierfür aus den Randelementmethoden stammende Ansätze untersucht und weiterentwickelt.

Für die Lösung des entstehenden Eigenwertproblems ist es problematisch, dass eine der Matrizen voll besetzt und sehr groß ist. Dadurch sind klassische direkte sowie iterative Eigenwertalgorithmen praktisch nicht anwendbar. Einen Ausweg bietet die Approximation dieser Matrix durch eine sogenannte hierarchische Matrix. Die Technik der hierarchischen Matrizen wurde am Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften in Leipzig entwickelt und hat den Vorteil, dass der Aufwand für eine Matrix-Vektor-Multiplikation reduziert wird, wodurch sich iterative Methoden wie die Krylov-Unterraum-Methoden anwenden lassen. In diesem speziellen Fall handelt es sich um Lanczos-Verfahren für symmetrische Matrizen.
Mit Hilfe der angepassten Quadraturformeln und den hierarchischen Matrizen ist es möglich, solche Eigenwertprobleme auf einem gewöhnlichen Desktop-Rechner (2 mal 2GHz und 2GB RAM) unter MATLAB bis zu einer Matrixdimension von 32.000 in unter 5 Minuten zu lösen.

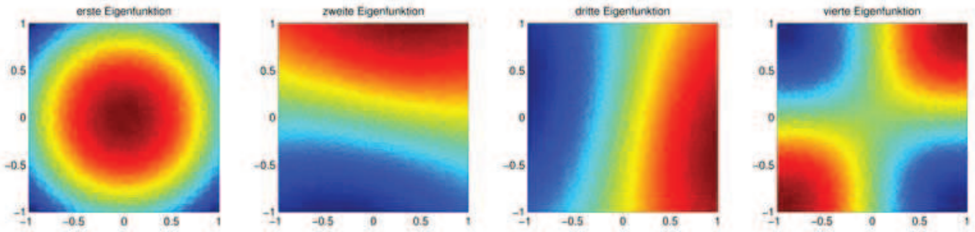


Abb.: Einige Eigenfunktionen eines Integraloperators mit Kovarianzkern auf dem Einheitsquadrat

8.8.5. Quantifizierung von Unsicherheit bei Computer-Simulationen von Grundwasserströmung mit Schwerpunkt Schadstoffausbreitung

O. Ernst, E. Ullmann (Institut für Numerische Mathematik und Optimierung)

Grundwasserströmung / Unsicherheit / Numerische Simulation / Schadstoffausbreitung

Die Computer-Simulation von Schadstoffausbreitung im Grundwasser stellt einen zunehmend wichtiger werdenden Bestandteil bei der Beurteilung von Umweltrisiken und der Technikfolgenabschätzung dar. Diese Simulationen beruhen auf Eingangsdaten wie Bodeneigenschaften, Niederschlagsmengen etc., deren Bestimmung bzw. Messung erheblichen Unsicherheiten unterliegt. Bei der Interpretation und Beurteilung des Simulationsergebnisses sind daher quantitative Aussagen über die Auswirkungen solcher Datenunsicherheiten wichtig.

Monte-Carlo-Methoden erfordern oft eine große Anzahl von Simulationen mit jeweils einer Realisierung der zufälligen Eingangsdaten. Ein effizienterer Ansatz ist die Stochastische Finite-Elemente-Methode (SFEM), mit der man direkt eine kompakte Darstellung des zufälligen Simulationsergebnisses erhält.

In Zusammenarbeit mit Prof. Silvester und Dr. Powell von der University of Manchester wurde die SFEM zur numerischen Simulation einer stationären Einphasenströmung im gesättigten Untergrund bei zufälliger hydraulischer Durchlässigkeit implementiert. Die Berechnung des zufälligen Geschwindigkeitsfeldes bildet die Grundlage für zeitabhängige Simulationen zur Schadstoffausbreitung und erfolgte unter Verwendung einer sogenannten gemischten Finite-Elemente-Diskretisierung. Diese Technik erlaubt eine gleichzeitige akkurate Berechnung von hydraulischem Druck und volumetrischem Fluss.

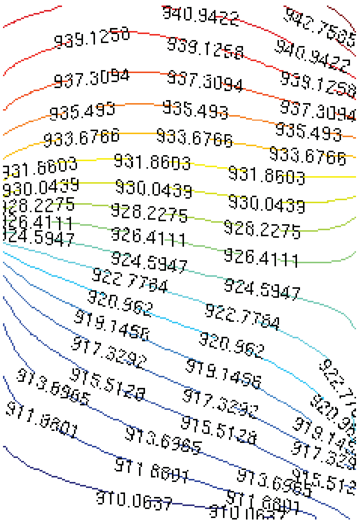


Abb. 1: Mittelwert Druck

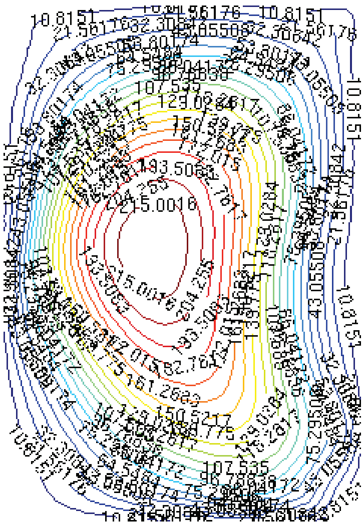


Abb. 2: Varianz Druck

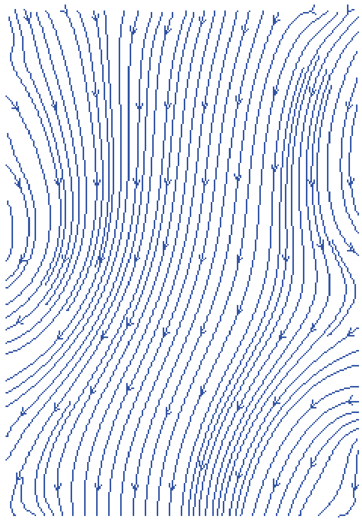


Abb. 3: Mittelwert Fluss

Darüberhinaus wurden effiziente Lösungsverfahren für das bei der SFEM entstehende sehr große lineare Gleichungssystem studiert. Diese beinhalten sowohl neue Vorkonditionierer als auch Recyling-Techniken für entkoppelte Gleichungssysteme.

