Nummer 19 **Oktober 1996**

Fachgruppenleitung Computeralgebra 1996-1999

Vertreter der DMV:
Prof. Dr. Benno Fuchssteiner
Universität Paderborn
Fachbereich Mathematik-Informatik
33095 Paderborn
Tel. 05251-60-2620, -2635 (Sekr.)
Telefax 05251-60-3836
elektr. Adr.: `benno@uni-paderborn.de`

Fachexperte Physik:
Prof. Dr. Friedrich W. Hehl
Institut für Theoretische Physik,
Universität Köln, Zülpicher Straße 77
D-50937 Köln
Tel.: 0221-470-4307,-4310 (Sekr.)
Telefax: 0221/470-5159
elektr. Adr.: `hehl@thp.uni-koeln.de`

Referent Lehre & Didaktik:
Prof. Dr. Wolfgang Küchlin
Wilhelm Schickard Institut f. Informatik
Sand 13, Universität Tübingen
72076 Tübingen
Tel. 07071-29-7047
Telefax: 07071-67540
elektr. Adr.: `Kuechlin@informatik.uni-tuebingen.de`

Prof. Dr. M. Pohst
Fachbereich 3 Mathematik MA 8-1
Technische Universität Berlin
Straße des 17. Juni 136
10623 Berlin
Tel.: 030-314-25772, -24015 (Sekr.)
Telefax: 030-314-21604
elektr. Adr.: `pohst@math.tu-berlin.de`

Fachexperte Rundbrief:
Dr. Ulrich Schwardmann
GWDG, Am Faßberg
37077 Göttingen
Tel. 0551-201-1542
Telefax: 0551-21119
elektr. Adr.: `uschwar1@gwdg.de`

Sprecher:
Dr. Johannes Grabmeier
Heidelberg Scientific and Technical Center
IBM Deutschland Informationssysteme GmbH
Vangerowstr. 18, Postfach 10 30 68
69020 Heidelberg
Tel. 06221-59-4329,-4254(Sekr.), 069-6645-4329
Telefax: 06221-59-3500
elektr. Adr.: `grabm@heidelbg.ibm.com`

Referent Chemieanwendungen:
Prof. Dr. A. Kerber
Lehrstuhl II f. Mathematik
Univ. Bayreuth, Schloßhof Birken 21
95447 Bayreuth
Postanschrift: 95440 Bayreuth
Tel. 0921-553387
Telefax: 0921-553385
elektr. Adr.: `kerber@uni-bayreuth.de`
WWW: `http://www.mathe2.uni-bayreuth.de`

Stellv. Sprecher:
Prof. Dr. B. Heinrich Matzat
Interdisziplinäres Zentrum f.
Wissenschaftliches Rechnen
Univ. Heidelberg, Im Neuenheimer Feld 368
69120 Heidelberg
Tel. 06221-54-8242, -8233 (Sekr.)
Telefax 06221-54-8850, -5224
elektr. Adr.:
`matzat@iwr.uni-heidelberg.de`

Vertreter der GAMM:
Prof. Dr. Karl G. Roesner
Institut für Mechanik
Hochschulstraße 1
D-64289 Darmstadt
Tel.: 06151-164 328 oder 162 992
Telefax: 06151-163929
elektr. Adr.: `karo@tollmien.mechanik.th-darmstadt.de`

Prof. Dr. V. Weispfenning
Lehrstuhl für Mathematik
Universität Passau
Innstraße 33
94030 Passau
Tel. 0851-509-3120, -3121 (Sekr.)
Telefax: 0851-509-1802
elektr. Adr.: `weispfen@alice.fmi.uni-passau.de`

Fachexperte ISSAC'98:
Prof. Dr. Karl Hantzschmann
Fachbereich Informatik
Universität Rostock
Albert-Einstein-Straße 21
18059 Rostock
Postanschrift: 18051 Rostock
Tel.: 0381-498-3400
Telefax: 0381/498-3399
elektr. Adr.: `hantzschmann@informatik.uni-rostock.de`

Referent Lehre & Didaktik:
Dr. Wolfram Koepf
Konrad-Zuse-Zentrum Berlin
Takustr. 7
14195 Berlin
Tel. 030-841 85-348
Telefax: 030-841 85-125
elektr. Adr.: `koepf@zib.de`
WWW: `http://www.zib.de/koepf`

Referent Fachhochschulen:
Prof. Dr. H. Michael Möller
Fachbereich Mathematik
Universität Dortmund
44221 Dortmund
Tel. 0231-755-3077
elektr. Adr.: `Moeller@math.uni-dortmund.de`

Referent CAIS:
Prof. Dr. Gerhard Schneider
Rechenzentrum Universität Karlsruhe
Zirkel 2
76128 Karlsruhe
Tel. 0721-608-2479, -3754 (Sekr.)
Telefax 0721-32550
elektr. Adr.: `schneider@rz.uni-karlsruhe.de`

Prof. Dr. Horst Günter Zimmer
Universität des Saarlandes
Fachbereich 9 Mathematik
Postfach 15 11 50 66041 Saarbrücken
Tel. 0681-302-2206, 3430 (Sekr.)
Telefax 0681-302-4443
elektr. Adr.: `zimmer@math.uni-sb.de`

Verwaltungen der Fachgruppe Computeralgebra

Mitgliederverwaltung der GI:
Gesellschaft für Informatik e.V.
Wissenschaftszentrum
Ahrstr. 45
53175 Bonn
Telefon 0228-302-149
Telefax 0228-302-167
el.Adr.: `gibonn@gmd.de`

Mitgliederverwaltung der DMV:
Deutsche Mathematiker
-Vereinigung, Geschäftsstelle
Mohrenstraße 39
10117 Berlin
Telefon 030-20377-306
Telefax 030-20377-307, el.Adr.:
`dmv@iaas-berlin.d400.de`

Mitgliederverwaltung der GAMM:
Gesellschaft für Angewandte
Mathematik und Mechanik e.V.
NWF I – Mathematik,
Univ. Regensburg
Universitätsstr. 31
96053 Regensburg

Anzeigenverwaltung:
DLGI Dienstleistungsges.
für Informatik mbH,
Wissenschaftszentrum
Ahrstr. 45
53175 Bonn
Telefon 0228-302-164
Telefax 0228-302-167

Impressum

Computeralgebra–Rundbrief Herausgegeben von der Fachgruppe Computeralgebra der GI (2.2.1), DMV und GAMM, Redaktionsschluß 28.02 und 30.09. Anschrift: Dr. Ulrich Schwardmann, Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung mbH Göttingen (GWDG), Am Fassberg, 37077 Göttingen, Telefax: 0551-21119, Internet: `uschwar1@gwdg.de` , ISSN 0933-5994. Mitglieder der Fachgruppe Computeralgebra erhalten je ein Exemplar dieses Rundbriefs im Rahmen ihrer Mitgliedschaft. Exemplare darüber hinaus bzw. außerhalb der Mitgliedschaft können über die DLGI bezogen werden.
WWW-Server der Fachgruppe Computeralgebra mit URL: `http://www.uni-karlsruhe.de/~CAIS` ,
Konferenzankündigungen, Mitteilungen und einzurichtende Links bitte an: `cais@rz.uni-karlsruhe.de`

Mitteilungen der Sprecher

Liebe Mitglieder der Fachgruppe Computeralgebra,

im Rahmen der Jahrestagung der DMV in Jena vom 15.09. bis 20.09.1996 gab es unter der Leitung von PD Dr. Gerhard Hiß (Heidelberg) und Prof. Dr. Michael Pohst (Berlin) eine Sektion Computeralgebra mit einem vollen Vortragsprogramm – siehe Seite 16. Wie schon im letzten Jahr hat die Fachgruppenleitung eine Informationsveranstaltung im Rahmen der DMV-Jahrestagung durchgeführt. Prof. Pohst informierte über aktuelle Themen der Fachgruppe.

In Verbindung mit der GI-Jahrestagung Informatik'96 in Klagenfurt gab es zum ersten Mal auf Initiative der Fachgruppe Computeralgebra einen Workshop Computeralgebra. Die Organisation und Leitung lag in den Händen von Dr. Franz Winkler (RISC Linz) und Dr. Johannes Grabmeier (Heidelberg). Dank der Unterstützung von Prof. Heinrich Mayr (Klagenfurt) und Prof. Ernst. Mayr (München) war einer der 6 Hauptvorträge der Konferenz der Computeralgebra gewidmet. Dr. Andrew Odlytzko von AT&T Research Laboratories referierte zum Thema Computer Algebra and its Applications: Where are we going?. *Einen Bericht dazu finden Sie auf Seite 18.*

Zur Regel geworden ist auch die Sektion Computeralgebra auf der GAMM-Jahrestagung, die in diesem Jahr in Prag stattfand. Die Leitung lag auch diesmal wieder in den Händen von Prof. Dr. Siegfried Rump (Hamburg).

Die Herbstsitzung der Fachgruppenleitung fand diesmal im Rahmen der DMV-Jahrestagung in Jena statt. Hier wurden einige Themen und Schwerpunkte der Computeralgebra, die in den kommenden Jahren angepackt werden sollen, ausgewählt. Dazu gehören nach wie vor Vergleichbarkeit von Algorithmen und Systemen, Benchmarks und parametrisierte Testsuiten. Des weiteren wollen wir uns verstärkt dem Thema Computeralgebra in Unterricht und Lehre widmen. Dafür wird ab dem Frühjahr 1997 eine neuen Rubrik im Rundbrief eingerichtet. Weiter wäre es wünschenswert, wenn es in Zusammenarbeit mit anderen Gesellschaften gelingen könnte, eine internationale Bestandsaufnahme des Gebietes Computeralgebra zu machen.

Wir weisen nochmals auf die von der Fachgruppe eingerichtete Mailingliste hin. Es wäre erfreulich, wenn sich sehr viele Mitglieder hier mittels Senden einer Note an

`cais-lrz.uni-karlsruhe.de`

mit Inhalt

`subscribe`

anmelden würden, da wir dann diese Liste noch effizienter zum Verteilen von Informationen über aktuelle Tagungen oder zu Neuerscheinungen von Büchern zur Computeralgebra und Vergabe von Besprechungsexemplaren nutzen könnten.

Johannes Grabmeier *B. Heinrich Matzat*

Hinweise auf Konferenzen

1. **Groups in Action, Constructive Theory of Discrete Structures**

   Thurnau, 20.10.–24.10.96

   There will be a meeting at Thurnau near Bayreuth consisting of short talks (approx. 30-45 min) about a relevant topic.

   Contributions are encouraged, giving the title of the talk and the contributor's postal address so that we can assemble the program and prepare the invitations. The number of participants is limited to approx. 40. There will be a small conference fee of about DM 70,- for the rent of the lecture room, coffee etc.

   You will find more information on the WWW page: `http://btm2xd.mat.uni-bayreuth.de/Welcome.html`

   Organizers: Anton Betten, Adalbert Kerber and Reinhard Laue.

2. **OpenMath Meeting**

   Dublin, 7.12.–8.12.96

   As agreed in Zurich in July, the next OpenMath meeting will be in Dublin on Saturday and Sunday December 7th and 8th.

   It was also planned that OpenMath v0 will be published shortly after that.

3. **VDI-GET-Workshop – Computeralgebra-Simulation (CALS) für Ingenieure**

   Düsseldorf, 10.12.96

   Themen

   - Computeralgebra - eine Säule des wissenschaftlichen Rechnens,
   - Berechnung der Wärmeübertragung mit Computeralgebra,
   - Einsatz der Computeralgebra in der Schweißtechnik,
   - Simulation von transienten Temperaturfeldern,
   - Computeralgebra als Werkzeug des Strömungsmechanikers,
   - Auslegung von Wärmeüberträgern,
   - Gasströmungen im Vakuum,
   - Modellbildung und Analyse mechanischer Systeme.

   Informationen und Programme erhalten Sie durch die VDI Gesellschaft Energietechnik (VDI- GET), Postfach 10 11 39 , 40002 Düsseldorf, Telefon: 0211/ 6214-414/-480, Telefax: 0211/6214-161.

   Ansprechpartner: Dr.-lng. E.-G. Hencke VDI.

4. **Kongreß für Mathematik in Industrie und Wirtschaft**

   Duisburg, 10.–13.3.97

   Nach dem DMV-Kongreß 1993 in Köln und dem ECMI-Kongreß 1994 in Kaiserslautern veranstaltet der Arbeitskreis Mathematik in Forschung und Praxis und die DMV-Fachgruppe Industriemathematik in Zusammenarbeit mit European Consortium for Mathematics in Industry (ECMI) und dem Fachbereich Mathematik der gastgebenden Universität einen Kongreß, der erneut die vielfältigen Anwendungen der Mathematik in zahlreichen Lebensbereichen fokusieren wird.

   Der Kongreß gliedert sich in 6 ganztägige Sektionen mit den **Themen:**
   Sektion 1. Steuerung und Simulation von Prozessen (Prof. Dr. Brüll (Bayer AG), Dipl.-Math. Griem (Mannesmann DV) und Dr. Monheim (Mannesmann Demag))
   Sektion 2. Werkstofftechnik und Konstruktion (Prof. Dr. Hoffmann (TU München))
   Sektion 3. Logistik und Verkehr (Prof. Dr. Jünemann (Dortmund), Dr. Schlothbom (AutoCom), Prof. Dr. Schreckenberg (Duisburg) und Prof. Dr. Zimmermann (Braunschweig))
   Sektion 4. Risikobewertung in Banken und Versicherungen (Prof. Dr. Hipp (Institut für Finanzwesen, Karlsruhe) und Dr. Schacht (Bayerische Vereinsbank))
   Sektion 5. Umwelttechnologie und Energietechnik (Prof. Dr. Roth (SFB Stoff- und Energietransport in Aerosolen, DU), Prof. Dr. Warnatz (Heidelberg) und Prof. Dr. Zenker (RWE))
   Sektion 6. Kommunikation und neue Medien (Prof. Dr. Beutelspacher (Gießen) und Dr. Peuckert (Siemens AG))

   Weitere Informationen entnehmen Sie `http://www.uni-duisburg.de/FB11/EVENTS/MiIW.html` . Anmeldeformulare und Unterlagen erhalten Sie über die Koordinationsstelle des Arbeitskreises Mathematik in Forschung und Praxis, Fachbereich Mathematik, Gerhard-Mercator-Universität, 47048 Duisburg.

5. **GAMM Jahrestagung 1997**

   Regensburg, 24.3.–27.3.97

   The Annual GAMM Meeting 1997, GAMM 97, will be held during the week before Easter, at the University of Regensburg, March 24-27, 1997. At this occasion GAMM celebrates its 75th birthday: GAMM has been founded by Richard von Mises and Ludwig Prandtl in 1922.

   The scientific programme of GAMM 97 consists of invited plenary lectures, the 40th Ludwig Prandtl Memorial Lecture, a Public Lecture, a series of minisymposia and short communications.

