



# Algorithmen und mathematische Modellierung

## *Algorithms and Mathematical Modelling*

An der TU Graz existiert eine Vielzahl von Forschungsprojekten in der anwendungsorientierten Mathematik. Der Forschungsschwerpunkt „Algorithmen und mathematische Modellierung“ fasst einen Großteil dieser Projekte zusammen und umschließt so einen großen Bogen von Forschungsaktivitäten. Angefangen von mathematischer Grundlagenforschung bis hin zur Entwicklung und Anwendung von numerischen Algorithmen in der Informatik, Physik, Geodäsie, sowie in den Ingenieurwissenschaften sind die verschiedensten mathematischen Anwendungsgebiete vertreten. Neben der Modellierung von Anwendungsproblemen und deren numerischer Lösung werden vor allem zahlentheoretische Methoden wie Quasi-Monte Carlo Algorithmen oder Verfahren zur Lösung von Diophantischen Problemen sowie Fragestellungen der kombinatorischen Optimierung und der Fraktaltheorie hierbei weiterentwickelt und in den verschiedensten Gebieten zur Anwendung gebracht.

Dabei wird durch die Zusammenfassung von sowohl mathematisch-abstrakten wie auch von anwendungsbezogenen Projekten zu einem Schwerpunkt unter anderem die Zielsetzung verfolgt, die Wechselwirkungen zwischen den einzelnen in Graz vorhandenen Gebieten zu intensivieren und auszubauen. Gerade die Vielfalt an Problemen erlaubt auch die Ausbildung von hochqualifizierten Nachwuchswissenschaftlern sowie die Bereicherung der Lehre an der Technischen Universität. Die für die verschiedenen Anwendungsgebiete der mathematischen Modellierung und Simulation unabdingbare Methodenvielfalt ist durch das breite Spektrum von Forschungsaktivitäten des Schwerpunktes sichergestellt. Die Zusammenfassung der verschiedenen Arbeitsgruppen zu einem großen Forschungsschwerpunkt verstärkt neben den positiven Auswirkungen für verschiedenste Anwendungsbereiche bereits bestehende fachspezifische Kooperationen.

Insgesamt besteht der Forschungsschwerpunkt aus mehr als zehn Unterprojekten, die größtenteils von den Mathematik- und Statistik-Instituten, aber auch an den Instituten für Grundlagen der Informationsverarbeitung, für Theoretische Physik, für Geodäsie, sowie am Institut für Strömungslehre und Wärmeübertragung durchgeführt werden. Vom mathematischen Standpunkt aus gesehen beinhaltet der Forschungsschwerpunkt Zahlentheoretische Methoden, Probleme der Optimierung, Graphentheorie, numerische Verfahren sowie die mathematische Modellierung von Anwendungsproblemen. Dabei soll nicht jedes Gebiet getrennt für sich untersucht werden, sondern vielmehr auf die gegenseitigen Anforderungen eingegangen und Überschneidungsbereiche weiter untersucht werden.

Vielfach beschränkt sich die Forschungstätigkeit nicht nur auf die TU Graz selbst, sondern geschieht in Kooperation mit anderen international anerkannten Universitäten, Forschungseinrichtungen oder Firmen. Finanzielle Unterstützung ist vor allem durch Forschungs-

schwerpunkte, Spezialforschungsbereiche und andere Projekte des Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung, aber auch durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft und den Jubiläumsfonds der Österreichischen Nationalbank gegeben. Weiters existieren Kooperationen mit Magna Steyr Fahrzeugtechnik, Steweag-Steg, Austria Microsystems AG, dem Amt der Steir. Landesregierung sowie der ESA und der Österreichischen Akademie der Wissenschaften.