Die Wissenschaftler am Institut für Numerische Mathematik und Optimierung, welche seit mehreren Jahren Lösungsalgorithmen für die SFEM entwickeln, haben dabei insbesondere von der Expertise der britischen Forscher auf dem Gebiet der gemischten Finite-Elemente-Diskretisierungen und den assoziierten Gleichungslösern profitiert. Umgekehrt konnte die SFEM-Technik erfolgreich auf gemischte Formulierungen von Grundwasserströmungsproblemen mit unsicheren Eingangsdaten angewendet werden.

Die Arbeit wurde im Programm Projektbezogener Personenaustausch vom DAAD (Projekt-Nr. D/06/12721) und vom British Council (Projekt-Nr. 1279) gefördert.

8.8.6. Modellreduktion im Frequenzbereich zur transientelekromagnetischen Vorwärtsrechnung

O. Ernst (Institut für Numerische Mathematik und Optimierung)

R. Börner, K. Spitzer (Institut für Geophysik)

Numerische Simulation / Elektromagnetische Felder / Geophysikalische Erkundung / Modellreduktion

Im Rahmen des DFG-Projektes „Numerische Simulation transientelektromagnetischer Felder zur Erkundung des Untergrundes“ haben die Autoren ein neues, auf Modellreduktion basierendes Verfahren zur schnellen Lösung der dreidimensionalen Maxwell-Gleichungen im Frequenzbereich entwickelt. Ausgenutzt wird hierbei, dass bei der TEM-Vorwärtsrechnung der Frequenzverlauf der Felder nur an wenigen Messpunkten benötigt wird, sodass nur die Abbildung von künstlichen Quellen auf die Felder an den Messpunkten zu simulieren ist. Nach der Diskretisierung ist diese Abbildung eine rationale Funktion der Frequenzvariablen. Beim entwickelten *Model Reduction in the Frequency Domain (MRFD)* Verfahren wird diese rationale Funktion durch rationale Funktionen niedrigen Grades vom Padé-Typ approximiert. Diese Approximation wird auf sehr effiziente Weise durch Krylov-Unterraumverfahren realisiert, bei denen ein auf die Diskretisierungsmatrizen basierender Krylov-Unterraum generiert wird und das hochdimensionale 3D-Frequenzbereichsproblem in diesen Krylov-Raum projiziert wird. Das resultierende Verfahren hat sich an geophysikalischen Modellproblemen bis zu zehnmal schneller erwiesen als die in diesem Bereich bisher üblichen. Derzeit ist eine Weiterentwicklung von MRFD in Arbeit, bei der mehrere Quellen sowie mehere Messpunkte auf einmal, d.h. mit einem einzigen Krylov-Raum, bearbeitet werden können. Die Vorstellung ieses Verfahrens in der Literatur und auf Fachtagungen hat große Resonanz, vor allem bei der Erdölindustrie, gefunden.

8.8.7. Stochastische Galerkin-Verfahren: Grundlagen und Algorithmen

I. Busch, O. Ernst, E. Ullmann (Institut für Numerische Mathematik und Optimierung)

Quantifizierung von Unsicherheit / Finite Elemente / Zufallsfelder / Numerische Simulation

Numerische Simulation hat sich in den letzten 50 Jahren zu einer dritten Methodik des Erkenntnisgewinns neben Theorie und Experiment etabliert. Dabei werden mathematische Modelle physikalischer Vorgänge in der Sprache der Differential- und Integralgleichungen formuliert und deren Lösungen mit numerischen Verfahren auf immer leistungsfähigeren Computern approximiert. Das Hauptinteresse lag hier in der Vergangenheit auf Diskretisierungsverfahren und Algorithmen, die auf effiziente Weise Lösungen mit nahezu beliebiger Genauigkeit im Rahmen der verfügbaren Rechnerarithmetik liefern können. Ein Aspekt, der bei diesem Vorgehen oft nicht hinreichend berücksichtigt wird, ist dass die Lösungen -- d.h. die Ergebnisse der Simulation – von gemessenen, geschätzten oder aus vorausgehenden Berechnungen gewonnenen Daten abhängen und diese oft erheblichen Unsicherheiten unterliegen. In vielen Rechnungen überwiegt sogar der Effekt von Unsicherheiten den der Runde- oder Diskretisierungsfehler. Um diesem Umstand zu begegnen hat sich in den letzten ca. 10 Jahren das neue Forschungsgebiet der Uncertainty Quantification herausgebildet mit dem Ziel, Unsicherheiten in Daten und deren Auswirkung auf die Lösungen systematisch zu quantifizieren und so eine ganz neue Qualität bei der Interpretation und Beurteilung von Simulationsergebnissen zu ermöglichen.

Ein erfolgversprechender Ansatz hierfür ist die stochastische Beschreibung von Unsicherheiten mittels Zufallsvariablen und Zufallsfelder. Einfache Ansätze – als Monte-Carlo-Methoden (MC) bekannt – erzeugen hierzu eine sehr große Anzahl zufälliger Realisierungen der unsicheren Daten und führen für jede Realisierung eine deterministische Simulation durch. Da jede dieser Simulationen für sich genommen schon einen erheblichen Aufwand darstellen kann – man denke etwa an dreidimensionale instationäre Verbrennungsvorgänge oder Mehrphasenströmungen in Erdöllagerstätten – und da MC-Simulationen für genaue stochastische Aussagen eine große Zahl Realisierungen erfordern, ist diese Methode oft sehr ineffizient.