   All conference participants are invited to present a short communication on a topic from applied mathematics or mechanics. Applications of mathematics to non-mechanical problems are also welcome. The time limit for a lecture is 15 minutes plus 5 minutes for discussion. The conference languages are English, French and German. All short communications will be incorporated into one of the following **sessions:**

   1. Linear and nonlinear oscillations, 2. Stability control and system theory, 3. Multibody systems and kinematics, 4. Elastic and viscoelastic materials and systems, 5. Plasticity: constitutive equations and applications, 6. Damage and fracture, 7. Computational mechanics, 8. Experimental methods and identification, 9. Non-viscous flows, gas

dynamics, 10. Viscous flows, turbulence, 11. Heat and mass transfer, convective flows, 12. Multiple phase flows, including drops and bubbles, 13. Waves, 14. Applied Analysis, 15. Mathematical methods of the natural and engineering sciences, 16. Computer algebra and computer analysis (symbolic computation), 17. Applied stochastics, 18. Optimization, 19. Numerical analysis, 20. Numerical treatment of ordinary and algebro-differential equations, 21. Numerical treatment of partial differential equations, 22. Financial modelling

The **conference fee** amounts to 150,- DM for GAMM members, 250,- DM for non-members of GAMM, 30,- DM for accompanying persons.

Registration forms, forms for announcing a short communication and hotel reservation forms are available at the GAMM Office, Department of Mathematics, University of Regensburg, D-93040 Regensburg, Tel. +49-(0)941-943-4918 (or 2954), Fax: +49-(0)941-943-4005, E-mail: `r.gamm@mathematik.uni-regensburg.de`.

Further information can be obtained from the GAMM WWW homepage
`http://www.uni-regensburg.de/Fakultaeten/nat_Fak_I/Mennicken/gamm.html`

6. Instructional Workshop on the Use of GAP in Research

St. Andrews, England, 7.4.–11.4.97

Organizers: Mike Atkinson, Ed Robertson, Steve Linton (St. Andrews).

Contact Person: Dr. Werner Nickel, Mathematical Institute, University of St Andrews, North Haugh, St. Andrews, Fife, KY16 9S, UK, tel: +44 1334 463766, fax: +44 1334 463748, `werner@dcs.st-and.ac.uk`

Further information: `http://www-theory.dcs.st-and.ac.uk/~sal/Workshop97.html`

7. Computeralgebra im Mathematikunterricht

Münster, 20.5.–23.5.97

Die Zentrale Koordination Lehrerausbildung der Westfälischen Wilhelms-Universität veranstaltet eine Konferenz zum Thema
Computeralgebra im Mathematikunterricht Neue Technologien im mathematisch-naturwissenschaftlichen Unterricht (Derive, Tl-92, Schulen-ans-Netz)

Ort: Westfälische Wilhelms-Universität Münster Hörsaalgebäude des Fachbereichs Mathematik und Informatik Einsteinstraße

Die Konferenz richtet sich in erster Linie an alle Lehrerinnen und Lehrer der mathematisch-naturwissenschaftlichen Fächergruppe. Darüber hinaus sollen sich alle in Ausbildung befindlichen Lehramtsanwärter sowie deren Ausbilder besonders angesprochen fühlen.

Das Angebot der Konferenz soll sich auf folgende

- Computeralgebra (Derive, Mathematica, Maple, TI-92)
- aktuelle Entwicklungen des Programms "Schulen ans-Netz" (Hypertext-Anwendungen, Bildungsserver,...)
- Geometrie mit dem Computer (Cabri geometre,...)
- Stochastik mit dem Computer
- Perspektiven eines durch moderne Technologien gewandelten mathematisch- naturwissenschaftlichen Unterrichts (Curriculum-Diskussion, . . .)

Sektionen erstrecken:

Die Tagung gliedert sich in Hauptvorträge (Keynote-lectures) und Kurzvorträge (Lectures) sowie Workshops (geplant: Mathematik: Einführung in den TI-92; Biologie: Hyperlab-Projekt, Chemie: multimediales Praktikum).

Unterrichtspraktiker haben die Gelegenheit, in 30-minutigen Kurzvorträgen ihre Unterrichtserfahrungen zu den oben genannten Themenbereichen (Computeralgebra, Geometrie-Programme, Stochastik, Schulen ans Netz,...) darzustellen. Entsprechende Vorschläge mit einer kurzen, halbseitigen Inhaltsangabe (Abstract) senden Sie bitte bis zum 31. Oktober 1996 an die Zentrale Koordination Lehrerausbildung, Prinzipalmarkt 38, 48143 Münster (Tel 02 51/ 83-49 07, Fax: 02 51/ 83-49 04)

8. Computational Representation Theory

Dagstuhl, 20.5.–23.5.97

Organizers: Meinolf Geck (Paris), Gerhard Hiss (Heidelberg), Wolfgang Kimmerle (Stuttgart), Klaus Lux (Aachen), Gunter Malle (Heidelberg).

Contact Person: Dr. G. Hiss, IWR der Universität Heidelberg, Im Neuenheimer Feld 368, 69120 Heidelberg, Germany, `hiss@euterpe.iwr.uni-heidelberg.de`.

Registration: Limited number of participants. Enquire by January 31, 1997.

Financial Statements: No fee; Full Board at Dagstuhl about DM 85/day; Some support of participation will be available, contact Dr. G. Hiss.

Further Information: `http://www.iwr.uni-heidelberg.de/~CRT`.

9. **Computational Methods for Permutation and Matrix Groups**

Aachen, 26.5.–29.5.97

Organizer: Akos Seress (Columbus, Ohio), c.o. Prof. J. Neubüser, Lehrstuhl D für Mathematik, RWTH Aachen, Templergraben 64, 52062 Aachen, Germany, Tel. 0049/241/804543, `aseress@math.rwth.aachen.de`.

Registration: Limited number of participants. Enquire by March 15, 1997.

Further information: `http://www.math.rwth-aachen.de/~Akos.Seress/Workshop97.html`.

10. **Computational Aspects of Commutative Algebra and Algebraic Geometry**

Dagstuhl, 26.5.–30.5.97

Leitung: E. Becker (Uni. Dortmund, Germany), W. Decker (Uni. Saarbrücken, Germany), D. Eisenbud (Brandeis Univ., USA), H. W. Lenstra (Univ. of Berkeley, USA), B. Trager (IBM Research Center, Yorktown Heights, USA).

Teilnahme nur auf Einladung

11. **Computational Group Theory**

Oberwolfach, 1.6.–7.6.97

Tagungsleitung: M. Newman (Canberra), H. Pahlings (Aachen). Teilnahme nur auf Einladung.

12. **First ISAAC Conference, Sektion Orthogonale Polynome und Computeralgebra**

University of Delaware, Newark, Delaware, 2.–6.6.1997

ISAAC ist eine Abkürzung für *The International Society for Analysis, its Applications and Computation.* Analysis ist hier im weitestgehenden Sinn gemeint und umfaßt die Gebiete Differentialgleichungen, Integralgleichungen, Funktionalgleichungen und Funktionentheorie. Der erste Kongreß dieser neu gegründeten Gesellschaft findet vom 2. bis zum 6. Juni 1997 an der University of Delaware statt. Die Konferenzsekretärin ist:
Pam Irwin, Department of Mathematics, University of Delaware, email: `irwin@math.udel.edu`

Die Konferenz hat ihre WWW-Seite bei der Adresse `http://www.math.udel.edu/isaac/conferen/congr97.htm`, und bei `http://www.math.udel.edu/isaac/cong.html` ist ein Online-Registrierungs-Formular erhältlich.

Sektion 13 dieser Konferenz ist dem Thema *Orthogonale Polynome* gewidmet und wird von Wolfram Koepf organisiert. Die Betonung liegt hierbei auf der Benutzung von Computeralgebra in Verbindung mit orthogonalen Polynomen und speziellen Funktionen. Computeralgebra kann das tägliche Arbeiten mit orthogonalen Polynomen und speziellen Funktionen in Forschung und Anwendung nachhaltig ändern. In der vorliegenden Sektion sollen Entwickler und Programmierer von Computeralgebra-Algorithmen, die mit diesem Themenkreis in Zusammenhang stehen, mit Computeralgebra-Nutzern zusammengebracht werden, die derartige Software brauchen.

Folgende Vorträge sind bislang geplant:

Victor Adamchik: *On Series Involving the Riemann Zeta Function*, Renato Álvarez-Nodarse: *Algebraic and Spectral Properties of Orthogonal Polynomials: A Computer Algebra Approach*, Tewodros Amdeberhan: *Computer Aided Proofs of a Determinant Identity*, Richard A. Askey: *Some Problems on Orthogonal Polynomials*, Yang Chen, Mourad Ismail: *Asymptotics of the Largest Zeros of Some Orthogonal Polynomials*, Charles F. Dunkl: *Using Maple to Explore Special Functions of Several Variables*, Wolfram Koepf, Dieter Schmersau: *Algorithms for Classical Orthogonal Polynomials*, Tom H. Koornwinder, René Swarttouw: *rec2ortho: An Algorithm for Identifying Orthogonal Polynomials Given by Their Three-Term Recurrence Relation as Special Functions*, Kelly Roach: *Maple and Orthogonal Polynomials* André Ronveaux: *Recurrence Relations for Connecting Coefficients Between Some Orthogonal Polynomials Families–A Simple Algorithm (Mathematica)*, Walter J. Van Assche: *Some Examples of Computer Experiments in Research on Orthogonal Systems*, Rafael Yanhez:, Doron Zeilberger: *The Super-Holonomic Hierarchy*.

Die WWW-Seite `http://www.zib.de/koepf/isaac.html` enthält Informationen zu der vorliegenden Sektion und wird laufend auf den neuesten Stand gebracht.

13. **ISSAC'97 – International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation**

Maui, Hawaii, USA 21.7.–23.7.97

ISSAC '97 is an annual international symposium that provides an opportunity to learn of new developments and to present original research results in all areas of symbolic mathematical computation.

Topics of the meeting include, but are not limited to:

Algorithmic mathematics: Algebraic, symbolic and symbolic-numeric algorithms including: simplification, polynomial and rational function manipulations, algebraic equations, summation, integration, linear algebra and matrix computations, number theory, ODE/PDE, complex computation, group computations, and geometric computing;

Computer science: Theoretical and practical problems in symbolic mathematical computation including: computer algebra systems, problem solving environments, programming languages and libraries for symbolic computation, user interfaces, data structures, software architectures, parallel/distributed computing, mapping algorithms to architectures, concrete analysis and benchmarking, complexity of computer algebra algorithms, artificial intelligence techniques, automatic differentiation and code generation, mathematical data exchange protocols;

Applications: Problem treatments incorporating algebraic, symbolic, or symbolic-numeric computation in an essential or novel way, including engineering, economics and finance, physical and biological sciences, computer science, logic, mathematics, statistics, and education.

Conference activities

Planned activities include invited presentations, research and survey papers, poster sessions, tutorial courses, vendor exhibits, and software demonstrations. Proceedings will be distributed at the symposium.

In 1997, ISSAC will be held in federation with PASCO'97, the Second International Symposium on Parallel Symbolic Computation (July 20-22 at the same location).

Important Dates: 15 Jan 1997 Submitted papers must be received, 14 Mar 1997 Notification of acceptance, 12 Apr 1997 Camera-ready papers must be received,

General Chair: Bruce Char, Department of Mathematics and Computer Science, Drexel University, 3141 Chestnut Street, Philadelphia PA 19104, `issac97_general_chair@mcs.drexel.edu`, + 1 (215) 895-2670, + 1 (215) 895-1582 fax.

Program Chair: Paul S. Wang; Institute for Computational Mathematics; Kent State University; Kent OH 44242; `pwans@mcs.kent.edu` or `issac97_program_chair@mcs.drexel.edu` .

Program Vice-Chair: Hoon Hong, RISC-Linz, A- 4232 Hagenberg, University of Linz, LINZ Austria, `Hoon.Hong@risc.uni-linz.ac.at` .

Program Committee: Arjeh M. Cohen, RIACA, The Netherlands, `anc@win.tue.nl`, George Havas, Queensland U. Australia, `havas@cs.uq.oz.au`, Hoon Hong, Vice Chair, RISC/Linz Austria, `goon.Pong@risc.uni-linz.ac.at`, Jeremy Johnson, Drexel U., USA, `jjohnson@mcs.drexel.edu`, Norbert Kajler, Ecole des Mines de Paris, France, `kajler@cc.ensmp.fr`, George Labahn, U. of Waterloo, Canada, `glabahn@daisy.uwaterloo.ca`, Teo Mora, U. Genova, Italy, `theomora@gauvain.dima.unige.it`, Peter Paule, RISC/Linz, Austria `Peter.Paule@risc.uni-linz.ac.at` Bob Plemmons, Wake Forest U. USA, `plemmons@deacon.mthcsc.wfu.edu`, Rafael Sendra, U. Alcala de Henares, Spain, `mtsendra@alsala.es`, Fritz Schwarz, GMD, Germany, `fritz.schwarz@gmd.de`, Vilmar Trevisan, UFRGS, Brazil, `trevisan@mat.ufrgs.br`, Paul S. Wang, Chair, Kent State U. USA, `pwang@mcs.kent.edu`, Kazuhiro Yokoyama, Fujitsu Labs, Japan, `momoko@iias.flab.fujitsu.co.jp`, Richard Zippel, Cornell U. USA, `rz@cs.cornell.edu`.

Information: `http://www.mcs.drexel.edu/ISSAC97`

14. PASCO'97 – Second International Symposium on Parallel Symbolic Computation

Maui, Hawaii, USA 20.7.–22.7.97

The Second International Symposium on Parallel Symbolic Computation (PASCO'97) seeks papers presenting original research on all aspects of high performance symbolic computation. High performance is meant as pertaining to the solution of large problems by means of parallel, distributed, multi-processor, or networked computers.

Program Committee Chair: Erich Kaltofen, Mathematics Department, North Carolina State University, Raleigh, North Carolina 27695-8205, Phone: (919) 515 8785 Fax: (919) 515 3798 email: `kaltofen@eos.ncsu.edu` .

Symposium Chair: Hoon Hong, RISC-Linz, Johannes Kepler University, A-4040 Linz, Austria, Phone: +43 (7236) 3231-48, Fax: +43 (7236) 3231-30, email: `Hoon.Hong@risc.uni-linz.ac.at` .

Important dates: Submission: January 15, 1997, Notification: March, 1997, Camera-ready: May, 1997,

Information: `http://www.csc.ncsu.edu/pasco96`

15. 15th IMACS World Congress 1997 on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics

Berlin, 24.8.–29.8.97

Conference Venue: Hotel Berlin HILTON, Congress Center, Mohrenstraße 30, D-10117 Berlin-Mitte.

Scientific Program: The Scientific program will consist of regular papers (25 minutes) and keynote papers (45 minutes). Proposed regular papers may be submitted by sending an extended summary (between 1 and 2 pages, three copies) to the Congress Office (by regular mail or by e-mail).

Keynote papers may be proposed in any format, not necessarily by the intended author, giving a description of the importance of the subject area and the credentials of the proposed speaker.

Part of the program will consist of Organized Sessions. Proposals to organize a Session or Sessions are solicited. They should describe the specific area to be covered, and the full address, telephone, e-mail, etc. of the intended organizer(s).

Proposals for Keynote papers and proposals for Organized Sessions may be submitted in writing to the Congress Office.