Im Folgenden soll ein kurzer Überblick über die einzelnen Projekte dieses Forschungsschwerpunktes gegeben werden:

Im Projekt „Konkrete Mathematik: Fraktale, Ziffernfolgen und Punktverteilungen“ von Prof. P. Grabner, welcher durch ein START-Projekt des FWF gefördert wird, werden am Institut für Mathematik A Methoden der „konkreten Mathematik“ weiterentwickelt und auf Fragestellungen aus mehreren Bereichen angewandt. Ausgehend von der klassischen Fragestellung nach der Wärmeleitung in porösen Materialien wurden seit den 1980-er Jahren die damals zu großer Popularität gelangten Fraktale als Modell für poröse Medien herangezogen. Im Laufe der Zeit stellte sich zusätzlich heraus, dass mit denselben Methoden für die Diffusion auf Fraktalen (Abb. 1)

auch Phänomene wie die Ausbreitung von Erdöl in porösen Gesteinsschichten sowie die Modellierung von Kolloiden modelliert werden kann. In diesem Projekt werden unter anderem die Eigenschaften von Fraktalen, besonders die Diffusion auf fraktalen Mengen untersucht. Weiters werden probabilistische und ergodentheoretische Aspekte von Ziffernentwicklungen studiert, die nicht zuletzt bei der Konstruktion von gut verteilten Punktfolgen und der numerischen Integration eine wichtige Rolle spielen. Hierbei werden auch gut verteilte Punktmengen auf der Sphäre konstruiert.

In der Gruppe um Prof. R. Tichy am Institut für Mathematik A werden im Projekt „Algorithmische Diophantische Probleme“ zahlentheoretische Algorithmen und deren Anwendung auf die Lösung von diophantischen Gleichungen entwickelt. Dies sind Gleichungen, bei denen nur ganzzahligen Lösungen gesucht sind. Dabei spielen Methoden aus dem symbolischen Rechnen, aus der diophantischen Analysis und aus der algebraischen Zahlentheorie eine große Rolle. Ähnliche Methoden finden auch in der Kryptographie Anwendung.

Ebenfalls von Prof. R. Tichy und Prof. I. Berkes wird das Projekt „Quasi-Monte Carlo-Methods in Finance and Insurance“ durchgeführt. Es geht dabei um die Anwendung von Folgen kleiner Diskrepanz zur Preisberechnung von Finanzderivaten, wobei quantitativen und probabilistischen Eigenschaften solcher Folgen genau analysiert werden sollen. Die Untersuchung von Eigenschaften, Konvergenz sowie Komplexität von zahlentheoretischen Algorithmen ist ein klassisches Gebiet der reinen Mathematik. Derartige Methoden gewannen in letzter Zeit aber auch zunehmend an Bedeutung in vielen Bereichen der angewandten Mathematik, unter anderem

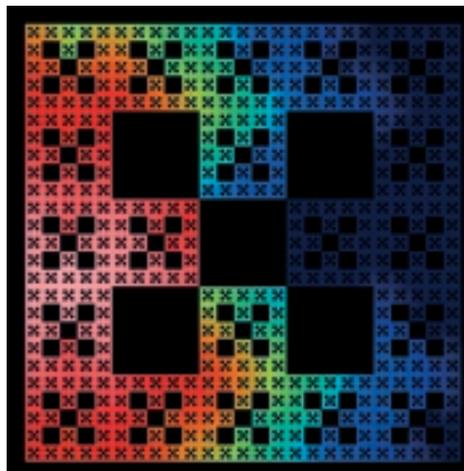


Abb. 1: Wärmeleitung auf dem Sierpinski-Teppich, Grafik: M. Barlow

der effizienten Berechnung von relevanten Größen der Finanz- und Versicherungsmathematik wie etwa der Preisgestaltung von Optionen oder der Überlebenswahrscheinlichkeit von Versicherungen (Abb. 2). Ferner werden langfristige Risikomodelle erstellt und diese einerseits mit analytischen aber auch mit numerischen und Simulationsmethoden untersucht.

Unter der Leitung von Prof. R. Burkard werden im Projekt „Effizient lösbare kombinatorische Optimierungsprobleme“ am Institut für Mathematik B effiziente Algorithmen zur Lösung diskreter Optimierungsprobleme entwickelt. Ferner wird die Struktur schwer lösbarer (NP-schwerer) Probleme untersucht, um Spezialfälle zu finden, die eine effiziente Lösung zulassen. Derartige NP-schwere Probleme stehen bereits seit einiger Zeit direkt im Rampenlicht der