Am Institut für Numerische Mathematik und Optimierung werden seit einigen Jahren Algorithmen zur Umsetzung eines neuen Ansatzes verfolgt, der unter dem Namen Stochastische Finite-Element-Methode (SFEM) bzw. Stochastische Galerkin-Verfahren (SG) bekannt sind. Der Vorteil dieses Ansatzes liegt in der schnelleren Konvergenz im Vergleich zu MC-Methoden und der Tatsache, dass Lösungen dieser Formulierung viel weitergehende stochastische Informationen über den zugrunde liegenden Prozess liefern, da mit den Ergebnissen der Rechnung theoretisch die Wahrscheinlichkeit jedes interessierenden Ereignisses berechnet werden kann. Ziel hierbei sind neben der Entwicklung schneller numerischer Algorithmen zur Umsetzung dieser Methode auch die Verfeinerung der stochastischen Beschreibung der Daten.

Diese Arbeit wird gefördert durch die DFG im Rahmen des Schwerpunktprogramms 1324 *Extraktion quantifizierbarer Information aus komplexen Systemen* in einem gemeinsamen Projekt mit Prof. Hans-Jörg Starkloff der FH Zwickau.

8.8.8. Numerische Simulation transientelektromagnetischer Felder zur Erkundung des Untergrundes

M. Afanasjew, M. Eiermann, O. Ernst, S. Güttel, (Institut für Numerische Mathematik und Optimierung)

R. Börner, K. Spitzer (Institut für Geophysik)

Numerische Simulation / Elektromagnetische Felder / geophysikalische Erkundung

Die transientelektromagnetische Methode (TEM) ist ein geophysikalisches Erkundungsverfahren, bei dem aus Messungen des zeitlichen Verlaufes durch künstliche Quellen hervorgerufener elektromagnetischer Felder an der Erdoberfläche Rückschlusse auf die Leitfähigkeitsverteilung im Boden und somit auf dessen Beschaffenheit gezogen werden. Gegenüber anderen geoelektrischen Verfahren zeichnet sie sich aus durch kompakte Messbereiche und kurze messdauer. Anwendungen sind die Suche nach Grundwasser sowie Bodenschätzen wie Erze oder Kohlenwasserstoffe bis in eine Tiefe von ca. 2000 m.

Im Gegensatz zu direkten bildgebenden Verfahren wie der Seismik ist bei TEM nach der Messung zur Auswertung eine Inversionsrechnung erforderlich, bei der aus den Messungen der Felder auf die Leitfähigkeitsverteilung geschlossen wird. Hierzu muss wiederholt das sogenannte Vorwärtsproblem, d.h. die zeitliche Integration der Maxwellschen Gleichungen für eine Folge von Leitfähigkeitsverteilungen, gelöst werden. Somit beruht eine schnelle Auswertung der Messungen auf effizienten Lösern des Vorwärtsproblems.

In einem von der DFG geförderten Projekt entwickeln Mitarbeiter der Institute für Geophysik sowie Numerische Mathematik und Optimierung gemeinsam effiziente Algorithmen für diese Aufgabenstellung. Neu sind hierbei für diese Anwendung die Kombination von finite-Element-Diskretisierungen basierend auf Nédélec-Elementen zur Behandlung komplizierter Topographien sowie von Mehrgitterverfahren und auf Krylov-Verfahren basierende exponentielle Integrationsmethoden für eine gegenüber herkömmlichen Zeitschrittverfahren deutlich schnellere Zeitintegration.

.

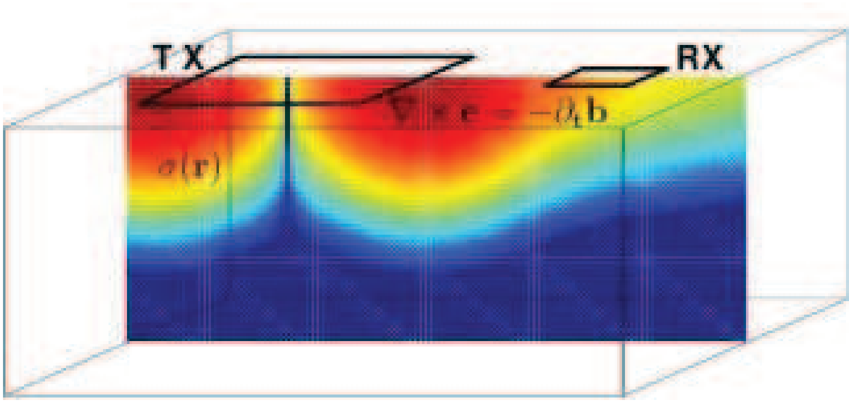


Abb.: **Vertikaler Schnitt durch das elektrische Feld einer vertikalen magnetischen Dipolquelle an der Bodenoberfläche im homogenen Halbraum.**

8.8.9. Gruppoid-Varietäten

U. Hebisch (Institut für Diskrete Mathematik und Algebra)

Gruppoid / Varietät / Halbring

Unter einer Varietät versteht man in der Algebra eine Klasse gleichartiger Algebren, die sich durch eine Menge von Gleichungen charakterisieren lassen. Während für klassische Algebren wie beispielsweise Halbgruppen, Verbände und Ringe zahlreiche Untersuchungen über Varietäten existieren, liegen für allgemeinere Strukturen wie Gruppoide oder Halbringe nur sehr vereinzelte Ergebnisse vor. In einer Arbeitsgruppe wurden im Rahmen von Diplom- und Bachelor-Arbeiten systematisch Gruppoid-Varietäten untersucht, die sich durch Gleichungen höchstens der Länge 5 charakterisieren lassen. Während für die Länge 4 sämtliche 59 möglichen Varietäten bestimmt werden konnten, zeigen erste Resultate, dass für die Länge 5 mit mindestens 2500 Varietäten zu rechnen ist.