Topics: The topics of interest related to scientific Computing and Applied Mathematics include, but are not limited to:

Methods for ODE's, PDE's, Integral equations, Computational linear algebra, Parallel computing, Computer arithmetic, Computational physics/chemistry/biology, Nonlinear science, Computational acoustics, Knowledge based Systems, Symbolic Computation, Modelling and Simulation, Applications in Engineering, Control Systems, Robotics, Biology, the Environment, etc ..

Congress General Chair: Prof. Dr. A. Sydow, GMD FIRST, German National Research Center for Information Technology, Research Institut for Computer Architecture and Software Technology, Rudower Chaussee 5, D-12489 Berlin, Germany, phone: +49 30 6392 1813, fax: +43 30 6392 1805, email: sydow@first.gmd.de or imacs97@first.gmd.de,

Scientific Program Committee: R. Beauwens, Université Libre de Bruxelles, Belgium, P. Borne Ecole Centrale de Lille, France, J. Butcher, Auckland University, New Zealand, P. L. Christiansen, Technical University of Denmark, Denmark, P. Deuflhard, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, Germany, J. Dongarra, University of Tennessee, USA, J. Flaherty Rensselaer, Polytechnic Institute, USA, P. van der Houwen, CWI, The Netherlands, A. Iserles, Cambridge University, UK, A. Jakeman, Australian National University, Australia, J. Rice, Purdue University, USA, R. D. Russell, Simon Fraser University, Canada, A.A. Samarskii, Russian Academy of Sciences Moscow, Russia, W. Stucky, Universität Karlsruhe, Germany, J. Sanz-Serna, Universidad de Valladolid, Spain, H.J. Stetter, Technische Universität Wien, Austria, U. Trottenberg, GMD SCAI St. Augustin, Germany.

Deadlines: Submission of Sessions and Papers due by December 1, 1996 (in case of multiple authors mark the correspondence author). Notification of acceptance due by February 28, 1997. Camera-ready papers due by April 30, 1997 .

WWW-Page: `http://www.first.gmd.de/imacs97/`

16. AAECC 12 – 12th Symposium on Applied Algebra, Algebraic Algorithms, and Error-Correcting Codes

Toulouse, Frankreich, 23.7.–27.7.96

Topics:

- Error-Correcting Codes: Theory and Applications.
- Advances in algebraic approaches to ECC (concatenated codes, multi-variate codes, algebraic-geometric codes, applications of Gröbner bases, etc.).
- Applications of codes: trellis codes, turbo codes, adaptive codes and time-varying codes, modulation and codes, systolics and codes, etc.
- Algebraic algorithms and algebraic computation.
- Computational methods in Commutative Algebra, Algebraic and Real Geometry, Differential Algebra.
- Theoretical and practical complexity in algebra and geometry.
- Complexity in coding/decoding and finite field constructions.
- Cryptography.

Deadlines: to receive submitted papers: end of November 1996, acceptance or rejection: end of April 1997.

Conference Board: H.F. Matteon, CIS 2-120 CST, Syracuse University, Syracuse NY 13244-4100, USA, FAX: (+) 1-315-44S1122, Phone: (+) 1 315 443 4602, Email: `hmattson@syr.edu`.

T. Mora, DISI, Universita di Genova, Viale Dodecaneso 35, I-16146, Genova, Italy, FAX: 39-10-3536699, Phone: 39-10-3536828, Email: `theomora@dima.unige.it`.

A. Poli, AAECC/IRIT Lab., University P. Sabatier, 118 route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex, France, Fax:(+) 33-61-55-62-58, Phone: 33-62-25-87-91, Email: `poli@cict.fr`.

Conference Committee: T. Deth (Karlsruhe), J. Calmet (Karlsruhe), G. Cohen (Paris), M. Giusti (Palaisesu), J. Heintz (B.Aires/Santander), H. Imai (Tokyo), H. Janwa (Allahabad), R. Kohno (Yokohama), A. Miola (Roma), O. Moreno (Puerto Rico), T. R. N. Rao (Lafayette La), S. Sakata (Tokyo).

17. Groups St Andrews 1997 in Bath

Bath, England, 26.7.–9.8.97

This conference will be held at the University of Bath, Bath, England from Saturday 26 July 1997 (arrival day) to Saturday 9 August 1997 (departure day). It will be a large international conference and, based on experience from previous Groups St Andrews conferences, we expect around 350 participants.

The **speakers**, each giving a course of about four lectures, will be Laci Babai, University of Chicago, Martin Bridson, Pembroke College, Oxford, Chris Brookes, Corpus Christi College, Cambridge, Cheryl Praeger, University of Western Australia, Aner Shalev, The Hebrew University of Jerusalem.

The courses by the main speakers will be in the first week of the conference. The second week will include a programme of invited one hour talks. There will be a full seminar programme in both weeks of the conference.

Organizing committee: Colin Campbell, Edmund Robertson, Geoff Smith.

Further information about the conference and the city of Bath may be viewed at the WWW page:
`http://www.bath.ac.uk/~masgcs/gps97/`

Conference email and mail address: `groups97@dcs.st-and.ac.uk`, Groups St Andrews 1997 in Bath, Mathematical Institute, North Haugh, St Andrews, Fife KY16 9SS, Scotland.

18. **ISSAC'98**

Rostock, 13.8. – 15.8.98

ISSAC'98 will be held at Rostock University in August 1998 in relation to the International Congress of Mathematics which will take place in Berlin (from 18.08. until 28.08.1998).

Local Arrangements Chair: Karl Hantzschmann, Rostock University, Department of Informatics, Albert-Einstein-Str. 21, 18059 Rostock, Germany, Tel.: +49 (381) 498 3400, Fax: +49 (381) 498 3399,
E-mail: `hantzschmann@informatik.uni-rostock.de` .

Further information on the symposium will be available on World Wide Web at the URL
`http://www.informatik.uni-rostock.de / kh/issac98.html`

19. **ICM98 – International Conference in Mathematics**

Berlin, 18.8. – 28.8.98

Topics: 1. Logic , 2. Algebra: Finite and infinite groups. Rings and algebras. Representations of finite dimensional algebras. Algebraic K-theory. Category theory and homological algebra. **Computational algebra.** Geometric methods in group theory.
3. Number Theory and Algebraic Arithmetic , 4. Algebraic Geometry (joint piece with 11) , 5. Differential Geometry and Global Analysis , 6. Topology , 7. Lie Groups and Lie Algebras , 8. Analysis , 9. Ordinary Differential Equations and Dynamical Systems , 10. Partial Differential Equations (includes non-linear functional analysis) , 11. Mathematical Physics (joint piece with 4) , 12. Probability and Statistics , 13. Combinatorics , 14. Mathematical Aspects of Computer Science (joint with IUCSI) , 15. Numerical Analysis and Scientific Computing , 16. Applications , 17. Control Theory and Optimization (joint with Mathematical Programming Society) , 18. Teaching and Popularization of Mathematics , 19. History of Mathematics

Berichte von Konferenzen

1. **2. AXIOM-Nutzer-Treffen (ANT-2)**

Karlsruhe, 21.–22.3.1996

Schwerpunkt des Treffens war die Diskussion des neuen Compilers von AXIOM 2.0a und seiner A#genannten Sprache. Dazu fand vormittags ein zweiteiliger Kurs statt: zunächst erläuterte Stephen Watt (Nizza) in seinem Vortrag *The A# Programming Language: Reconstructing an Algebra System from Elementary Particles* die grundlegenden Ideen für den Entwurf von A#; danach hatten die Teilnehmer die Möglichkeit, unter Anleitung von Mike Dewar (Oxford) an den RS-6000-Maschinen des Rechenzentrums der Universität Karlsruhe praktische Erfahrungen in der Programmierung mit A#zu sammeln.

Nach einer Demonstration der neuen Windows-Version von AXIOM gab es am Nachmittag noch eine Reihe von Vorträgen. Mike Dewar (Oxford) zeigte in seinem Vortrag *Using AXIOM and the NAG Library to solve PDEs*, wie symbolische und numerische Rechnungen in AXIOM kombiniert werden können. Welche Möglichkeiten die Benutzung des A#-Compilers außerhalb von AXIOM bietet, demonstrierte Manuel Bronstein (Zürich) in seinem Vortrag Σ^{IT}*: An A# Library for Linear Operators*. In drei weiteren Vorträgen wurden Anwendungen von AXIOM vorgeführt: Winfried Fakler (Karlsruhe): *Rechnen mit Invarianten in AXIOM*, Armin Nückel (Karlsruhe): *CA-basierter Entwurf von Schaltkreisen: Erfahrungen in AXIOM*, Christian Knauer: *Eine modulare Implementierung des Berlekamp-Massey-Algorithmus.*

Werner M. Seiler (Karlsruhe)

2. **Workshop – Algorithmische Invariantentheorie / Computational Invariant Theory**

Dagstuhl, 29.4. – 3.5.1996

Leiter: B. H. Matzat (Heidelberg), L. Smith (Göttingen).
Träger: DFG-Schwerpunkt Algorithmische Zahlentheorie und Algebra.

Ziel des Workshops war es, neuere Ergebnisse und offene Fragen der Invariantentheorie zu diskutieren und auch Nichtspezialisten nahezubringen. Gleichzeitig bot der Workshop ein Forum, auf dem sich Forscher aus verschiedenen Orten treffen konnten, die sich für Invariantentheorie interessieren. Thematische Schwerpunkte waren:

- Modulare Invariantentheorie. Hier hat sich gezeigt, daß es vor allem an aussagekräftigen Beispielen mangelt, aus denen man sinnvolle Vermutungen ableiten könnte.
- Der Beweis von Bourguiba und Zarati für eine Vermutung von Landweber und Stong.

- Algorithmische Aspekte der Invariantentheorie.

Da es bei dem Workshop nicht nur um Ergebnisse, sondern auch um offene Probleme ging, konnte er dazu beitragen, einige weitere Arbeiten anzuregen.

Folgende Vorträge fanden statt (in chronologischer Reihenfolge):

Larry Smith *(Göttingen): Introduction, Noether's degree bound*
Peter Fleischmann *(Essen): Finite generation in the modular case and the question of degree bounds*
Gerhard Pfister *(Kaiserslautern): Finite generation for reductive groups and invariant theory of unipotent groups*
Manfred Göbel *(Tübingen): Molien's formula and the degree bounds of Stanley and Göbel*
Nelson Killius *(Göttingen): Small groups in small characteristic: some examples*
Gregor Kemper *(Heidelberg): Calculating invariant rings of finite groups*
H.E.A. Campbell *(Kingston, Canada): The Cohen-Macaulay property and depth in the modular case: examples and counter examples*
B. Heinrich Matzat *(Heidelberg): The Cohen-Macaulay property for linearly reductive groups*
David Wehlau *(Kingston, Canada): Bases for rings of coinvariants*
Kathrin Kuhnigk *(Göttingen): Invarianten und Steenrodsche Operationen*
Reg Wood *(Manchester): Differential operators and the Steenrod algebra*
Steward Priddy *(Evanston, USA): On invariant rings which are almost isomorphic*
Mara D. Neusel *(Magdeburg): Dickson-invariants and invariant ideals in rings of invariants*
Dagmar Meyer *(Barcelona): The conjecture of Landweber and Stong*
David Green *(Essen): On symplectic invariants and cohomology rings of extraspecial p-groups*
Said Zarati *(Tunis): Proof of the Landweber-Stong conjecture I*
Dorra Bourguiba *(Tunis): Demonstration de la conjecture de Landweber-Stong II*
Hans-Werner Henn *(Heidelberg): A variant of the proof*
Ian Hughes *(Kingston, Canada): Invariants of finite groups and their Hilbert-series*
Gunter Malle *(Heidelberg): Reflection groups and invariant theory*
Karin Gatermann *(Berlin): Equivariant dynamics and invariants*
Walter Wenzel *(Kiel): Determinants, Pfaffians and variations of the Greedy algorithm*
Harm Derksen *(Basel): Calculating invariant rings of linearly reductive groups*
Vladimir Popov *(Moskau): The algorithmic finding of orbits in Hilbert's zero cone*
Hanspeter Kraft *(Basel): Degree bounds for invariant rings of reductive groups*

Außerdem fanden folgende Programmdemonstrationen statt:

Gregor Kemper *(Heidelberg): The INVAR-package for MAPLE*
Agnes Heydmann *(Saarbrücken): SINGULAR and INVAR*

Gregor Kemper (Heidelberg)

3. Second International Symposium ANTS II

Talence, Bordeux, France, 18.–23.5.1996

Leiter: Henri Cohen, Michel Olivier

Inhalt dieser Reihe von Konferenzen im Abstand von zwei Jahren sind neue Ergebnisse der algorithmischen Zahlentheorie. (Die nächste Konferenz - ANTS III - wird 1998 in Amerika stattfinden.)

Vorträge (in chronologischer Reihenfolge): Oliver Schirokauer *(Oberlin): Recent work on the discrete logarithm problem (eingeladener Vortrag)*

Damian Weber *(Saarbrücken): Computing discrete logarithms with the general number field sieve*

R. P. Brent *(Canberra),* A. van der Poorten *(Sydney),* H. J. J. te Riele *(Amsterdam): A comparative study of algorithms for computing continued fractions of algebraic numbers*

C. Rössner, J.-P. Seifert *(Frankfurt am Main): The complexity of approximate optima for greatest common divisor computations*

D. Ford *(Montreal),* G. Havas *(Queensland): A new algorithm and refined bounds for extended GCD computations*

S. M. Meyer, J. P. Sorenson *(Indianapolis): Efficient algorithms for computing the Jacobi symbol*

Mark Giesbrecht *(Winnipeg): Probabilistic computation of the Smith normal form of a sparse integer matrix*

Gerhard Niklasch *(München): The number field database on the World Wide Web server*

Bjorn Poonen *(Princeton): Computational aspects of curves of genus greater than 1 (eingeladener Vortrag)*

Ming-Deh A. Huang, L. M. Adleman *(Los Angeles): Counting rational points on curves and Abelian varieties over finite fields*

Brid ni Fhlatuin *(Bath): The height on an Abelian variety*

David R. Hayes *(Amherst),* David S. Dummit *(Burlington): Checking the refined p-adic Stark conjecture when p is Archimedean*

Stefane Fermigier *(Paris): Construction de courbes elliptiques de grand rang avec 2-torsion*

Kristin Lauter *(Chicago): Class field construction of curves over finite fields with maximal number of points*

Horst G. Zimmer *(Saarbrücken)*, Josef Gebel *(Montreal)*, Attila Pethoe *(Debrecen): Computing integral points on Mordell's elliptic curves*

N. P. Smart *(Canterbury): How difficult is it to solve a Thue equation ?*

M. Tsfasman*: Algebraic geometry codes and lattices (eingeladener Vortrag)*

James McKee, Richard Pinch *(Cambridge): Old and new deterministic factoring algorithms*

Thomas F. Denny *(Saarbrücken)*, Volker Müller *(Waterloo): On the reduction of composed relations from the number field sieve*

M. Elkenbracht-Huizing *(Amsterdam): A multiple polynomial general number field sieve*

Michael E. Pohst *(Berlin): Computational aspects of Kummer theory (eingeladener Vortrag)*

H. Cohen, F. Diaz y Diaz, M. Olivier *(Talence): Computing ray class groups, conductors and discriminants*

Martin Schörnig, Michael E. Pohst *(Berlin): On integral basis reduction in global function fields*

Stefane Louboutin *(Caen Credex): Computation of relative class numbers of CM-fields*

Sachar Paulus *(Essen): How to compute the ideal class group of a quadratic order over a principal ideal ring*

K. Belabas *(Talence): Computing cubic fields in quasi-linear time*

Daniel J. Bernstein *(Chicago): Fast ideal arithmetic via lazy localization*

Claus Fieker, Michael E. Pohst *(Berlin): On lattices over number fields*

David Ford *(Montreal): Minimum discriminants of primitive sextic fields*

Reynald Lercier *(Palaiseau credex): Computing isogenies in* F_{2^n}

Jean-Marc Couveignes *(Utrecht): Computing l-isogenies with the p-torsion*

Istvan Gaal *(Debrecen): Power integral bases in algebraic number fields*

R. Scheidler *(Newark): Compact representation in real quadratic congruence function fields*

Andreas Stein *(Saarbrücken): Elliptic congruence function fields*

Michael Pohst (Berlin)

4. OpenMath Workshop

Zürich, 27.–28.6.1996

Background and terminology

The OpenMath project began in December 1993. Its goal is to devise a complete protocol for inter-process transmission of mathematical data and commands with a guarantee that meaning is preserved. So far six workshops have been held, and two reports produced. More information about the project is available via World Wide Web at `http://www.can.nl/ abbott/OpenMath/`

At the sixth OpenMath workshop the main topic was refining the notion of "context": a context is a collection of concepts from some particular branch of mathematics. Related to this was the question of how to handle the "type" of a mathematical object.