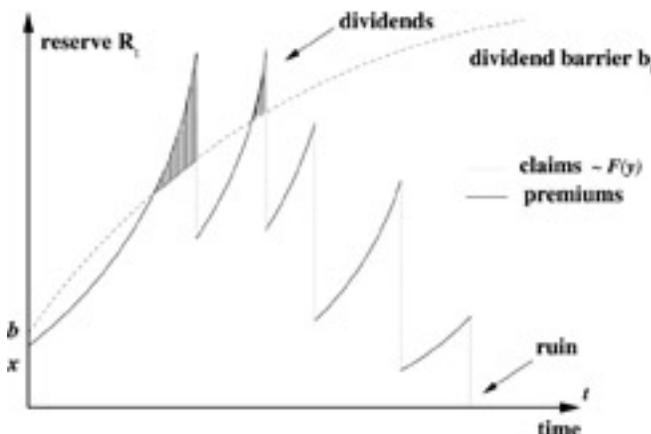


Abb. 2: Kapitalverlauf einer Versicherung mit sublinearer Dividendenschranke, Grafik: H. Albrecher

internationalen Forschung und sind von enormer Bedeutung in vielen Bereichen (Abb. 3).

Ebenfalls von Prof. R. Burkard geleitet wird das Projekt „Kombinatorische Optimierung komplexer Systeme“, in dem Approximationsverfahren und Heuristiken für komplexe diskrete Optimierungsprobleme unter besonderer Berücksichtigung der Anwendungen entwickelt werden.

Am Institut für Mathematik C leitet Prof. W. Woess das Projekt „Asymptotische Eigenschaften von Irrfahrten auf Graphen“. Im weitesten Sinne geht es dabei um Wahrscheinlichkeitstheorie und Analysis auf diskreten Strukturen. „Irrfahrten“ sind Zufallsprozesse, die sich auf Graphen (im Sinne der Kombinatorik), bzw. Gruppen (im Sinne der Algebra) abspielen. Im Mittelpunkt des Interesses steht das Studium und die Theorie des Zusammenhangs zwischen dem probabilistischen Verhalten sowie analytischen Kennzahlen dieser Prozesse einerseits und den geometrischen Eigenschaften der zugrundeliegenden Strukturen andererseits.

Als eines der Projekte mit unmittelbarer Anwendung und Kooperation mit der Industrie forscht die Gruppe um Prof. I. Berkes, Prof. H. Friedl und Prof. E. Stadlober zum Thema „Entwicklung und Anwendung statistischer Modelle“. In der Grundlagenforschung werden Struktureigenschaften von Zeitreihen (ARCH- und GARCH-Modelle) und generalisierten linearen Modellen untersucht. Die untersuchten Zeitreihen spielen insbesondere bei der Analyse von Finanzdaten und in der Ökonometrie eine Rolle. Mit generalisierten linearen Modellen lassen sich unter anderem polytome Daten sowie Dispersionsprobleme behandeln. Sie sind sehr flexibel und können

auch zufällige Effekte beinhalten oder hierarchisch aufgebaut sein. In Zusammenarbeit mit öffentlichen und privaten Institutionen werden Fragestellungen aus der Umweltforschung, Medizin und Biometrie, E-Wirtschaft, Fahrzeug- und Halbleiterindustrie bearbeitet.

Prof. E. Aurenhammer vom Institut für Grundlagen der Informationsverarbeitung leitet das Projekt „Clustering und Triangulierungsprobleme“, bei dem strukturelle und algorithmische Eigenschaften von Triangulierungen und verwandter Strukturen untersucht werden. Gesucht wird eine vollständige Klassifizierung kombinatorisch verschiedener Punktmenngen, die algorithmische Anwendungen nach sich zieht.

Von Prof. W. Maass wird unter dem Titel „Rechnen und Lernen in Schaltkreisen von spiking Neuronen“ die Komplexität von Lernalgorithmen untersucht, sowie Algorithmen zur Inferenz in probabilistischen Modellen. Das Ziel dieses Projekts ist die Erforschung von Informationsverarbeitung in Schaltkreisen von Neuronen im Gehirn, genauer gesagt, in sogenannten Mikroschaltkreisen, die die unterste Ebene der Organisationsstruktur des Gehirns bilden. Dazu werden theoretische Modelle sowie Computer Modelle entwickelt, die auf den neuesten Ergebnissen der Neurobiologen aufbauen. Ein recht ungewöhnlicher Aspekt dieses Projekts ist die enge Zusammenarbeit von Informatikern und Neurobiologen. Das Team von Prof. Maass wird mit dem Team des Neurobiologen Prof. Markram am Weizmann Institut in Israel zusammenarbeiten, der einer der international anerkanntesten Experten für die experimentelle Untersuchung von Mikroschaltkreisen im Gehirn ist. Es wird erwartet, dass die Untersu-