8.8.10. Räumliche Verteilung und strukturelle Abhängigkeiten von ökologisch relevanten Merkmalen in Mischbeständen

W. Näther, K. Wälder (Institut für Stochastik)

Punktprozessmodelle / Konkurrenzverhalten / Strukturelle Gleichungen

Das gemeinsam mit Prof. Wagner (TU Dresden, Professur für Waldbau) und Prof. Bredemeier (Universität Göttingen, Professur für Bodenkunde und Waldernährung) durchgeführte Projekt ist ein Baustein in Richtung mathematisch-statistischer Modellierung des Ressourcenmanagements im Ökosystem Wald. Speziell wurden durch die Projektpartner z. B. in Buche-Fichte-Mischbeständen Effekte wie Fruchtausbreitung, Feinwurzelverteilung, Saugspannung, Humusbilanz, Niederschlag, Niederschlagschemie, Strahlung und Kronengeometrie experimentell untersucht. Diese und weitere experimentelle Studien bildeten die Datengrundlage für die Freiberger Stochastiker.
Bei der Herleitung von statistischen Modellen zur Beschreibung der räumlichen Ausbreitung von Baumeffekten konnte zunächst auf Erkenntnisse aus dem 2004 abgeschlossenen DFG-Projekt „Versuchsplanung und statistische Auswerteverfahren zur Ermittlung des Einzelbaumeinflusses“ zurückgegriffen werden. Außerdem lagen erste Ergebnisse zur Modellierung von Interaktionseffekten und des Konkurrenzverhaltens bei Bäumen vor (s. Näther/Wälder (2007)).
Jetzt lag der Schwerpunkt in der gemeinsamen Modellierung mehrerer Effekte, insbesondere im Erkennen gegenseitiger Abhängigkeiten. So konnte z.B. ein Strukturgleichungsmodell für die Humusmasse in Abhängigkeit von den endogenen Variablen „Buchenlaub-Input“, „Fichtennadel-Input“, „Globalstrahlung“ und „Kronentraufe“ unter Einbeziehung der latenten Variablen „Zersetzungsmilieu“ und „Zersetzungshemmung“ identifiziert und ökologisch sinnvoll interpretiert werden (s. Wälder u.a. (2008)).
Weitere Ergebnisse und detailliertere Darlegungen sind im Abschlussbericht des Projekts zu finden. Die verschiedenen Modellierungsvarianten sind im Softwaretool WaldStat implementiert worden.

Literatur:
Näther/Wälder (2007): Applying fuzzy measures for considering interaction effects in root dispersal models, Fuzzy Sets and Systems 158, S. 572-582

Wälder/Frischbier/Bredemeier/Näther/Wagner (2008): Analysis of O_F-layer humus mass variation in a mixed stand of European beech and Norway spruce: An application of structural equation modelling, Ecological Modelling 213, 319-330

DFG-Abschlussbericht zu NA318/2-1 & 2-2 (2008)

8.8.11. Theorie hyperbolischer Systeme

M. Reissig (Institut für Angewandte Analysis)

Korrektheit / Ausbreitungseffekte / Energie

In vielen Anwendungen in Natur und Technik, z.B. in der Gasdynamik, treten quasilineare Modelle auf. Dabei hängen die Koeffizienten der mathematischen Modelle von den gesuchten Lösungen oder deren Ableitungen ab. Zum Verständnis von qualitativen Eigenschaften solcher Lösungen benötigt man ein solches für die vorgelegten Modelle mit Koeffizienten niederer Regularität. Häufig kommt man dabei zu hyperbolischen Systemen. Für solche Systeme sind schon elementare Fragen offen wie die von Wellenmodellen bekannte endliche Ausbreitungsgeschwindigkeit von Störungen. Das Projekt widmet sich solchen Fragestellungen. Außerdem werden Korrektheitsresultate in Sobolevskalen bewiesen. Gegenbeispiele zeigen die Optimalität der gewonnenen Erkenntnisse. In einem zweiten Teil des Projektes wird das Langzeitverhalten von Energien von Lösungen hyperbolischer Systeme untersucht. Insbesondere ist die Wachstumsrate der Energien für große Zeiten von Interesse.

In Kooperation mit Prof. Tamotu Kinoshita (Universität Tsukuba) entstehen 2009 zwei Publikationen im Rahmen des Projektes.

Finanzierung: Haushalt, Stipendium JSPS

8.8.12. P-Evolutionsgleichungen

Ch. Böhme, T. Herrmann, M. Reissig (Institut für Angewandte Analysis)

Regularität / Energieerhaltung / Zeitoszillationen

Im Jahr 2011 sind der Abschluss der Promotionen von Frau Dipl.-Math. Ch. Böhme und von Herrn Dipl.-Math. T. Herrmann am Institut für Angewandte Analysis geplant. Beide Dissertationen widmen sich Fragen der Theorie von P-Evolutionsgleichungen. Frau Böhme studiert Klein-Gordon Gleichungen, das sind spezielle 1-Evolutionsgleichungen, und hinterfragt den Einfluss von Potentialen auf das Verhalten von Klein-Gordon Typ Energien. Dabei ist sie an verallgemeinerten Energieerhaltungen interessiert, diese schließen bekanntlich decay- und blow-up Verhalten für große Zeiten aus.
Herr Herrmann studiert das Cauchy-Problem für degenerierte P-Evolutionsgleichungen, ist dabei am optimalen Regularitätsverlust der Lösungen gegenüber den Daten interessiert. Insbesondere soll er eine Klassifizierung von P-Evolutionsoperatoren liefern, die in Skalen von Sobolevräumen behandelbar sind.
Beide Themenstellungen benötigen Hilfsmittel aus der Phasenraumanalysis, der WKB-Analysis und der Floquet-Theorie.

Im Jahr 2009 geht Frau Böhme für 6 Monate als JSPS-Stipendiat an die Yamaguchi-Universität in Japan, im Jahr 2010 ist für Herrn Herrmann ein längerer Aufenthalt an der Universität Bologna geplant.