G. Gonnet, *Semantic Dictionaries in OpenMath*, This talk presented a detailed proposal for the information which could usefully appear in a semantic dictionary (elsewhere called a context).

S. Watt, *The INRIA OpenMath Prototype*, Based largely on the published specification for OpenMath prototype 2.1 the group at INRIA have built some implementations. This talk described alterations made to the specification, and covers the work invested in creating a basic collection of OpenMath contexts.

A. Diaz, *The OpenMath Context Server and Registry*, A vital part of making new contexts available is a publishing mechanism. This talk described the first prototype OpenMath context server, and discussed various possible improvements. Ideas on how to extend this to multiple sites were also put forward.

S. Buswell, *A Proposed Semantic Mathematical SGML DTD*, The work on HTML-Math is presentation based. This talk described an SGML DTD which is based on semantics; this semantic information is important if the formula is to be extracted from the SGML document and processed by mathematically sophisticated software.

R. Sutor, *techexplorer and OpenMath: WWW Scientific Publishing*, This talk discussed how OpenMath would be useful to enable techexplorer documents to contain mathematical content that could be visually transferred to other applications.

R. Sutor, *A Proposed OpenMath Object Compatibility Standard*, On a given platform, e.g. Windows 95 or the Macintosh, the full OpenMath standard with encoding and communications protocols is overkill. This talk discussed why OpenMath needs an "Object Standard" and how OpenMath could work with Windows OLE/ActiveX technology.

R. Sutor, *Update on the HTML Math standards effort*, Sutor had recently joined the W3C HTML Math Editorial Review Board which is working on an HTML representation for maths. This talk presented an overview of the current state of HTML-Math.

J. Abbott, *OpenMath Network Compatibility*, On platforms which do not have a native object transfer protocol it is necessary for OpenMath to define its own linear encoding. This talk presented the latest developments in OpenMath encodings.

J. Abbott, *OpenMath Prototypes*, Descriptions of the design of the latest OpenMath prototype together with the reasoning behind the design were given. Some shortcomings were highlighted accompanied by ideas on how to avoid these in later prototypes.

G. Simon, *Communication Interface between SAC–2 and LiDIA*, This talk summarized some experiences on the basis of a sample application implemented using a CORBA like system (ILU). It was proposed to combine this approach with OpenMath.

J. Davenport, *Some Ideas for Types in OpenMath*, The design of the AXIOM system highlights the benefits of keeping detailed type information. The talk presented some arguments about the type information which OpenMath should include.

H. Schönemann , *Experiences with Distributed Polynomial Computations*, This talk contributed some conclusions and suggestions arising from experiences of the Singular group with MP/MPP (and other communication protocols) to the OpenMath prototyping effort.

John Abbott (Amsterdam)

5. Internationale DERIVE und TI-92 Konferenz Computeralgebra im Mathematikunterricht

St. Augustin, 2.–6.7.1996

Vom 2.-6. Juli 1996 fand in St. Augustin bei Bonn in den Räumen und Einrichtungen der GMD – Forschungszentrum für Informationstechnik – ein Kongreß zu Fragen des Einsatzes der Computeralgebra im Mathematikunterricht statt. Er wurde von etwa 250 Teilnehmern aus 25 Ländern aus aller Welt besucht. Es wurden 7 Plenarvorträge (Keynote Lectures), in drei parallelen Schienen über 50 weitere Vorträge sowie in vier parallelen entsprechend ausgerüsteten Seminarräumen über 25 Workshops durchgeführt. Anlaß und Hauptgegenstand waren das Computeralgebrasystem DERIVE, für das hier bereits die 2. große internationale Veranstaltung im Abstand von 2 Jahren vorlag (1994 in Plymouth/England, 1998 in Baltimore/USA) und als Neuentwicklung der Taschenrechner TI-92 von Texas Instruments, der die wesentlichen Möglichkeiten von DERIVE und Cabri-Géomètre sehr kostengünstig für Lehrer und Schüler vereint. Damit erscheint eine durchgreifende curriculare Veränderung des Mathematikunterrichts an weiterführenden Schulen endlich möglich.

Die Keynote Lectures wurden gehalten von Bruno Buchberger, Universität Linz/Österreich (*Which mathematics for which students*), Wilfrid Herget, Universität Bielefeld (*Wieviel Termumformungen braucht der Mensch?*), John Berry, Universität Plymouth/UK (*Investigating mathematics with Derive and the TI-92*), Michelle Artigue, Universität Paris (*Computer environments and cognitive theories in mathematics education*), Bert Waits, Universität Ohio/USA (*A new hand-held, interactive Computer learning environment for the teachting and learning with Derive*) und Wolfram Koepf, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin (*Numeric versus symbolic computation*). Ein umfangreicher Tagungsband wird vorbereitet und Ende des Jahres erscheinen. Eine Bücher- und Software-Ausstellung, insbesondere vom software-Zentrum bk-teachware Hagenberg/Linz, ergänzten das Angebot.

Der Kongreß wurde von Bärbel Barzel, Düsseldorf, glänzend geleitet. Ein festliches Buffet auf der Godesburg, Exkursionen an Rhein und Mosel sowie ein Besichtigungsprogramm für Begleitpersonen sorgten für die Pflege alter Kontakte und die Anknüpfung neuer Beziehungen in einer angeregten internationalen Familie. Man darf hoffen, daß der Mathematikunterricht an Schulen davon gewinnt.

Leo H. Klingen (Bonn)

6. The 2nd IMACS Conference on APPLICATIONS OF COMPUTER ALGEBRA

Hagenberg, Österreich, 17.–20.7.1996

Die IMACS ACA Konferenzreihe ist dafür gedacht, über ernsthafte Anwendungen von Computeralgebra zu berichten. Die zweite Tagung in diesem Zyklus fand zwischen dem 17. und dem 20. Juli 1996 im Schloß Hagenberg am RISC in der Nähe von Linz statt.

Die Tagung war in folgende Sektionen aufgeteilt: *Automated Theorem Proving*, *Formal Analysis of PDEs*, *Coding Theory and Cryptology*, *Geometric Modelling and CAD*, *Computational Physics*, *Computational Category Theory*, *Non-Standard Applications*, *Polynomial Elimination*, *Constraint Programming*, *Analog Circuit Design*, *Evaluations of Series*, *Quantifier Elimination*, *New Appplications in Mathematica* und *Comparative CAS Reviews and Philosophy*, von denen immer zwei parallel stattfanden.

Die einzelnen Vortäge waren: Bruno Buchberger: *An Overview on the Apply Math Project*, Henk Barendregt: *Efficient computations in formal proofs*, Bernd-Ingo Dahn: *Computer Algebra Systems in an Environment of Cooperating Theorem Provers*, Stéphane Dalmas, Marc Gaëtano, Claude Huchet: *A Deductive Database for Mathematical formulas*, Agostino Dovier, Andrea Formisano, Alberto Policriti: *Automated deduction scheme*, Michael Joswig: *Towards modelling the topology of homogeneous manifolds by means of symbolic computation*, Eric Monfroy, Christophe Ringeissen: *Domain-Independent Scheme for Constraint Solver Extension*, Jürgen Stuber: *Building abelian groups and commutative rings into first-order theorem proving*, Volker Sorge: *Integrating a CAS as Proof Planer in the OMEGA Proof Development Environment*, Wolfgang Gehrke: *A method to combine algebraic computations with related deductions*, Jacques Calmet, Karsten Homann: *The Role of Representation for Specification and Communication in Mathematical Assistants*, Helmut Thiele: *On an Algebraic Characterization of Default Reasoning*, Werner M. Seiler: *Involutive systems and the numerical analysis of constrained Hamiltonian Systems*, François Boulier: *Some improvements of a lemma of Rosenfeld*, Sally D. Morrison: *A Generalization of Rosenfeld's Lemma*, Gregory J. Reid: *The rif and radical rif algorithms*, Giuseppa Carrà Ferro: *Triangular Matrices, Differential Resultants and Systems* *of Linear Homogeneous PDE's*, Vladimir P. Gerdt: *Minimal Involutive Bases*, Armin Nueckel: *IDEAS: A Computer-algebra-based Chip Design Environment for Algebraic Computation, Coding and Signal Processing*, Thomas Beth, Markus Grassl, Joern Mueller-Quade: *Algebra for Optical Computing and Quantum Computing*, Andreas Stein: *Cryptographic Aspects Of Real Quadratic Congruence Function Fields*, Franck Leprevost: *On Certain Torsion Subgroups of Jacobians of Decomposable Curves of Genus 2 and Its Applications to Symbolic Integration and Primality Proving*, Shojiro Sakata: *Groebner Basis: A Bridge between Coding Theory and Computer Algebra*, Daniel Augot: *Computing Groebner Bases for Finding Codewords of Small Weight*, Franz Winkler: *Parametrization over prescribed coefficient fields*, Hoon Hong, Josef Schicho: *Implicitization of Nested Circular Curves and generalizations*, Helmut Pottmann, Martin Peternell: *Rational Parametrizations for Envelopes of Natural Quadrics*, E. Arrondo, J. Sendra, J.R. Sendra: *Unirational Generalized Offset to Hypersurfaces.* M. Giusti, K. Hägele, J. Heintz, J.E. Morais, J.L. Montaña, L.M. Pardo: *Lower Bounds for Diophantine Approximations*, Thomas Sauer: *Constructing Gröbner Basis by Interpolation*, Claudio Maccone: *Computer Algebra and General Relativity for Future Spaceflight Investigations*, Rolf Mertig: *FeynCalc 3.0 - A Mathematica Package for Feynman Diagram Calculations in High Energy Physics*, Michael Trott: *High order WKB approximation and singular perturbation theory*, Victor G. Ganzha, K. Schaub, Evgenii V. Vorozhtsov: *The Use of Mathematica for Computation of Stability Regions with Guaranteed Accuracy*, Victor G. Ganzha, Evgenii V. Vorozhtsov: *Curvilinear Grid Topology Effect on the Stability of Difference Schemes*, Hans-Joachim Bungartz: *Rapid Prototyping for the Construction of Higher Order Finite Element Methods on Sparse Grids*, Jean-Antoine Désidéri, Margarita Spiridonova: *Symbolic Computation of Linear and Nonlinear Modified (Partial Differential) Equations*, Robert Walters: *The Todd-Coxeter procedure and the computation of left Kan extensions*, Richard Buckland: *CASE for concurrent systems based on the computer algebra of n-categories*, Makoto Takeyama: *Universal structure and categorical reasoning in type theory*, Robbie Gates: *Generic solutions to polynomial equations in distributive categories*, Robert Rosebrugh: *Database tools for category theory*, Ronald Brown: *The Axiom computer algebra system applied to computational category theory*, F. William Lawvere: *Graphic toposes, n-categories and resulting problems of computer algebra*, Jacques Calmet: *Computer Algebra and Artificial Intelligence*, Eugenio Roanes-Lozano, Luis M. Laita: *A Topology-Independent Model for Railway Interlocking Systems*, Antonio Montes: *Algebraic Solution of the Load-Flow Problem for a four Nodes Electrical Network*, R.L. Akers, P. Baffes, E. Kant, C. Randall, S. Steinberg, R.L. Young: *A Problem Solving Environment for Numerical Partial Differential Equations*, Shigekazu Nakagawa, Naoto Niki, Hiroki Hashiguchi: *Computer Algebra application to the distribution of sample correlation coefficient*, Alejandro A.R. Trejo, Guillermo Fernandez Anaya: *Regular Expressions Simplification*, Ross Taylor: *Thermodyanmics with Maple*, J. Lyn Miller: *Algorithms for Extending Gröbner Bases to Subalgebras and Their Ideals*, Franz Pauer, Andreas Unterkircher: *Gröbner Bases for Ideals in Monomial Algebras and Their Application to Systems of Difference Equations*, Lu Yang, Xiao-Rong Hou, Zhen-Bing Zeng: *A Complete Discrimination System for Polynomials*, Masayuki Noro, Kazuhiro Yokoyama: *An Efficient Method to Compute the Univariate Rational Representation for Zero-dimensional Systems*, Maria Pia Saccomani, Stefania Audoly, Claudio Cobelli, Leontina Dángir: *The Buchberger Algorithm to Study the a Priori Identifiability of Biological Systems Models*, Jean-Charles Faugère, François Moreau de Saint-Martin, Fabrice Rouillier: *Design of Nonseparable Bidimensional Wavelets and Filter Banks Using Gröbner Bases Techniques*, Hans J. Stetter: *Computer Algebra with Data of Limited Accuracy*, Giuseppa Carrà Ferro: *Ritt's Algorithm and Differential Resultants of Two Algebraic ODE's*, Dongming Wang: *A Polynomial System from Differential Equations*, Hoon Hong, Manfred Minimair: *Volume of Parameterized Polyhedra*, Karin Gatermann: *Symmetry: A Package for Computation with Invariants and Equivariants*, Yosuke Sato: *Application of Groebner basis in constraint of non-numerical domains*, Eric Monfroy: *Solver collaborations for non-linear constraints*, Jason Harris: *Semantic Pattern Matching In Mathematica*, Olga Caprotti, Hoon Hong: *Solving Equational Constraints via Patterns*, Frederic Benhamou, Laurent Granvilliers: *Application of Groebner Bases for Numerical Constraint Solving*, Hoon Hong, Stefan Ratschan: *Determining the Relationship Among Sets*, Yike Guo: *A Parallel Algebraic Approach Towards Discrete Optimisation*, Ralf Sommer, Eckhard Hennig: *Overview talk on symbolic techniques for circuit analysis*, Carsten Borchers, Lars Hedrich: *Symbolic Behavioral Model Generation and Formal Verification of Analog Circuits*, Georges Gielen, Piet Wambacq, Willy Sansen: *Techniques for the symbolic analysis of distortion and intermodulation*, Wolfgang Mathis: *Nonlinear network theory, differential geometric approach to nonlinear networks*, Ljiljana Trajkovic: *Homotopy Methods for Solving Nonlinear Equations and their Applications in Circuit Simulation*, B. Mourrain: *Integration of algebraic and numerical tools for devising efficient algorithms for the solution of systems of polynomial equations*, Bernard Mourrain: *Some Applications of Duality Between Polynomials and Formal Series*, Victor Edneral: *NORTPackage for Treating Multivariate Power Series and Applications*, Wolfram Koepf: *Series Representations and Generating Functions of Special Functions with Mathematica*, Nikolay Vasiliev, Victor Edneral: *About an Algorithm to Construct a Canonical Basis for the Ideals in the Ring of Formal Power Series*, Sebastian Walcher: *Normalizer Elements and Integrating Factors*, A. Abad, A. Elipe, J. Palacian, J.F. San-Juan: *ATESAT: A Symbolic Processor for Artificial Satellite*, Nikolay Vasiliev: *Formal Lie Series and Applications to the Hamiltonian Mechanics*, Victor Edneral: *Symbolic Approximation of Periodic Solutions and Trajectories of Henon–Heiles' System by the Normal Form Method*, Andreas Dolzmann, Thomas Sturm: *REDLOG – Computer Algebra Meets Computer Logic*, Volker Weispfenning: *Quantifier Elimination Applied in Simulation and Scheduling*, Emma-Neila Gonzalez-Campos, Laureano Gonzalez-Vega: *Global projection operators for the Cylindrical Algebraic Decomposition algorithm*, Chris Brown, George Collins: *Simple Solution Formula Construction from Truth Invariant CADs*, Mats Jirstrand: *Some Applications of Quantifier Elimination in Nonlinear Control Theory*, Ying Jiangqian: *On the Determination of the Strong Stabilizability of an n-Dimensional Linear System*, H. Hong, A. Neubacher: *Approximate Quantifier Elimination*, R. Liska, S. Steinberg: *The Stability of Boundary Conditions*, H. Hong, R. Liska, S. Steinberg: *Discussion and Comments by the Organizers and Participants*, R. Barrere: *Functional Generic Algorithms for Symbolic Approximations*, A.V. Bocharov, E.M. Vorobév: *Variations on the Theme of Thomas-Rosenfeld with the New Version of Mathematica*, J. Korelc: *A Mathematica Package for Cooperative Problem Solving in Computational Mechanics*, M. Sofroniou: *Computer derivation of numerical methods*, M. Trott: *Computation and visualization of general Riemann surfaces $w[z]$ of arbitrary algebraic functions*, Jason Harris: *Extensible Notations in Mathematica 3.0*, Nicolas Robidoux: *User Friendly Reviews of Computer Algebra Systems*, Laurent Bernardin: *A Review of Symbolic Solvers*, Hans-Gert Gräbe: *Factorized Gröbner Bases and Polynomial Systems*, Frank Postel, Paul Zimmermann: *A review of the ODE solvers of Axiom, Derive, Macsyma, Maple, Mathematica, MuPAD and Reduce*, Helmer