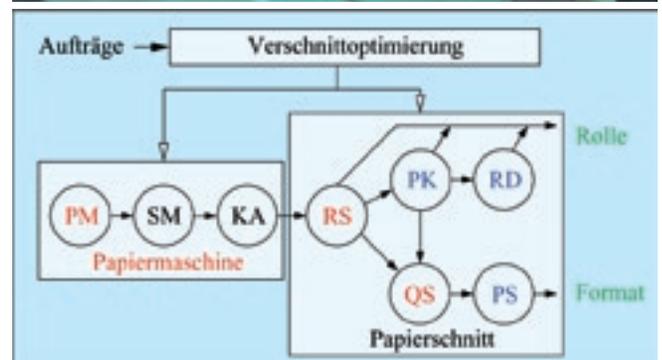
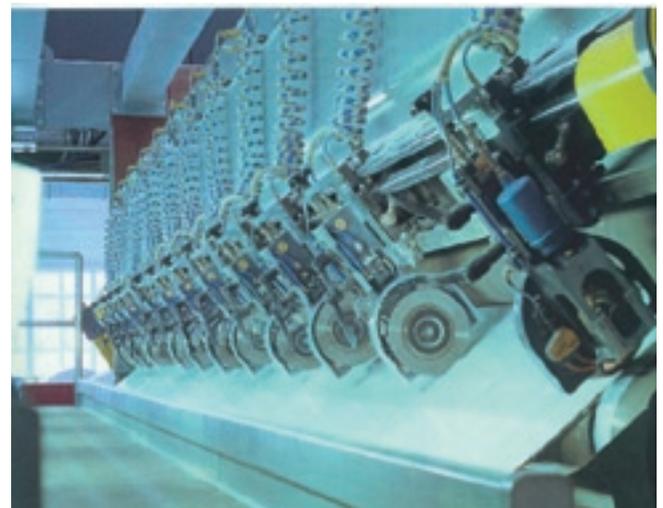


Abb. 3: Der optimale Zuschnitt von Papierrollen in vorgegebene Größen ist ein NP-schweres Problem der Optimierung, Grafik: Ch. Zelle, Foto: Archiv Sappi

chung der Organisation von Informationsverarbeitung in Schaltkreisen im Gehirn auch neue Impulse für den Entwurf von effizienteren elektronischen Schaltkreisen liefern wird. Ferner werden mathematische Modelle für Schaltkreise hinsichtlich ihrer Komplexitätseigenschaften und Adaptivität untersucht.

Das Projekt „Monte-Carlo-Simulation und Mathematische Physik“ von Prof. W. von der Linden befasst sich mit Monte-Carlo-Simulationen und davon abgeleiteten Hybrid-Verfahren. Ferner

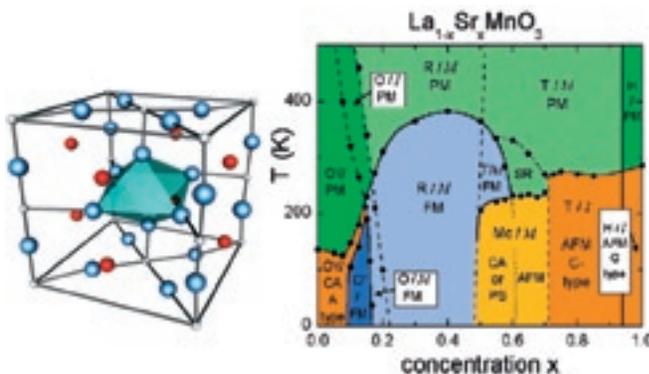


Abb. 4: Kristallstruktur und experimentell ermitteltes Phasendiagramm von Manganten, numerisch simuliert im Projekt von Prof. von der Linden, Quelle: W. von der Linden

werden numerische Verfahren zur exakten Diagonalisierung von Hamiltonoperatoren in mega-dimensionalen Vektorräumen entwickelt und es werden schlecht-konditionierte Inversionsprobleme mit wahrscheinlichkeitstheoretischen Methoden untersucht. Diese numerischen Verfahren dienen zur Computersimulation von stark korrelierten Vielteilchensystemen, wie den Hochtemperatursupraleitern, den Vanadaten und Manganten. Beispielsweise geht es darum, die komplexen Phasendiagramme dieser Systeme zu berechnen (siehe Abb. 4).