Finanzierung: Haushalt, Stipendium JSPS

8.8.13. Wellengleichungen mit strukturierter Dämpfung

M. Reissig (Institut für Angewandte Analysis)

Viskoelastische Dämpfungen / Energieabschätzungen / WKB-Analysis

Verschiedene Anwendungen führen auf Wellenmodelle mit Dämpfungen. Hierbei unterscheidet man zwischen äußerer und innerer Dämpfung, letztere wird auch als strukturierte Dämpfung bezeichnet. Typische Beispiele strukturierter Dämpfungen sind solche viskoelastischer Natur. Es gibt zahlreiche Resultate für Innengebiete, sehr wenig ist bekannt für den Ganz-Raum Fall.
Das Forschungsprojekt beschäftigt sich mit zeitabhängigen strukturierten Dämpfungen für Wellenmodelle im Ganz-Raum Fall. Es soll untersucht werden, unter welchen Bedingungen die Modelle eine hyperbolische Natur oder eine parabolische Natur besitzen. Dazu benötigt man detaillierte Erkenntnisse über das Verhalten von Energien höherer Ordnungen. Um solche Fragen beantworten zu können, muss eine dem Modell angepasste elliptisch-hyperbolische WKB-Analysis entwickelt werden.

In Kooperation mit der Forschungsgruppe von Prof. Daoyuan Fang (Universität Hangzhou) arbeitet ein chinesischer Doktorand, Herr Lu Xiaojun, an dieser Problematik. Der Abschluss der Dissertation wird für das Jahr 2010 erwartet.

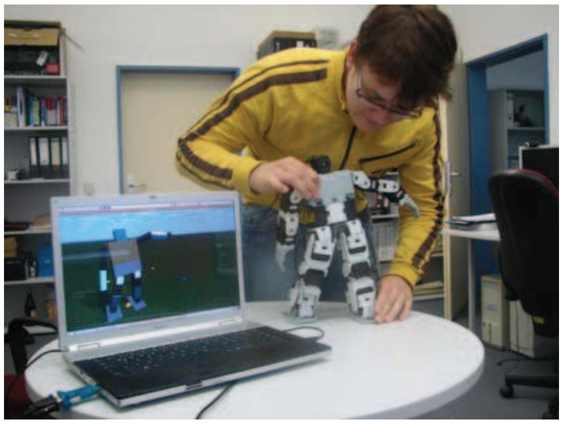
Finanzierung: DFG und NSFC

8.8.14. Telepräsenz mit intelligenten, lernenden Robotern

H. Ben Amor, N. Pranke, E. Berger, D. Vogt, K. Froitzheim, B. Jung (Institut für Informatik)

Robotik / Telepräsenz / Maschinelles Lernen / Video-Streaming

In dem gemeinsamen Projekt der Professuren Virtuelle Realität und Multimedia (Prof. Jung) und Betriebssysteme und Kommunikationstechnologien (Prof. Froitzheim) werden Roboter entwickelt die über das Internet gesteuert werden können. Anders als beim Vorgänger, der Freiberger Internet Eisenbahn, treten die Roboter in einem Fußballspiel gegeneinander an. Die Anwender bekommen dabei, mithilfe der Internet-Videotechnologien des Instituts, Videos über die aktuelle Situation auf dem Fußballfeld zu sehen. Gegenstand des Forschungsprojektes ist insbesondere die Entwicklung von intelligenten Steuerungsalgorithmen für teleoperierte Roboter wie auch die Erforschung effizienter Video-Streaming Techniken für das Internet. Mithilfe von Verfahren des Imitationslernens werden den Robotern auf intuitive Weise neue Bewegungen beigebracht, ohne dass dabei auf komplizierte Programmierung zurückgegriffen werden muss. Weiterhin wird in dem Projekt untersucht, wie neuartige Mensch-Maschine Schnittstellen mithilfe von Multimedia und Virtueller Realität realisiert werden können. Die hier entwickelten Verfahren haben Anwendungspotential in anderen Telepräsenz Anwendungen, wie z.B. in der Raumfahrt oder in sicherheitskritischen Umgebungen.
.



8.8.15. Konkurrenzhypergraphen

M. Sonntag (Institut für Diskrete Mathematik und Algebra)

Hypergraph / Zusammenhang / Hamiltonizität / Ökosystem

1968 führte J. E. Cohen den Begriff des ***Konkurrenzgraphen*** eines gerichteten Graphen (Digraphen) ein, wobei letzterer das Nahrungsnetz eines Ökosystems repräsentiert. Ein Aspekt der in derartigen Nahrungsnetzen in der Biologie untersuchten Jäger-Beute-Beziehungen sind Konkurrenzbeziehungen der Jäger untereinander, die aus gemeinsamen Beuten resultieren. Jägermengen mit gemeinsamer Beute werden klassischerweise als Cliquen im Konkurrenzgraphen dargestellt. Untersucht man nun die auf diese Art entstandenen Digraphen bzw. Graphen, so stellt man spezielle Struktureigenschaften fest; typisch ist oft die Schlingenfreiheit, da meist Jäger die eigene Art nicht als Beute haben. Hieraus resultiert das Interesse an Strukturuntersuchungen von Konkurrenzgraphen.
Einen wesentlich höheren Informationsgehalt als Konkurrenzgraphen bietet das Modell der ***Konkurrenzhypergraphen***, das in Zusammenarbeit mit H.-M. Teichert (Universität zu Lübeck) entwickelt und untersucht wurde. Da in Hypergraphen auch Kanten höherer Kardinalität als 2 auftreten dürfen, können nun Jägermengen als Kanten an Stelle von Cliquen modelliert werden. Dadurch werden die Konkurrenzbeziehungen realer Jäger-Beute-Systeme in vielen Fällen erheblich besser widergespiegelt.