Aslaksen: *Multiple-valued Complex Functions and Computer Algebra*, Michael Wester *Computer Algebra Systems: Pitfalls, Pratfalls and also Elegance*, Stanly Steinberg: *Computer Algebra and Problem Solving Environments*, Paul Zimmermann: *Commercial vs. Free Computer Algebra Systems*.

Weiteres über die Tagung kann bei `http://info.risc.uni-linz.ac.at:70/0/conference/IMACS96/imacs.html` nachgelesen werden, u. a. sind dort auch die Abstracts der einzelnen Vorträge erhältlich.

Wolfram Koepf (Berlin)

7. ISSAC'96: International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation

Zürich, Schweiz, 24.–26.7.1996.

Die *ISSAC'96* wurde vom 24. bis 26. Juli in Zürich veranstaltet. Die Teilnehmeranzahl lag in der Größenordnung 150-200. Am 23.7.1996 gab es verschiedene Tutorials, parallel zu den Vorträgen gab es Postersessions. Die Organisation lag in den Händen von:

General Chair: Erwin Engeler, Mathematics, ETH Zentrum HG, CH-8092 Zürich. `issac96@math.ethz.ch`
Program Committee Chair: Bob Caviness, Computer & Information Sciences, 103 Smith Hall, University of Delaware, Newark DE 19716 USA, `issac96@cis.udel.edu`
Poster Session Chair: Wolfgang Küchlin, Wilhelm Schickard Institut f. Informatik, Sand 13, Universität Tübingen, 72076 Tübingen, `Kuechlin@informatik.uni-tuebingen.de`
Publicity Chair: Manuel Bronstein, Scientific Computation, ETH Zentrum IFW, CH-8092 Zürich, `bronstein@inf.ethz.ch`
Treasurer: Stephane Collart, Mathematics, ETH Zentrum HG, CH-8092 Zürich, `collart@math.ethz.ch`
Exhibit Chair: Max Engeli, Institute of Machine Tools and Manufacturing, ETH Zentrum CLA, CH-8092 Zürich, `engeli@iwf.bepr.ethz.ch`
Local Arrangements Chair: Michael Kalkbrener, Mathematics, ETH Zentrum HG, CH-8092 Zürich, `mkalk@math.ethz.ch`

Auch die neue im letzten Jahr geschaffene Organisation der ISSAC-Konferenzreihe etabliert sich immer stärker. Unter der Leitung der Mitglieder des Leitungsgremiums Stephan Watt (Nizza, Vorsitz), Manuel Bronstein (Zürich) und Johannes Grabmeier (Heidelberg) wurde das ISSAC-Business-Meeting durchgeführt. Durch Los wurde die Amtszeit der Mitglieder Manuel Bronstein (2 Jahre), Richard Jenks (1 Jahr) festgelegt. Teo Mora scheidet aus. Seinen Platz nimmt nun Hoon Hong (RISC Linz) ein, der von der Versammlung aus 7 Kandidaten, die von den Vertretern der Computeralgebra-Gesellschaften (SIGSAM, Fachgruppe, Japan) im Leitungsgremium nominiert worden waren, gewählt wurde. Die ISSAC'97 wird in Hawaii stattfinden. Karl Hantzschmann und Johannes Grabmeier präsentierten die Pläne für die ISSAC'98, die von der Fachgruppe Computeralgebra initiiert wurde. Weiterhin wurde der Zeitraum für die Konferenz in Rostock 1998 auf 13.-15.8.1998, unmittelbar vor dem International Congress of Mathematics in Berlin festgelegt.

Nachfolgend das Programm der ISSAC'96.

Morning Tutorials	
Introduction to Symbolic Summation—from Euler...	Prof. Peter Paule RISC, Universität Linz, Austria
Introduction to Solving Polynomial Systems	Prof. Teo Mora Università di Genova, Italy
Algebraic Methods for Proving Theorems in Elementary and Differential Geometries	Prof. Xiaoshan Gao Wichita State University, USA
Afternoon Tutorials	
Advanced Algorithms for Symbolic Summation—...to Ekhad	Prof. Peter Paule RISC, Universität Linz, Austria
Advanced Algorithms for Solving Polynomial Systems over Complex Numbers	Prof. Teo Mora Università di Genova, Italy
Advanced Algorithms for Solving Polynomial Systems over Real Numbers	Prof. Laureano González-Vega Universidad de Cantabria, Spain
Algorithmic Methods for Rational Algebraic Curves	Prof. J. Rafael Sendra Universidad de Alcalá, Spain
Official Symposium Opening	Prof. Erwin Engeler
Polynomial Algorithms	
Arithmetic and Factorization of Polynomials in F_2x	J. von zur Gathen & J. Gerhard
Factoring Modular Polynomials	J. von zur Gathen & S. Hartlieb
Parallel Distinct Degree Factorization Algorithm	T. Fujise & H. Murao
Computing Complexification of a Semialgebraic Set	M. F. Roy & N. Vorobjov

Algebraic Algorithms

Approximate Polynomial Greatest Common Divisors and Nearest Singular Polynomials	N. Karmakar & Lakshman Y. N.
Euclidean Algorithm in Dimension n	L. Pottier
Fast Computations in the Lattice of Polynomial Intermediate Fields of a Rational Function Field	F. Binder
Testing Shift-Equivalence of Polynomials Using Quantum Machines	D. Y. Grigoriev

Invited Lecture

Does computer algebra need logic?	Prof. Volker Weispfenning Universität Passau, Germany

Gröbner Bases

An Optimal Algorithm for Constructing the Reduced Gröbner Basis of Binomial Ideals	U. Koppenhagen & E. Mayr
Exponential Space Computation of Gröbner Bases	K. Kühnle & E. Mayr
Multigraded Hilbert Functions and Buchberger Algorithm	M. Caboara, G. De Dominicis, & L. Robbiano
Gröbner Bases under Composition II	H. Hong

Systems Issues

Symbolic Mathematics System Evaluators	R. Fateman
A Case Study of Multi-Threaded Gröbner Basis Completion	B. Amrhein, O. Gloor, & W. Küchlin
MPP: A Framework for Distributed Polynomial Computations	O. Bachmann, H. Schoenemann, & S. Gray
Memory Tracing of Algebraic Calculations	A. Norman & J. Fitch

Solutions of Equations

Solution of Elementary Systems of Equations in a Box in R^n	D. Richardson
Analysis of Zero Clusters in Multivariate Polynomial Systems	H. J. Stetter
A Tangent-Secant Method for Polynomial Complex Root Calculation	G. Collins & W. Krandick
Fast High-Precision Computations of Complex Square Roots	T. Ahrendt

Invited Lecture

Kronecker, Galois, and Symbolic Computation	Prof. Harold M. Edwards Courant Institute, New York University, USA

Groups and Algebras

New Sequential and Parallel Algorithms for Generating High Dimension Hecke Algebras using the Condensation Technique	G. Cooperman & M. Tselman
Algorithms for Primitive Elements of Free Lie Algebras and Lie Superalgebras	A. A. Mikhalev & A. A. Zolotykh
Efficient Decomposition of Associative Algebras	W. Eberly & M. Giesbrecht

Differential Equations I

Janet Bases for Second Order Ordinary Differential Equations	F. Schwarz
The General Solution of an Ordinary Differential Equation	E. Hubert
Symbolic Computation of the Index of Quasilinear Differential-Algebraic Equations	G. Thomas
MapleTensor: Progress Report on a New System for Performing Indicial and Component Tensor Calculations Using Symbolic Computation	M. Kavian, R. McLenaghan, & K. O. Geddes

Differential Equations II

Differentially Homogeneous Differential Polynomials	G. Reinhart & W. Sit
Rational Solutions of the Mixed Differential Equation and Its Application to Factorization of Differential Operators	M. van Hoeij
An Algorithm for Complete Enumeration of All Factorizations of a Linear Ordinary Differential Operator	S. P. Tsarev
D'Alembertian Solutions of Inhomogeneous Linear Equations	S. A. Abramov & E. V. Zima

Invited Lecture

Interfacing Computer Algebra and Numerical Modeling	Prof. Stanly Steinberg University of New Mexico, USA

Linear Algebra

On Rank Properties of Toeplitz Matrices over Finite Fields	E. Kaltofen & A. Lobo
Computing Popov and Hermite Forms of Polynomial Matrices	G. Villard
Asymptotically Fast Computation of the Hermite Normal Forms of Integer Matrices	A. Storjohann & G. Labahn
Near Optimal Algorithms for Computing Smith Normal Forms of Integer Matrices	A. Storjohann
Generic Gram-Schmidt Orthogonalization by Exact Division	Ú. Erlingsson, E. Kaltofen, & D. Musser

Applications

Automatic Generation of Optimization Code Based on Symbolic Non-Linear Domain Formulation	R. Bacher
A Methodology of Parsing Mathematical Notation for Mathematical Computation	Y. Zhao
Hypergeometric Function Representations	K. Roach
Asymptotic Expansions of exp-log Functions	D. Richardson, B. Salvy, J. Shackell, & J. Van der Hoeven

Johannes Grabmeier (Heidelberg)

8. Workshop – Programming in GAP

Aachen, 2.–6.9.1996

Die Tagung richtete sich an fortgeschrittene Benutzer des Computeralgebrasystems GAP, die über die Benutzung der im Handbuch dokumentierten Funktionen hinaus eigene Programme in GAP schreiben. Solche Programme können als Beiträge zur Funktionsbibliothek oder als sog. „share packages“ dienen. Für diesen Benutzerkreis wurden die Struktur des künftigen Kernes sowie der Bibliothek von GAP 4 vorgestellt und anhand von bereits implementierten Beispielen veranschaulicht. Das Programm wurde ergänzt durch Berichte über mathematische Projekte, die mit GAP (Version 3) verwirklicht wurden. Die Tagung besaß informalen Charakter, und viel Zeit wurde für Diskussionen zwischen Entwicklern und Benutzern reserviert.

Es waren ca. 35 Teilnehmer anwesend, unter anderem aus St. Andrews, Schottland, von wo aus GAP 4 künftig koordiniert werden wird. Die Vortragsthemen lauteten zusammengefaßt:
Vorträge zur Vorstellung von GAP 4:
Martin Schönert (Aachen): *New concepts in GAP 4: operations and method selection*
Thomas Breuer, Frank Celler und Heiko Theißen (Aachen): *A walk through the GAP 4 library: Elements and domains. Examples: free groups and their elements, rewriting systems, vector spaces and algebras. Lists and enumerators. GAP 3 versus GAP 4. Stabiliser chains*
Martin Schönert (Aachen): *A walk through the kernel: How to move time consuming library functions into the kernel, all about the GAP compiler*
Steve Linton (St. Andrews): *Different types of contribution standards for code, documentation and support*
Steve Linton (St. Andrews): *How to program efficiently in GAP, how to avoid pitfalls, how to locate time or space consuming pieces of code*
Steve Linton (St. Andrews): *How to debug your program, how to debug the method selection, what to do if things go wrong*
Vorträge über Projekte, die mit GAP verwirklicht wurden:
Nik Ruskuc (St. Andrews): *Implementation of semigroups*
Heiko Theißen (Aachen): *Stabiliser chains for automorphism groups*
Willem de Graaf (Eindhoven): *ELIAS, the Lie algebra system built into GAP 4*
Jean Michel (Paris VII) und Frank Lübeck (Heidelberg): *CHEVIE, generic character tables of groups of Lie type*
Franz Gähler (Ecole polytechnique, Paris): *Computing with space groups in GAP*
Chris Wensley (Bangor): *Crossed modules in GAP*

Heiko Theißen (Aachen)

9. DMV - Jahrestagung 1996

Jena, 15.–21.9.1996

Auf der Jahrestagung der Deutschen Mathematikervereinigung gab es neben 16 Hauptvorträgen (darunter aus der Computeralgebra: **A. Kerber** (Bayreuth): Konstruktive Theorie Diskreter Strukturen und Anwendungen) Einzelvorträge in 17 Sektionen. Die Sektion über Computeralgebra wurde von G. Hiß (Heidelberg) und M. Pohst (Berlin) geleitet.