Ebenfalls am Institut für Theoretische Physik leitet Prof. M. Heyn das Projekt „Mathematische Modellierung von Fusionsplasmen“.

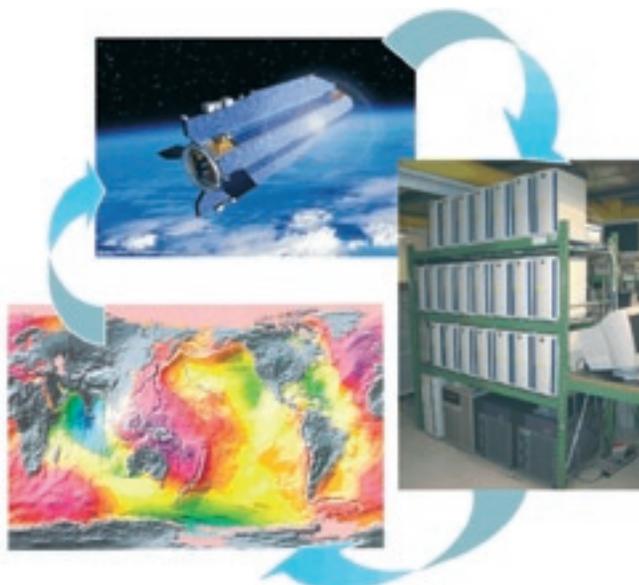


Abb. 5: Satelliten-Schwerfeldmission GOCE: Strenge Lösung unter Einsatz von Supercomputing, Graphik: R. Pail

Dieses Projekt befasst sich mit Monte-Carlo-Verfahren und der Behandlung partieller Differentialgleichungen zur Lösung kinetischer Gleichungen von Fusionsplasmen.

Prof. H. Sünkel vom Institut für Geodäsie führt das Projekt „Berechnungen zum Erdgravitationsfeld“ durch. Die Satellitenmission GOCE (Abb. 5) soll zur Bestimmung der Detailstruktur des Gravitationsfeldes der Erde beitragen, wobei sehr große Gleichungssysteme auftreten. Dabei geht es vor allem um numerische Strategien zur globalen Analyse, zeitliche Variationen des Erdschwerefeldes und Kalibrierung von Schwerfeldsatelliten. In den letzten Jahren konnten vollkommen neue Algorithmen entwickelt werden, die erstmalig die mathematisch strenge Behandlung von hochauflösenden Modellen bei unregelmäßiger Datenverteilung und komplementären Mess-Sensoren ermöglichen. Speziell adaptierte Lösungsverfahren erlauben es, die gigantischen Datenmengen (ca. 100 Millionen korrelierte Beobachtungen) zu bewältigen und die rund 100.000 Parameter aus vollbesetzten Gleichungssystemen zu ermitteln.

Am Institut für Strömungslehre und Wärmeübertragung arbeitet Prof. G. Brenn zum Thema „Die Beeinflussung von Tropfenspektren durch binäre Tropfenkollisionen“, gefördert von der Deutsche Forschungsgemeinschaft. Im Rahmen des Projektes wird das Stabilitätsverhalten zusammenstoßender Tropfen untersucht. Stöße können zum stabilen Verschmelzen der Tropfen oder zum Aufbrechen in kleinere Tropfen führen. Die mathematische Modellierung quantifiziert die Stabilität des Stoßkomplexes kurz nach dem Zusammenstoß und sagt die Zahl der durch den Zerfall gebildeten Tropfen voraus. Die Ergebnisse dienen der Berechnung dichter disperse Zweiphasenströmungen, z.B. bei der Kraftstoffeinspritzung.