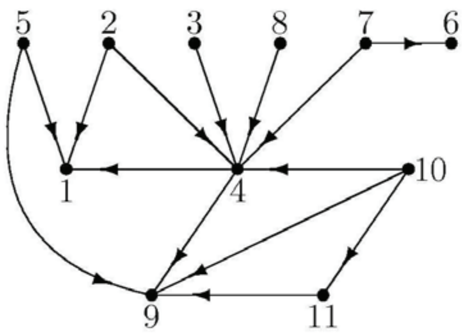


Abb. 1: Jäger-Beute-Beziehungen als Digraph

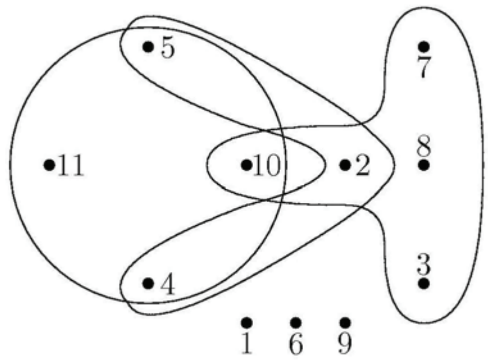


Abb. 2: Zugehöriger Konkurrenzhypergraph (Kanten sind die Jägermengen mit gemeinsamer Beute)

In mehreren gemeinsamen Veröffentlichungen wurden – neben grundlegenden Struktureigenschaften – speziell auch Konkurrenzhypergraphen stark zusammenhängender und Hamiltonscher Digraphen untersucht. Obwohl dabei einerseits Zusammenhänge zu entsprechenden graphentheoretischen Resultaten sichtbar werden, ergeben sich andererseits interessante Unterschiede, die auf den deutlich allgemeineren Hypergraphenbegriff zurückzuführen sind.

8.8.16. Virtual Workers – Interaktive Digitale Menschmodelle für das Virtuelle Prototyping

B. Jung, H. Ben Amor, G. Heumer, A. Vitzthum (Institut für Informatik)

Virtuelle Realität / Virtuelles Prototyping / Maschinelles Lernen / Computeranimation

Gegenstand des DFG-geförderten Projekts „Virtual Workers“ ist die Entwicklung neuartiger, auf dem Einbezug teilautonomer digitaler Menschmodelle beruhender Methoden für die Evaluation virtueller Prototypen mit Techniken der Virtuellen Realität (VR). Ein Hauptaspekt betrifft die Übertragung von in VR durchgeführten Bedienungsprozeduren auf digitale Menschmodelle unterschiedlicher anthropometrischer Statur. In Erweiterung des etablierten Motion Capture-Verfahrens, das (nur) die Bewegungen eines Akteurs mittels Positionstrackern erfasst, werden hier zusätzlich auch die Interaktionen des Benutzers mit den Objekten der virtuellen Umgebung analysiert und auf virtuelle Figuren überspielt. In Anlehnung an Arbib's Formel action = movement + goal (d.h. Handlungen betreffen ein Zielobjekt) wurde für das in Entwicklung befindliche Animationsverfahren der Begriff „Action Capture“ eingeführt. Die dabei angestrebte Imitation auf Ebene von Handlungen anstatt bloßer Bewegungen impliziert Robustheit gegen Veränderungen zwischen der Ausgangssituation, in welcher die Handlung vorgemacht wurde, und den Zielsituationen, in welchen die Handlung nachgeahmt wird. Wird z.B. das Greifen eines bestimmten Objekts demonstriert, so sollte die Reproduktion der Handlung auch dann möglich sein, wenn das Objekt an einer anderen Position platziert ist oder wenn ein ähnliches aber nicht identisches Objekt zu greifen ist. Ebenso sollten Handlungen auf virtuelle Menschmodelle unterschiedlicher anthropometrischer Ausmaße übertragbar sein.

Abb. 1: Die Bedienung eines virtuellen Prototypen wird in Virtueller Realität erprobt

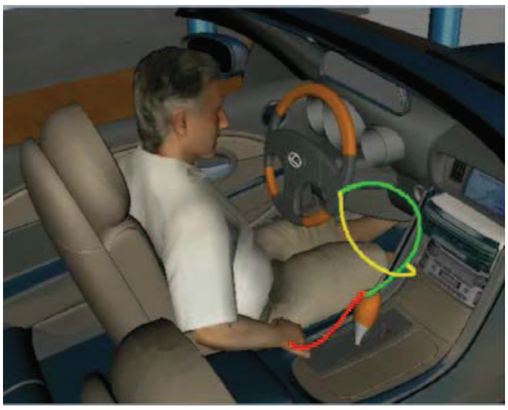


Abb. 2: Zur weiteren Erprobung werden Animationen mit virtuellen Testpersonen erzeugt, welche die vorgemachten Bedienvorgänge nachahmen.

Viel versprechendes Anwendungspotential für das Action Capture Verfahren besteht insbesondere im Virtuellen Prototyping, wo aus interaktiven Evaluationen eines VR Benutzers eine Vielzahl von Animationen mit virtuellen Menschmodellen unterschiedlicher Statur generiert werden kann.

8.8.17. Riemann-Hilbert-Probleme, Kreispackungen und konforme Geometrie

E. Wegert, G. Semmler (Institut für Angewandte Analysis)

Randwertprobleme / Analytische Funktionen/ Kreispackungen

Nichtlineare Randwertprobleme der Funktionentheorie sind für das Verständnis analytischer Funktionen von grundlegender Bedeutung. Zu ihren Anwendungen zählen beispielsweise freie Randwertaufgaben, Optimierungsprobleme beim Entwurf dynamischer Systeme und Probleme der Streutheorie. Das Institut für Analysis ist seit Jahren an der Entwicklung dieses Forschungsgebiets maßgeblich beteiligt.
Durch eine neuartige Betrachtung bestimmter Typen von Kreispackungen wurde in den letzten 20 Jahren besonders in den USA und Israel eine diskrete Version der komplexen Funktionentheorie geschaffen. Obwohl diese auf sehr einfachen geometrischen Konzepten aufbaut, gibt es eine ganze Reihe erstaunlicher Parallelen zu den klassischen Resultaten. Ein fundamentales Ergebnis von Koebe, Andrejev und Thurston ist ein diskretes Analogon des Riemannschen Satzes über konforme Abbildungen.
Konforme Abbildungen sind ein Spezialfall nichtlinearer Riemann-Hilbert Probleme. Im Forschungsprojekt wird untersucht, inwieweit sich die klassischen Ergebnisse für lineare und nichtlineare Randwertprobleme von Riemann-Hilbert, Riemann-Hilbert-Poincaré und Beurling auf den Kontext der durch Kreispackungen definierten diskreten Geometrie übertragen lassen.