Vorträge (in chronologischer Reihenfolge):

Derek F. Holt *(Warwick): Computational Methods in the Study of Finitely Presented Groups (Übersichtsvortrag)*
Herbert Pahlings *(Aachen): GAP und einige Vermutungen in der Darstellungstheorie*

Herbert Brückner *(Aachen): Darstellungen endlicher auflösbarer Gruppen, Anwendung auf Präsentationen*
Wolfgang Merkwitz *(Aachen): Multiplikation in nilpotenten Gruppen*
Alexander Hulpke *(Aachen): Bestimmung invarianter Untergruppen*
Susanne Schmitt *(Saarbrücken): Das Computeralgebra-System SIMATH*
Florian Heß *(Berlin): Neuere Entwicklungen im Softwaresystem KANT für algebraische Zahlentheorie*
Gerhard Frey *(Essen): Über den diskreten Logarithmus in Abelschen Varietäten und seine Anwendungen in Kryptosystemen (Übersichtsvortrag)*
Martin Klebel *(Augsburg): Algorithmische Bestimmung von Potenzganzheitsbasen in der komplexen Multiplikation*
Franck Leprevost *(Bonn): Über die Jacobischen Varietäten der Geschlecht* 2 *Quotientenkurven von modularen Kurven* $X_0(N)$ *und Anwendungen*
Heiko Theißen *(Aachen): Normalisatorberechnung in Permutationsgruppen*
Rainer Nörenberg *(Bielefeld): Zur Klassifikation zahmer Posetalgebren mit CREP*
Olaf Bachmann *(Kaiserslautern): Chains of Recurrences*
Sabine Hoeppner *(Groningen): Differentialgleichungen in beliebiger Charakteristik*
K.G. Roesner *(Darmstadt): Computeralgebra - eine Alternative zur Numerik? (Übersichtsvortrag)*
Wolfram Koepf *(Berlin): Effiziente Berechnung orthogonaler Polynome in Computeralgebrasystemen*
Michael Pesch *(Passau): Gröbnerbasen in Schiefpolynomringen*
Michael Niermann *(Dortmund): Reelle Punkte und reelle Radikale binomialer Ideale*
Vladimir Gerdt *(Dubna): Involutive Bases in Commutative and Differential Algebra (Übersichtsvortrag)*
Beate Thielcke *(Rostock): Grad–Vier–Identitäten auf alternativen Algebren*
Anton Betten *(Bayreuth): Paralleles Rechnen in der Kombinatorik*
Clemens Wagner *(Essen): Ein neuer polynomialer Algorithmus zum Berechnen der Hermite-Normalform von Matrizen über Polynomringen*

Michael Pohst (Berlin)

10. DISCO '96 – International Symposium on Design and Implementation of Symbolic Computation Systems

Karlsruhe, 18.–20.9.1996

Das vierte internationale Symposium DISCO (International Symposium on Design and Implementation of Symbolic Computation Systems) fand vom 18.-20. September 1996 an der Universität Karlsruhe unter der Leitung von Jacques Calmet (conference chair), Luigia Carlucci Aiello (program chair) und Karsten Homann (local chair) mit etwa 60 Teilnehmern statt. Neue Trends bei der Entwicklung von Systemen zum symbolischen Rechnen in Algebra, Geometrie und Beweisen wurden in Form von eingeladenen, vollen und kurzen Vorträgen sowie Demonstrationen vorgestellt, insbesondere Sprachen, Typinferenz, Integration von Beweisen und algebraischen Algorithmen, Architekturen, Schnittstellen und Systeme.

Die Beiträge sind als LNCS 1128 im Springer-Verlag mit Herausgeber Jacques Calmet und Carla Limongelli erschienen:
Problem-Oriented Applications of Automated Theorem Proving (eingeladener Vortrag), W. Bibel, D. Korn, C. Kreitz, S. Schmitt;
Σ^{IT} *– A Strongly-typed Embeddable Computer Algebra Library*, M. Bronstein;
$Disc_{Atinf}$*: a General Framework for Implementing Calculi and Strategies*, C. Bourely, N. Peltier;
Equality Elimination for the Tableau Method, A. Degtyarev, A. Voronkov;
Towards Lean Proof Checking, G. Barthe, H. Elbers;
Waldmeister: High Performance Equational Theorem Proving, A. Buch, T. Hillenbrand, R. Fettig;
A Reflective Language Based on Conditional Term Rewriting, M. Numazawa, M. Kurihara, A. Ohuchi;
Term Rewriting Systems: an h-Categorical Semantic, G. Balestreri;
Generative Geometric Modeling in a Functional Environment (eingeladener Vortrag), A. Paoluzzi;
Exploiting SML for Experimenting with Algebraic Algorithms: the Example of p-adic Lifting, W. Gehrke, C. Limongelli;
Conditional Categories and Domains, P. S. Santas;
Parameterizing Object Specifications, M. Gogolla;
Analyzing the Dynamics of a Z Specification, P. Ciancarini, C. Mascolo;
Walking Faster, B. Amrhein, O. Gloor, W. Küchlin;
Integer and Rational Arithmetic on MasPar, T. Jebelean;
Parallel 3-Primes FFT Algorithm, G. Cesari, R. Maeder;
A Master-Slave Approach to Parallel Term Rewriting on a Hierarchical Multiprocessor, R. Bündgen, M. Göbel, W. Küchlin;
Multi-Agent Cooperation – Concepts and Applications (eingeladener Vortrag), H. Haugeneder, D. Steiner;
Document-Centered Presentation of Computing Software: Compound Documents Are Better Workspaces, W. Weck;
Animating a non-executable formal specification with a distributed symbolic language, P. Ciancarini, S. Cimato;
Uniform Representation of Basic Algebraic Structures in Computer Algebra, C. Limongelli, G. Malerba, M. Temperini;
Integrating Computer Algebra with Proof Planning, M. Kerber, M. Kohlhase, V. Sorge;
Structures for Symbolic Mathematical Reasoning and Computation, K. Homann, J. Calmet;
Implementing FS_0 *in Isabelle: Adding Structure at the Metalevel*, S. Matthews;

An Approach to Class Reasoning in Symbolic Computation, G. Cioni, A. Colagrossi, M. Temperini;
An Intelligent Interface to Numerical Routines, B. J. Dupée, J. H. Davenport;
Computer Algebra and the World Wide Web (eingeladener Vortrag), A. C. Hearn;
Interfacing REDUCE to Java, A. Norman, J. Fitch;
Software Architectures for Computer Algebra: a Case Study, G. Butler;
A Deductive Database for Mathematical Formulas, S. Dalmas, M. Gaëtano, C. Huchet;
CASA - A System for Computer Aided Constructive Algebraic Geometry, M. Mňuk, F. Winkler;
Making Systems Communicate and Cooperate: the Central Control Approach, S. Dalmas, M. Gaëtano;
A Database for Number Fields, M. Daberkow, A. Weber;
Compiling Residuation for Multiparadigm Symbolic Programming Language, G. Grivas, A. Palinginis;
Pluggability Issues in the Multi Protocol, S. Gray, N. Kajler, P. S. Wang.

Karsten Homann (Karlsruhe)

11. **Workshop on Computeralgebra in connection with INFORMATIK'96**

Klagenfurt, Österreich 24.9.1996

Die gemeinsame Jahrestagung der Gesellschaft für Informatik und der Österreichischen Computer Gesellschaft enthielt 1996 erstmals einen Workshop Computeralgebra. Als eingeladener Hauptreferent hat Dr. A. M. Odlyzko unter dem Titel *Computeralgebra and Cryptography* die Kryptographie unter dem Aspekt des Beitrags der Computeralgebra beleuchtet. Hier erwies sich eine Trennung zwischen computational number theoryünd computeralgebraäls relativ willkürlich und daher eine Zuordnung sachlich schwierig. Herr Odlyzko diskutierte verschiedene Methoden wie differential cryptoanalysis, linear cryptoanalysis, RSA und wies auf die Zeitfaktoren hin, die ein allgemeines Computeralgebra System gegenüber Spezialsoftware beim Versuch, Codes zu brechen, hinnehmen mußṄatürlich stellt das Brechen eines Codes ein offenes Problem dar, so daß weitere Cryptosysteme unter diesem Gesichtspunkt vorgestellt wurden.

Herr Odlyzko war ebenfalls ein Hauptredner des Hauptprogramms der Veranstaltung am folgenden Tag. Hier verwies er auf entscheidende Durchbrüche in der Entwicklung der Computeralgebra, erläuterte aber auch, daß bei einem gigantischen Softwaresystem Fortschritte an vielen Teilen parallel erzielt werden und die erreichte Leistungssteigerung schwerlich einem Algorithmus zugeschrieben werden kann. Letztlich erfordert ein versierter Umgang mit einem Computeralgebra-System einen mathematisch gut ausgebildeten Benutzer. Hier bestehen (noch) Grenzen für den Einsatz dieser Systeme.

Der Workshop bot weiterhin eine Vielfalt weiterer Beiträge. Mathematische Themen wie Primzahltests, 7-Designs, Groebnerbasen und deren Verwendung in numerischen Problemen wurden ergänzt durch eine Darstellung von Informatikaspekten beim Entwurf von Computeralgebra-Systemen, von einem breiten Spektrum von Anwendungen von Computeralgebra-Systemen und der Beschreibung von Aspekten einer Benutzeroberfläche. Der Workshop bot somit ein interessantes Spektrum aus dem Gebiet der Computeralgebra, das in kommenden Workshops beibehalten werden sollte. Auch die Anbindung an die Informatik Jahrestagung hat sich als sehr positiv herausgestellt, da durch das kombinierte Angebot auch eine weite Anreise attraktiv wurde. Als kleiner Kritikpunkt an der ansonsten sehr guten Organisation sei nur vermerkt, daß auch kurze Vorträge mehr Zeit erhalten sollten.

Reinhard Laue (Bayreuth)

Themen und Anwendungen der Computeralgebra

Differential-Galoistheorie

Felix Ulmer

Université de Rennes 1
F-35042 Rennes Cédex
Ulmer@univ-rennes1.fr

Bei der Differential-Galoistheorie [1, 9, 10, 12, 14, 20] geht man von einem Körper k (z.B. $\mathbb{C}(x)$) und einer Derivation $\delta : k \mapsto k$ (z.B. d/dx) mit Konstantenkörper $\mathcal{C} = \{a \in k \,|\, \delta(a) = 0\}$ aus und betrachtet lineare Differentialgleichungen

$$L(y) = \delta^n(y) + a_{n-1}\delta^{n-1}(y) + \cdots + a_1\delta(y) + a_0 y = 0 \qquad (a_i \in k).$$

Wie bei der klassischen Galoistheorie wird nach Lösungen von $L(y) = 0$ in einer Differential-Körpererweiterung K des Koeffizientenkörpers k gesucht. Analog zur Frage der Lösbarkeit durch Radikale betrachtet man zum Beispiel

1. algebraische Lösungen, die in einer algebraischen Körpererweiterung von k liegen,

2. Liouvillesche Lösungen, die sich mit Elementen aus k, algebraischen Erweiterungen, der Exponentialfunktion, Integration und Kompositionen schreiben lassen.

Im Mittelpunkt des letzten Jahrhunderts stand die Berechnung der algebraischen Lösungen von $L(y) = 0$. Für Gleichungen zweiter Ordnung entstanden vollständige Algorithmen (L. Fuchs, C. Jordan, F. Klein,... siehe [3]). Die dabei notwendigen Berechnungen waren jedoch nicht per Hand durchführbar, und die Ergebnisse gerieten zum Teil in Vergessenheit. Durch die Computeralgebra kamen diese Arbeiten wieder ans Tageslicht [11, 16].

Unter geeigneten Voraussetzungen für k existiert zu jeder linearen Differentialgleichung $L(y) = 0$ über k ein Differential-Zerfällungskörper K (sog. Picard-Vessiot-Erweiterung), in dem n über $\mathcal{C}$ linear unabhängige Lösungen von $L(y) = 0$ enthalten sind. Die Differential-Galoisgruppe $\mathcal{G}(L)$ besteht aus den K/k-Körperautomorphismen, die mit der Derivation δ vertauschbar sind. Die Elemente aus $\mathcal{G}(L)$ bilden Lösungen auf Lösungen ab, was die im folgenden betrachtete treue Darstellung $\mathcal{G}(L) \subseteq GL(n, \mathcal{C})$ liefert. Die Gruppe $\mathcal{G}(L)$ ist eine lineare algebraische Gruppe, in der sich die Eigenschaften von $L(y) = 0$ wiederspiegeln:

1. $L(y) = 0$ ist reduzibel, d.h. faktorisiert als Differentialoperator $\Leftrightarrow$
die Darstellung $\mathcal{G}(L) \subseteq GL(n, \mathcal{C})$ ist reduzibel,
2. alle Lösungen von $L(y) = 0$ sind algebraisch über k $\Leftrightarrow$
$\mathcal{G}(L)$ ist eine endliche Gruppe.
3. alle Lösungen von $L(y) = 0$ sind Liouvillesche Funktionen über k $\Leftrightarrow$
die Komponente der Eins $\mathcal{G}(L)^\circ$ ist auflösbar.

Beispiel: *Die Gleichung* $L(y) = y'' + \dfrac{3}{16x^2}y = 0$ *hat zwei algebraische Lösungen* $y_1 = x^{\frac{1}{4}}$ *und* $y_2 = x^{\frac{3}{4}}$. *Die Differential-Galoisgruppe* $\mathcal{G}(L) \subseteq GL(2, \mathbb{C})$ *ist zyklisch der Ordnung* 4 *und wird erzeugt durch:*

$$\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}.$$

Da diese Gruppe reduzibel ist, gibt es eine Faktorisierung

$$L(y) = \left(\frac{d}{dx} + \frac{1}{4x}\right)\left(\left(\frac{d}{dx} - \frac{1}{4x}\right)(y)\right).$$

Zu den algorithmischen Fragestellungen, die zur Zeit untersucht werden, gehören u.a.:

1. die Faktorisierung eines Differentialoperators - hier gibt es einen allgemeinen Algorithmus, der jedoch für Ordnungen ≥ 4 nicht mehr praktikabel ist - [7, 15, 21],
2. die Berechnung der Differential-Galoisgruppe - hier gibt es z.Z. keinen allgemeinen Algorithmus - [1, 5, 6, 14, 22],
3. die Berechnung der rationalen, algebraischen und Liouvilleschen Lösungen von $L(y) = 0$ [2, 11, 16, 17, 23, 24, 25, 26],
4. die Berechnung (des Ideals) der Relationen zwischen den Lösungen von $L(y) = 0$ und deren Ableitungen [4, 18],
5. die Konstruktion von linearen Differentialgleichungen mit vorgegebener Differential-Galoisgruppe [6, 8, 22] - neue Ergebnisse zum Umkehrproblem findet man in [13].

Die Algorithmen [2, 11, 26] stehen in Maple zur Verfügung. Eine Version von [7] kann bei dem Autor erfragt werden.