Schwerpunkte des Projekts „Optimierung von Turbomaschinen und CDF-Methoden“ von Prof. W. Sanz am Institut für Thermische Turbomaschinen und Maschinendynamik sind die Simulation einer dreidimensionalen instationären Strömung durch Turbomaschinenstufen, die Entwicklung eines neuen Wandmodells zur Turbulenzmodellierung und die Entwicklung von Modellen zur Berechnung des laminar-turbulenten Grenzschichtumschlags.

Als künftiges Projekt in diesem Forschungsschwerpunkt ist unter anderem das Projekt „Gallopingphänomene an elektrischen Bündelleitersystemen“ von Prof. G. Kern vom Institut für Mathematik B vorgesehen. Galloping ist eine windinduzierte Schwingungsform mit großen Amplituden und niederen Frequenzen. Neben dem reinen aerodynamisch instabilen Den Hartog Galloping kann unter bestimmten Frequenzbedingungen ein sogenanntes „flutter-type galloping“ auftreten. Ziel des Projektes ist es, das Verzweigungs- und Stabilitätsverhalten dieser Schwingungsform an Bündelleitersystemen zu untersuchen, damit geeignete Dämpfungsmaßnahmen durchgeführt werden können.

### Algorithms and Mathematical Modelling

The joint research program „Algorithms and Mathematical Modelling“ is comprised of more than ten research projects at the Graz University of Technology, with the main focus on development of mathematical algorithms and their applications to other disciplines. In particular, the main focus lies on the fields of number theoretic algorithms, (NP-hard) optimization problems, graph and fractal theory, as well as numerical methods like Monte Carlo simulation and other efficient solution methods. Some subpro-

jects put special attention on the effective modelling of applied problems, like the calculation of lattice structures or fusion plasma in theoretical physics, the processing of satellite measurements, of the heat equation or the modelling of neurons in the human brain. The broad spectrum of research activities in applied mathematics at the Graz University of Technology allows for the necessary variety of methods that are needed to tackle the challenges from applied sciences and from industrial applications.

Currently, the projects contained in this joint research program are:

- Concrete Mathematics: Fractals, Digital Functions, and Point Distributions (Prof. P. Grabner, Inst. f. Mathematics A)
- Algorithms and Diophantine Problems (Prof. R. Tichy, Inst. f. Mathematics A)
- Quasi-Monte Carlo-Methods in Finance and Insurance (Prof. R. Tichy, Inst. f. Mathematics, and Prof. I. Berkes, Inst. f. Statistics)
- Efficiently Solvable Special Cases of NP-hard Combinatorial Optimization Problems (Prof. R. Burkard, Inst. f. Mathematics B)
- Combinatorial Optimization in Complex Systems (Prof. R. Burkard, Inst. f. Mathematics B)
- Asymptotic Properties of Random Walks on Graphs (Prof. W. Woess, Inst. f. Mathematics C)
- Development and Applications of Statistical Models (Prof. I. Berkes, Prof. H. Friedl, and Prof. E. Stadlober, Inst. f. Statistics)
- Clustering and Triangulation Problems (Prof. Aurenhammer, Inst. f. Theoretical Computer Science)
- Monte-Carlo-Simulation and Mathematical Physics (Prof. W. von der Linden, Inst. f. Theoretical Physics)
- Mathematical Modelling of Fusion Plasma (Prof. M. Heyn, Inst. f. Theoretical Physics)
- Mapping of the Earth Gravity Field (Prof. H. Sünkel, Inst. f. Geodesy)
- Influences of Binary Drop Collisions on Drop Spectra (Prof. G. Brenn, Inst. f. Fluid Mechanics and Heat Transmission)
- Efficiency Improvement in Turbomachinery and CFD-Methods (Prof. W. Sanz, Inst. f. Thermal Turbomachinery and Machine Dynamics)
- Computing and Learning in Circuits of Spiking Neurons (Prof. W. Maas, Inst. f. Theoretical Computer Science)

Financial support is provided by several research projects of the Austrian Science Fund, as well as by the OeNB Anniversary Fund, the German Research Foundation, European Space Agency and Austrian Space Agency. There are also cooperations with other research institutes and the industry.