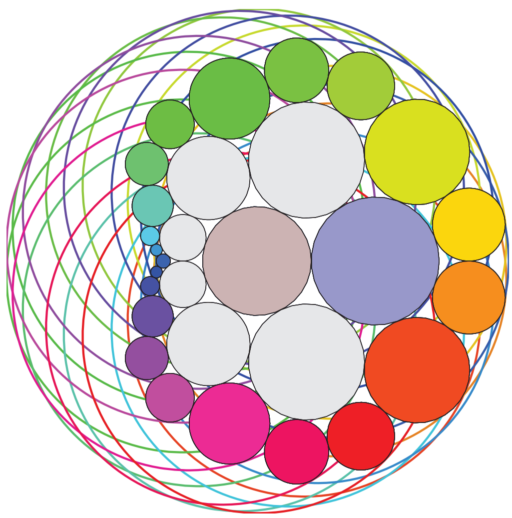


Abb. 1: Ein diskretes Riemann-Hilbertsches Randwertproblem für eine kleine Kreispackung

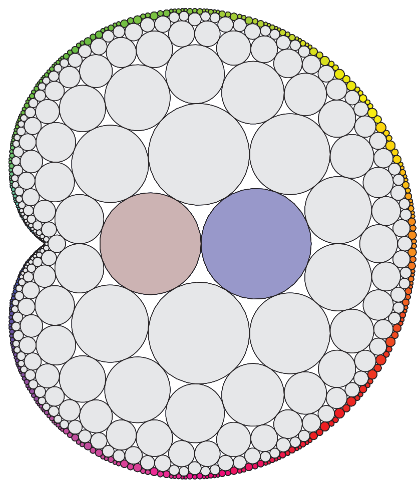


Abb. 2: Lösung mit feinerer Diskretisierung in Randnähe (hyperbolische Geometrie)

Das Thema wird im Rahmen eines neu bewilligten DFG-Projekts gemeinsam mit einer Arbeitsgruppe um Prof. Ruscheweyh (Universität Würzburg) und Prof. Stephenson (University of Tennessee at Knoxville, USA) bearbeitet.

8.8.18. Riemann-Hilbert Probleme mit kreisförmigen Restriktionskurven

E. Wegert (Institut für Angewandte Analysis)

Randwertprobleme / Analytische Funktionen

In Anwendungen nichtlinearer funktionentheoretischer Randwertprobleme, wie sie beispielsweise in der Hydromechanik, der Systemtheorie und der Streutheorie auftreten, sind neben linearen Problemen besonders Probleme mit kreisförmigen Restriktionskurven bedeutsam. Während die erste Klasse bereits über einen langen Zeitraum intensiv und umfassend untersucht wurde, waren verschiedene anwendungsrelevante Fragen für Probleme des zweiten Typs noch offen.
Im Forschungsprojekt wurden Probleme dieses Typs mit Hölder-stetigen Koeffizienten untersucht. Neben einer generellen Lösbarkeitstheorie konnten für bestimmte Problemklassen auch geschlossene Lösungen angegeben werden.
Darüberhinaus wurden effektive numerische Verfahren zur Lösung allgemeiner Probleme entwickelt. Die Gesamtheit aller (unendlich vieler) Lösungen kann dabei mit Hilfe einer geeigneten Parametrisierung aus drei Grundlösungen ermittelt werden.

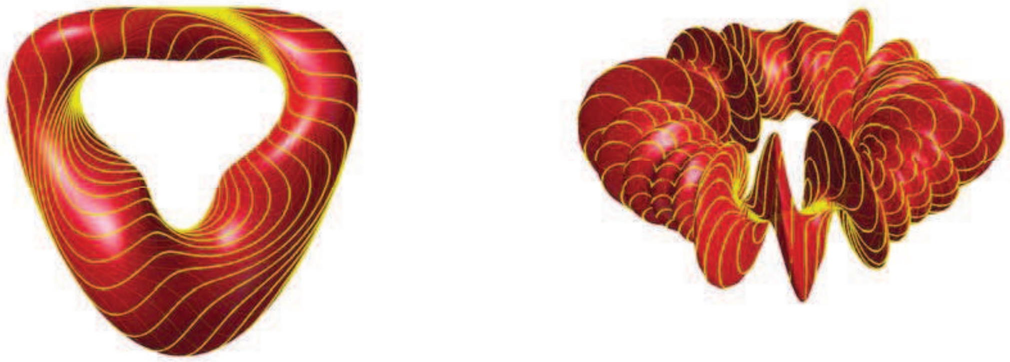


Abb.: Visualisierung von Lösungen für zwei Riemann-Hilbert-Probleme mit kreisförmigen Restriktionskurven. Das rechte Problem resultiert aus einer Anwendung in der akustischen Streutheorie.

Das Projekt wurde in Zusammenarbeit mit Dr. Christer Glader (Universität Abo, Finnland) im Rahmen mehrerer Forschungsaufenthalte bearbeitet und von der Magnus Ehrnrooth Stiftung unterstützt.