Die Literatur ist nicht vollständig, es wurde versucht, auf neuere Arbeiten hinzuweisen. In den Übersichtsarbeiten [1, 20, 19] wird auf einige aktuelle Probleme hingewiesen.

Literatur

[1] Bertrand, D., (Reviewer), Lectures on Differential Galois Theory by Andy R. Magid. *Bull. of the Amer. Math. Soc.* **33**, (1996), 289–294.

[2] Bronstein, M., Solutions of linear differential equations in their coefficient field. *J. Symb. Comp.* **13**, (1992), 413–439.

[3] Boulanger, A., Contribution á l'étude des équation différentielles linéaires homogènes intégrable algébriquement, *J. École Polytechnique, série 2.* **4** (1898)

[4] Compoint, E., Généralisation d'un Théorème de Fano et Singer *C.R.A.S, série I*, **318** (1994)

[5] Duval, A., Loday-Richaud, M., Kovacic's algorithm and its application to some families of special functions. *J. of Appl. Alg. in Eng. Comm. and Comp.* **3**, (1992), 211–246.

[6] Hendriks, P., van der Put, M., Galois action on solutions of linear differential equations, *J. Symb. Comp.* **19**, (1995) 559-576.

[7] van Hoeij, M., Rational Solution of the mixed Differential Equation and its Application to the Factorization of Differential Operators, *ISSAC'96 Proceedings, ACM Press* (1996).

[8] Hurwitz, A., Ueber einige besondere homogene lineare Differentialgleichungen, *Math. Ann.*, **26** (1886)

[9] Kaplansky, I., *An introduction to differential algebra.* Second edition, Paris: Hermann (1976).

[10] Kolchin, E. R., Algebraic matrix groups and the Picard-Vessiot theory of homogeneous linear ordinary differential equations., *Annals of Math.* **49** (1948) 1–42.

[11] Kovacic, J., An algorithm for solving second order linear homogeneous differential equations. *J. Symb. Comp.* **2**, (1986) 3-43.

[12] Magid, A., *Lectures on Differential Galois Theorie.* University Lectures Series **7**, Amer. Math. Soc., Providence, RI (1994)

[13] Mitschi, C., Singer, M.F., Connected linear groups as differential Galois groups, *J. of Algebra*, **184** (1996) 333–361.

[14] Ramis, J.P., Martinet, J., Théorie de Galois Différentielle et Resommation In *Computer Algebra and Differential Equations*, Ed: E. Tournier, New York: Academic Press (1990).

[15] Schlesinger, L., *Handbuch der Theorie der linearen Differentialgleichungen*, Leipzig: Teubner 1895

[16] Singer, M.F., Algebraic solutions of n^{th} order linear differential equations. *Proceedings of the 1979 Queens Conference on Number Theory, Queens Papers in Pure and Applied Mathematics* **54**, (1979).

[17] Singer, M.F., Liouvillian solutions of n^{th} order homogeneous linear differential equations. *Amer. J. Math.* **103** (1981) 661–682.

[18] Singer, M.F., Algebraic relations among solutions of linear differential equations: Fano's theorem, *Amer. J. of Math.* **110** (1988) 115–143.

[19] Singer, M.F., Formal solutions of differential equations, *J. Symb. Comp.* **10** (1990) 54–94.

[20] Singer, M.F., An outline of differential Galois theory. In *Computer Algebra and Differential Equations*, Ed: E. Tournier, New York: Academic Press (1990).

[21] Singer, M.F., Testing reducibility of linear differential operators: a group theoretic perspective, *Appl. Alg. in Eng. Comm. and Comp.* **7** (1996) 77–104.

[22] Singer, M.F., Ulmer, F., Galois groups of second and third order linear differential equations, *J. Symb. Comp.* **16** (1993) 1–36.

[23] Singer, M.F., Ulmer, F., Liouvillian and algebraic solutions of second and third order linear differential equations. *J. Symb. Comp.* **16**, (1993) 37–73.

[24] Singer, M.F., Ulmer, F., Linear Differential Equations and Products of Linear Forms. *Preprint presented at MEGA'96, Eindhoven*, June 1996.

[25] Ulmer, F., On liouvillian solutions of differential equations, *Appl. Alg. in Eng. Comm. and Comp.*, **2** (1992) 171–193.

[26] Ulmer, F., Weil, J.A., Note on Kovacic's algorithm, (Preprint Université de Rennes 1, 1995), *to appear in J. Symb. Comp.*

Ein Anwendungsgebiet der Computeralgebra in der Industrie: Molekulare Strukturerkennung

C. Benecke, A. Kerber, R. Laue, T. Wieland[1]

Lehrstuhl II für Mathematik
Universität Bayreuth, 95440 Bayreuth
Tel. 0921/55-3388, Fax: 0921/55-3385
E-Mail: `molgen@btm2x2.mat.uni-bayreuth.de`
WWW: `http://btm2xd.mat.uni-bayreuth.de/`

Einführung

Tägliche Arbeit von Chemikern in Labors der Chemischen Analytik ist die Identifizierung chemischer Substanzen anhand von zumeist spektroskopischen Daten, die sogenannte *Molekulare Strukturerkennung.* Genauer handelt es sich dabei um die Ermittlung eines *mathematischen Modells* für das Molekül der vorliegenden chemischen Substanz.

Aufgrund des Charakters der Problemstellung sind algebraische Methoden am besten dazu geeignet, Lösungen zu berechnen. Aus dem weiten Bereich der Algebra werden hier besonders Operationen endlicher Gruppen verwendet. Dies erfordert die Anpassung und Neuentwicklung gruppentheoretischer Algorithmen für diesen Zweck und führt zu einem eigenständigen Computeralgebrasystem [1]. Diesem kommt die Aufgabe zu, alle mathematischen Modelle der gesuchten chemischen Verbindungen (innerhalb einer gegebenen Abstraktionsstufe) effizient, vollständig und redundanzfrei zu berechnen.

Für chemische Moleküle kennt man mehrere *Abstraktionsmodelle.* Von der mathematischen Chemie werden — entsprechend dem gegenwärtigen Stand von Theorie und Praxis — insbesondere die folgenden Abstraktionsstufen behandelt:

I) Die erste Abstraktionsstufe ist die **chemische Formel**, oder auch Summen- bzw. Bruttoformel, beispielsweise C_6H_6 für das Benzol.

II) Die zweite Abstraktionsstufe ist die **Strukturformel** oder **Konstitutionsformel**. Hiervon gibt es 217 verschiedene zu der Summenformel C_6H_6; diese nennt man auch die *Bindungsisomere* des Benzols. Die Tatsache, daß es zu einer chemischen Formel mehrere (u.U. sehr viele) Strukturformeln geben kann, nennt man *chemische Isomerie.* Die Bindungsisomere zu einer Summenformel sind alle zusammenhängenden Multigraphen mit der Eckengradfolge, die sich aus der Summenformel ergibt und deren Knoten mit Atomnamen auf alle wesentlich verschiedenen Weisen gefärbt sind. Für das Benzol ist diese Eckengradfolge $(4^6, 1^6)$, weil diese Isomere aus genau 6 C-Atomen der Valenz 4 und 6 H-Atomen der Valenz 1 bestehen.

---

[1] Gefördert durch das BMBF unter 03-KE7BAY-9

III) Die dritte Abstraktionsstufe heißt **Konfiguration**. Sie berücksichtigt die wesentlich verschiedenen räumlichen Anordnungen (oft als Stereoisomere bezeichnet), beschrieben durch die räumlichen Valenzwinkel und deren relativen Anordnungssinn. Hiervon gibt es zu den genannten 217 Konstitutionsformeln insgesamt 958 verschiedene. Auch hier greifen algebraische Konzepte, denn diese Konfigurationen lassen sich als Bahnen der Operation der entsprechenden Symmetriegruppe auf der Menge der Abbildungen $\{f \mid f : \{1, \ldots, s\} \to \{0, 1\}\}$ bei s Stereozentren beschreiben.

IV) Die nächste Verfeinerung sind **Konformationen**. Darunter versteht man alle energetisch verschiedenen räumlichen Anordnungen eines Moleküls. Diese sind nicht notwendig diskret. Die Zahl wesentlich verschiedener Konformationen ist aber unter bestimmten Bedingungen (etwa in Ringen) endlich.

Mit einer Mischung verschiedener Methoden aus Gruppentheorie, Kombinatorik, Informatik und Graphentheorie ist es gelungen, leistungsstarke Computerprogramme zur vollständigen und redundanzfreien Berechnung aller Konstitutions- und aller Konfigurationsisomere und zur diskreten Klassifizierung von Konformationen zu entwickeln. Besonderes Gewicht wurde dabei darauf gelegt, die teilweise vorhandenen enumerativen und deskriptiven Ansätze für die Berechnung diskreter Strukturen im Hinblick auf die Konstruktion weiterzuentwicklen und zu verfeinern.

Zentrale Methoden

Der zweite Konstruktionsschritt im Rahmen der Molekularen Strukturerkennung lautet:

> *Konstruiere zu einer chemischen Formel alle zusammenhängenden (ungerichteten, schleifenfreien Multi-) Graphen, die die entsprechende Eckengrad- (=Valenzen-) Folge haben, weitere Zusatzbedingungen erfüllen (wie etwa eine Hydroxylgruppe -OH enthalten, wenn es sich um Alkohole handeln soll), und zusätzlich noch hierzu alle Färbungen der Punkte dieser Graphen mit den richtigen Atomnamen.*

Daß dies kein einfaches Problem ist, zeigt schon die folgende Tabelle, die einige Anzahlen samt Rechenzeiten in Sekunden (auf einem PC mit 486DX2-66) angibt:

n	2	4	6	8	10	12	14
$C_{13}H_n$	30506207 4847.9	148275813 19227.6	334873300 39335.6	453919133 53611.8	418109851 49267.9	281002301 35953.9	143947825 19821.5
$C_{12}H_nO$	81761287 10743.3	381610134 44611.3	822502728 92369.2	1057972641 116932.9	918595609 108607.3	576961766 71904.8	273057137 38619.6
$C_8H_nN_2$	896748 92.4	3272676 335.5	5625815 596.5	5767073 649.9	3928605 479.8	1874516 247.7	637380 93.8

Um molekulare Graphen und andere Inzidenzstrukturen zu erzeugen, werden einige allgemeine Methoden verwendet, die wir hier kurz skizzieren wollen.

Zunächst sollte sich der Leser bewußt sein, daß Graphen *unnumerierte* Inzidenzstrukturen sind. Bei der Behandlung mit elektronischen Rechnern ergibt sich dabei das Problem, daß Computer nur numerierte Strukturen handhaben können, und so werden Graphen als (die obere Hälfte von) Adjazenzmatrizen dargestellt, wobei die Zeilen den Punkten entsprechen. Da aber Zeilen und Punkte wiederum numeriert sind, müssen wir die Operation der symmetrischen Gruppe auf den Zeilen und Spalten betrachten, um die Numerierung zu überwinden, und von jeder Bahn einen Repräsentanten zu wählen. Dieses Problem ist natürlich äquivalent zum Isomorphieproblem. Eine Kombination u.a. der folgenden Methoden hat sich als effektiv erwiesen (s.a. [8, 9, 10]):

- Kanonische Formen der Adjazenzmatrizen werden verwendet. Jede Bahn enthält einen eindeutigen Repräsentanten, der zeilenweise gelesen lexikographisch maximal ist. Daher ist ein möglichst effizienter *Kanonizitätstest* entscheidend für die Laufzeit des Algorithmus. Er erlaubt, in vielen Fällen Isomorphietests zu vermeiden.
- Zudem ist es sehr wichtig, die Erzeugung so früh wie möglich abzuschneiden, d.h., sobald Graphen konstruiert werden, die sich nicht zu Graphen der gewünschten Form erweitern lassen. Eine dafür hilfreiche Methode ist die *ordnungstreue Erzeugung*, die von R. C. Read in [11] und I.A. Faradzhev [12] eingeführt wurde und die entsprechend zu verfeinern ist [8, 13, 14].
- Die ordnungstreue Erzeugung wird kombiniert mit einer schrittweisen Verfeinerung, die sich algebraisch mit Homomorphismen beschreiben läßt [10].
- Da die auftretenden Permutationsgruppen u.U. sehr groß werden können, ist es notwendig, eine sparsame Speicherung im Computer zu verwenden. Die bei uns zum Einsatz kommende Methode der *markierten Verzweigungen* [15] kommt dabei stets mit maximal $2n$ Permutationen aus, wobei n der Grad der Permutationsgruppe sei.
- Eine kanonische Form der Ergebnisse, also z.B. eine kanonische Numerierung der molekularen Graphen, erlaubt es, diese mit *Hash-Verfahren* zu speichern, was die Zahl der notwendigen Test weiter drastisch reduziert. So muß bei Kandidatenmengen nicht jedes Element mit jedem anderen auf Isomorphie verglichen werden, sondern es genügen einfache Vergleiche, die auch nur bei identischem Hash-Wert durchzuführen sind.

Strukturgenerierung

Im zweiten Schritt der Molekularen Strukturerkennung werden also in der Regel alle (mathematisch) möglichen Bindungsisomere zu einer gegebenen Summenformel mit Nebenbedingungen berechnet. Man führt diesen zweiten Konstruktionsschritt bei der Molekularen Strukturerkennung durch, indem man möglichst schnell und redundanzfrei die vollständige Vielfalt aller zu den (graphischen, etwa aus spektroskopischen Daten gewonnenen) Ausgangsdaten passenden Bindungsisomere bereitstellt.

Für die Nebenbedingungen werden — bei den leistungsfähigen Generatoren — drei Listen von Substrukturen verwendet: *Makroatome, Goodlist und Badlist*. Darüber hinaus sind weitere Restriktionen wie eine permanente Badlist, Ringbeschränkungen, max. Bindungsgrad möglich, um die Menge der resultierenden Isomere weiter zu reduzieren.

- **Makroatome** erlauben die effektivsten Einschränkungen. Diese Substrukturen werden wie ein einzelnes Atom behandelt und können so die Anzahl der möglichen Strukturen drastisch verringern.
- **Goodliststrukturen** müssen in der Ergebnisverbindung vorkommen. Sie dürfen sich überlappen und werden daher auch erst nach der Generierung überprüft.
- **Badliststrukturen** dürfen nicht vorkommen, können sich aber ebenfalls überlappen und werden daher auch erst im Anschluß an die Erzeugung einer Verbindung getestet.