8.8.19. MurX: Ein Netzwerktransparentes Multimedia-Framework für Linux

H. Bahmann, K. Froitzheim (institut für Informatik)

Multimedia, Retained Mode, X-Window, Linux, Netzwerk

Das Betriebssystem Linux und das damit eng verbundene Grafiksystem X-Window sind besonders geeignet für netzwerktransparente verteilte Systeme. Der Schwerpunkt des Linux-Einsatzes ist nach wie vor der technisch-wissenschaftlich Bereich, in dem die Visualisierung zunehmend wichtiger wird. Die Multimedia-Infrastruktur fehlt aber für Linux weitgehend, wenn man von ad-hoc und Insellösungen absieht.
Im Projekt MurX wurde am Institut für Informatik ein netzwertransparentes retained-mode Multimedia-System entwickelt, das sowohl Wiedergabe als auch Aufnahme von Medienströmen wie Audio und Video komfortabel unterstützt. Das System richtet sich in erster Linie an den Programmierer, der in seine Software Visualisierung mit Audio und Video integrieren will, ohne sich mit Kompression, Formaten, Synchronisation und anderen harten Problemen der Medienverarebitung auseinanderzusetzen. Das System ist damit ähnlich wie QuickTime von Apple und DirectShow von Microsoft eine Infrastruktur zur Programmierung von Multimedia-Applikationen.
Bei der Lösung der Aufgabe sind drei Fragen von besonderem Interesse gewesen:

- Existierende Multimedia-Frameworks sind bereits relativ alt. Wie wird eine moderne Multimedia-Infrastuktur heute entworfen und implementiert?
- Wie kann eine solche umfassende Multimedia-Infrastruktur in eine Linux- / X-Window Umgebung eingebettet werden?
- Wie kann ein solches System hocheffizient netzwerktransparent arbeiten?

In einem netzwerkorientierten Client-Server-System wie X-Window müssen die Medienströme effizient, das heisst im Netzwerk komprimiert übertragen werden. Deshalb werden die Medienströme in der Client-Applikation analysiert und komprimiert in Fragmente, die Einheiten der synchronisierten Präsentation verpackt. Der Transport im Netz erfolgt mit Standard-Protokollen. Auch im Endgerät, dem Display liegen die Daten noch möglichst lange in ihrer Orginalform vor, um dann erst just-in-time zur Präsentation dekomprimiert und transformiert zu werden. Dieser retained-mode erlaubt vielfältige Optimierungen im Multimedia-Framework. Diese Optimierungen werden insbesondere bei der gegenwärtigen Tendenz zu hoch- und höchst-auflösenden Anzeigegeräten zunehmend wichtiger.
Im Projekt MurX sind wir nun an einem Meilenstein angekommen, das Framework ist vollständig implementiert und sehr zuverlässig. Im nächsten Schritt ist einerseits die Überführung der Software in die Open-Source-Community geplant, um die Entwicklergemeinde zu verbreitern. Andererseits wird MurX an unser neues X-SITE System angepasst, so dass wissenschaftliche Visualisierungssoftware direkt vom Hochleistungsrechner auf der höchstauflösenden X-Site anzeigen kann.

8.8.20. Wavelets auf der dreidimensionalen Kugeloberfläche

PD Dr. S. Bernstein, Dipl.-Math. S. Ebert (Institut für Angewandte Analysis)

Wavelets / Approximation / Rekonstruktion

Aus dem Anwendungsbereich der Materialwissenschaften, im speziellen der Kristallographie werden bei der Untersuchung von Texturen mittels Radontransformation Daten auf der Drehgruppe SO(3) erhalten. Die dreidimensionale Kugeloberfläche S^3 kann als doppelte Überdeckung der SO(3) betrachtet werden und es ist von Interersse, Wavelets auf diesen Mannigfaltigkeiten zu konstruieren. Mit Hilfe von Wavelets können die Daten transformiert, rekonstruiert oder bis zu einer vorgegebenen Genauigkeit approximiert werden.
Da Wavelets durch Translation und Dilatation aus einem Motherwavelet entstehen, müssen entsprechende Operationen auf der Mannigfaltigkeit verfügbar sein.
Aus gruppentheoretischer Sicht werden Translationen auf der Sphäre als Rotationen aufgefasst. Eine Dilatation entspricht gerade der inversen stereographischen Projektion einer Dilatation im Tangentialraum am Nordpol der S^3. Für eine stetig, zonale Funktion mit verschwindendem Mittelwert bildet die Familie der dilatierten Funktionen eine approximierende Eins. Diese formen die Grundlage zur Rekonstruktion von p-integrablen Funktionen auf der Sphäre. Die approximierenden Operatoren bilden eine Halbgruppe und sind als Faltungsintegral definiert. Ebenfalls als Faltung wird nun die Wavelettransformation definiert und es wurden Zulässigkeitsbedingungen für Wavelets erarbeitet, so dass die Wavelettransformation eine isometrische Abbildung ist und die Rekonstruktion auf approximierende Einsen zurückzuführen ist.
Entsprechende Wavelets können dann direkt von der S^3 auf SO(3) übertragen werden.

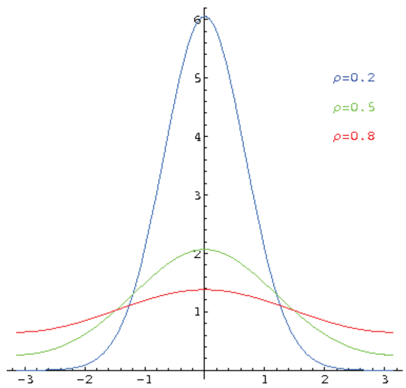


Abb. 1: Gauß-Weierstraß-Kern als approximierende Eins

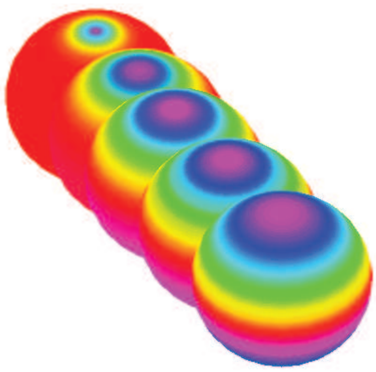


Abb. 2: Wavelet zum Gauß-Weierstraß-Kern auf S^3, dargestellt auf Schnitten der S^3

Dieses Thema wird in Kooperation mit der Gruppe für Geoinformatik und Geomathematik der TU Bergakademie Freiberg sowie Mathematikern der Universidade de Aveiro und Universidade de Coimbra in Portugal bearbeitet. Gegenstand dieser Zusammenarbeit sind zum einen kristallographische Anwendungen, insbesondere auf die kristallographische Radontransformation und zum anderen Verallgemeinerungen, wie zum Beispiel nicht zonale Wavelets.