Ein Beispiel seien die die 22 Bindungsisomere des Dioxin, also die Bindungsisomere zur chemischen Formel $C_{12}O_2H_4Cl_4$ mit der vorgeschriebenen Substruktur:

An diesem Beispiel können wir eine der benutzten *gruppentheoretischen Methoden* gut illustrieren und zeigen, wie diese zur wesentlichen Verminderung der Komplexität beitragen können. Es handelt sich dabei nämlich um sogenannte *Permutationsisomere,* die schon E. Ruch und Mitarbeiter in Zusammenhang mit Doppelnebenklassen gebracht haben ([16, 17]). Wir verwenden das Dioxinskelett als Makroatom und lassen den Generator die Anzahl der zusammenhängenden Graphen berechnen, die aus dem Makroatom • und 4 Wasserstoffen sowie 4 Chloratomen bestehen. Hierzu gibt es natürlich genau einen Graphen:

Wenn wir jetzt den zentralen Knoten dieses Graphen zum Dioxinskelett „aufblasen", dann besteht das Problem darin, die acht freien Valenzen des Dioxinskeletts mit den acht Kanten des sternförmigen Graphen dergestalt zu identifizieren, daß nur die wesentlich verschiedenen unter diesen Identifizierungen auftreten, aber auch jede einmal vorkommt. Man kann zeigen, daß diese Identifizierungen zu einer Transversale der Menge

$$V_4 \backslash S_8 / S_4 \times S_4$$

(V_4 die Kleinsche Vierergruppe, auf den acht freien Valenzen, S_8 die symmetrische Gruppe hierauf, $S_4 \times S_4$ das direkte Produkt der symmetrischen Gruppen auf den H- bzw. auf den Cl-Atomen) von Doppelnebenklassen bijektiv ist. Die 22 Isomere des Dioxin mit obiger Substruktur kann man deshalb aus einer Transversale dieser Menge von Doppelnebenklassen erhalten.

Diese Methode der Verwendung der Makroatome als Knoten mit nachfolgendem „Aufblasen" hat sich als sehr zweckmäßig erwiesen, denn mit ihrer Hilfe läßt sich die Graphengenerierung auf wesentlich kleinere Graphen beschränken und damit stark beschleunigen.

Die Ergebnisse lassen sich ausdrucken als auch in das weitverbreitete MolFile-Format zur Weiterverarbeitung mit anderer Chemiesoftware exportieren.

Zusätzliche Möglichkeiten, die beispielsweise der Generator MOLGEN ([1]- [8]) bietet, sind das Herausfiltern aromatischer Doubletten, die Bearbeitung mit dem eingebauten Struktureditor zur interaktiven Beschränkung des Lösungsraums und die Berechnung **räumlicher Plazierungen** nach [18].

Ausgehend einzig von den Bindungsverhältnissen ist man hier auch in der Lage, weitere räumliche Eigenschaften, nämliche alle **Konfigurationsisomere** zu berechnen [6, 19, 21]. Dabei werden alle wichtigen Effekte berücksichtigt: Asymmetrische vierwertige Atome (auch in Ringen), *cis/trans*-Isomerie an Doppelbindungen, Spirane sowie chirale und diastereomere Allene. Mathematisch gesehen handelt es sich dabei wieder um eine Gruppenoperation, nämlich der sog. *Konfigurationssymmetriegruppe* $C(\gamma, \beta)$. Diese ist eine Erweiterung der topologischen Automorphismengruppe $A(\gamma, \beta)$ des (numerierten) Multigraphen γ mit der Atombeschriftung β. Um die Liganden eines Stereozentrums als geordnete Tupel schreiben zu können, wird die Umgebung des Zentrums als lokal im Raum plaziert gedacht. Dadurch lassen sich die Auswirkungen der Anwendung eines Graphenautomorphismus π auf die Konfiguration in Abhängigkeit vom Signum von π, eingeschränkt auf die Liganden des jeweiligen Zentrums i, beschreiben als eine Abbildung ϵ_π mit $\epsilon_\pi(i) = id$ bzw. $\epsilon_\pi(i) = (01)$. Damit wird die Symmetrie der Konfiguration ausgedrückt durch:

$$C(\gamma, \beta) := \{(\epsilon_\pi; \pi) \,|\, \pi \in A(\gamma, \beta)\} \leq S_2 \wr A(\gamma, \beta)$$

Abbildung 1: Räumliche Realisationen der vier Stereoisomere des 1,2,3,4-Tetramethylcyclobutan

Die wesentlich verschiedenen Konfigurationsisomere sind dann die Bahnen von $C(\gamma, \beta)$ auf der Menge der Abbildungen

$$\{f \mid f : \{1, \ldots, s\} \to \{0, 1\}\}$$

bei s Stereozentren.

Zu allen Konfigurationsisomeren werden anschließend räumliche Plazierungen geometrisch durch Spiegelungen der Referenzplazierung ermittelt [20] (s. Abb. 1).

Strukturgeneratoren in gekoppelten Anwendungen

Ein Strukturgenerator kann auf vielfache Weise eingesetzt werden. Neben der Lehre [2, 5, 22] und dem Stand-alone-Betrieb liegt eine Hauptanwendung im Einbau in Spektren-Interpretations- und Datenbanksysteme wie etwa SpecInfo,[2] in dem ein solcher Generator einen wesentlichen Baustein darstellt:

Die Vorgehensweise ist dabei folgende: Zunächst wird das Spektrum (Infrarot-, UV oder ^{13}C-NMR-Spektrum) der Verbindung, die aufzuklären ist, experimentell ermittelt. Eine anschließende Suche in der Datenbank liefert dann eine Menge von Substrukturen (und evtl. weiteren Restriktionen), die als Ausgangspunkt der Generierung mittels Strukturgenerator dienen. Die erzeugten Isomere werden nun durch Berechnung künstlicher Spektren bewertet, d.h. auf die Güte der Übereinstimmung mit den Meßdaten untersucht, und schließlich dem Benutzer des Systems ausgegeben. Er kann aber auch interaktiv in diesen Prozeß eingreifen und so zusätzliche, zuweilen implizite, Informationen einbringen. Durch die *Kombination von Datenbank und Strukturgenerator* konnte SpecInfo zu einem **Automatischen Strukturaufklärungssystem** ausgebaut werden.

Kombinatorische Chemie

Bei aller Effektivität haftet solchen Generatoren aber ein konzeptionelles Problem an: Zur Generierung wird stets die Bruttoformel verwendet. Bei vielen Problemstellungen ist dies aber unerwünscht, da oft die Bruttoformel unbekannt bzw. nur mit hohem experimentellen Aufwand zu ermitteln ist oder auch Moleküle mit verschiedenen Summenformel gleichzeitig als Lösung zugelassen werden sollen. Daher besteht eines unserer künftigen Vorhaben darin, Moleküle iterativ aus Fragmenten zu konstruieren, und zwar wie gewohnt vollständig und redundanzfrei, bei hoher Effektivität. Dazu sollen die Fragmente

[2] SpecInfo ist ein Produkt von *Chemical Concepts* GmbH, Boschstr. 12, D-69469 Weinheim.

zum einen über freie Valenzen verknüpft, zum anderen aber auch **über alle möglichen gemeinsamen Teilstrukturen verschmolzen** werden.

Diese Verfahren können auf eine Reihe von Aufgabenstellungen der mathematischen Chemie angewendet werden. In der **kombinatorischen Chemie**, wo die Produkte einer großen Zahl von Reaktionen auf ihre physiochemische Wirkung untersucht werden, wird dadurch ein systematischer Überblick über diese Produkte ermöglicht [24]. Im Bereich des **drug design** könnten bestehende heuristische Verfahren verbessert und beschleunigt werden [25]. Die dabei benutzten mathematischen Methoden stammen wie vorher aus dem Bereich der Computeralgebra; es sind u.a. *ordnungstreue Erzeugung* und *Doppelnebenklassenalgorithmen* [10] sowie *Cliquensuche* [26].

Literatur

[1] C. Benecke, R. Grund, R. Hohberger, A. Kerber, R. Laue und T. Wieland. MOLGEN, a Computer Algebra System for the Generation of Molecular Graphs. In J. Fleischer, J. Grabmeier, F.W. Hehl und W. Küchlin, Hrsg., *Computer Algebra in Science and Engineering*, S. 260–272. World Scientific, Singapore, 1995.

[2] C. Benecke, R. Grund, A. Kerber, R. Laue und T. Wieland. Chemical Education via MOLGEN. *J. Chem. Edu.*, **72**, S. 403–406, 1995.

[3] C. Benecke, R. Grund, R. Hohberger, A. Kerber, R. Laue und T. Wieland. MOLGEN+, a generator of connectivity isomers and stereoisomers for molecular structure elucidation. *Anal. Chim. Act.*, **314**, S. 141–147, 1995.

[4] C. Benecke, R Grund, R. Hohberger, A. Kerber, R. Laue und T. Wieland. Chemical Isomerism, a Challenge for Algebraic Combinatorics and for Computer Science. In C. Cohen, M. Giusti und T. Mora, Hrsg., *Applied Algebra, Algebraic Algorithms and Error-Correcting Codes*, New York, 1995. Lect. Not. Comput. Sci., Springer.

[5] C. Benecke, R. Grund, R. Hohberger, A. Kerber, R. Laue und T. Wieland. Die Veranschaulichung von Molekülen im Chemieunterricht mit Hilfe des Programmsystems MOLGEN$^+$. *MNU - Der mathm.-naturw. Unterr.*, **48**, S. 156–163, 1995.

[6] Wieland, T., A. Kerber, and R. Laue. Principles of the generation of constitutional and configurational isomers. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **1996**, 36, 413–419.

[7] A. Kerber, R. Laue und T. Wieland. Erkennung, Beschreibung und Visualisierung molekularer Strukturen. In *Proceedings Des Statusseminars der Anwendungsorientierten Verbundprojekte Auf Dem Gebiet der Mathematik Mit Förderung Durch Das BMBF*. Springer Verlag, 1996. (Eingereicht).

[8] R. Grund. Konstruktion molekularer Graphen mit gegebenen Hybridisierungen und überlappungsfreien Fragmenten. *Bayreuther Mathem. Schr.*, **49**, S. 1–113, 1995.

[9] A. Kerber. *Algebraic Combinatorics Via Finite Group Actions*. BI-Wissenschaftsverlag, Mannheim, Wien, Zürich, 1991.

[10] R. Laue. Construction of combinatorial objects – a tutorial. *Bayr. Mathem. Schr.*, **43**, S. 53–96, 1993.

[11] R.C. Read. Every-one a winner. *Ann. Discr. Math.*, **2**, S. 107–120, 1978.

[12] I.A. Faradzhev. Генерирование неизоморфных графов с заданным распределением степенеи вершин (Erzeugung nichtisomorpher Graphen mit gegebener Eckengradpartition). In I.A. Faradzhev, Hrsg., Алгоритмические Исследования в Комбинаторике (*Algorithmische Studien in Kombinatorik*), S. 11–19. Nauka, Moskau, 1978. (In Russisch).

[13] S.G. Molodtsov. Computer-aided generation of molecular graphs. *MATCH*, **30**, S. 213–224, 1994.

[14] Grüner, T., R. Laue und M. Meringer. Applications for group actions applied to graph generation. In Finkelstein, L. und C. Kantor, Hrsg., *DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science*, Providence, RI, 1995.

[15] M. Jerrum. A compact representation for permutation groups. *J. Alg.*, **7**, S. 60–78, 1986.

[16] E. Ruch, W. Hässelbarth und B. Richter. Doppelnebenklassen als Klassenbegriff und Nomenklaturprinzip für Isomere und ihre Abzählung. *Theor. Chim. Acta*, **19**, S. 288–300, 1970.

[17] E. Ruch und D.J. Klein. Double Cosets in Chemistry and Physics. *Theoret. chim. Acta (Berl.)*, **63**, S. 447–472, 1983.

[18] N.L. Allinger. MM2. A Hydrocarbon Force Field Utilizing V_1 and V_2 Torsional Terms. *J. Am. Chem. Soc.*, **99**, S. 8127–8134, 1977.

[19] J.G. Nourse, D.H. Smith, R.E. Carhart und C. Djerassi. Exhaustive Generation of Stereoisomers for Structure Elucidation. *J. Am. Chem. Soc.*, **101**, S. 1216–1223, 1979.

[20] T. Wieland. Computerunterstützte Berechnung von Stereoisomeren. Diplomarbeit, Universität Bayreuth, 1994.

[21] T. Wieland. Enumeration, generation, and construction of stereoisomers of high-valence stereocenters. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **35**, S. 220–225, 1995.

[22] C. Benecke, R. Grund, A. Kerber, R. Laue und T. Wieland. Lernen, Lehren und Forschen mit MOLGEN$^+$. *Naturw. im Unterr. - Chemie*, **5**, S. 47–50, 1994.

[23] A. Kerber und T. Wieland, Hrsg. *Standardisierung anwendungsorientierter Software, Prinzipien maschinenunabängiger Programmierung und Werkzeuge für die Entwicklung plattformunabhängiger graphischer Oberflächen*. BMBF Workshop, 1995.

[24] T. Wieland. Mathematical Simulations in Combinatorial Chemistry. *MATCH*, **34**, 1996. (Im Druck).

[25] T. Wieland. The Use of Structure Generators in Predictive Pharmacology and Toxicology. *Arzneim.-Forsch./Drug Res.*, **46 (I)**, S. 223–227, 1996.

[26] Levi, G. A note on the derivation of the maximal common subgraphs of two directed or undirected graphs. *Calcolo*, **9**, S. 341–352, 1972.

KASH 1.7

KASH ist die Benutzeroberfläche des Computeralgebra–Sytems KANT, welches an der Technischen Universität Berlin unter der Leitung von Prof. Dr. M. Pohst entwickelt wird. KANT ist ausgerichtet auf die Lösung mathematischer Probleme aus dem Gebiet der algebraischen Zahlentheorie:

- Arithmetik von algebraischen Zahlen und Idealen in Absolut– und Relativerweiterungen
- Faktorisierung von algebraischen Zahlen, Polynomen und Idealen
- Berechnung von Zahlkörperinvarianten (Ganzheitsbasis, Grundeinheiten, Klassengruppe, Galoisgruppe)
- Lösen von Normgleichungen in Absolut– und Relativerweiterungen
- Erkennung und Berechnung von Teilkörpern
- Arithmetik in Gittern
- Lösen von Thue Gleichungen

Die Version 1.7 von KASH umfaßt die folgenden wesentlichen Neuerungen:

- Berechnung relativer Ganzheitsbasen mittes des Round-2 Algorithmus
- Berechnung multiplikativer Gruppen von Restklassenringen in algebraischen Zahlkörpern
- Bestimmung von Hilbertschen Klassenkörpern
- Berechnung und Reduktion von Ganzheitsbasen sowie Bestimmung von Einheitengruppen für globale Funktionenkörper
- In der Oberfläche verfügbare Schnittstelle zu einer SQL–Datenbank (Client–Server–Modell), die Tabellen mit Daten mehrerer hunderttausend Zahlkörper enthält

Via ftp is KASH kostenlos verfügbar für HP 7000 (HP-UX 9.01), IBM RS 6000 (AIX 3.2.5), Intel 486 (MS DOS 5.0, Linux), Silicon Graphics (IRIX 5.3) und Sun SPARC (SunOS 4.1.3, SunOS 5.4).

Kontaktadresse
The Kant Group, Technische Universität Berlin, Sekretariat MA 8–1, Fachbereich 3 Mathematik, Straße des 17. Juni 136, 10623 Berlin
email: `kant@math.tu-berlin.de`
www: `http://www.math.tu-berlin.de/algebra/`
ftp: `ftp.math.tu-berlin.de`

M. Pohst / K. Wildanger (Berlin)

Berichte über Arbeitsgruppen

Symbolisches und numerisches Rechnen an der Universität Dortmund

Die Dortmunder Arbeitsgruppe für symbolisches und numerisches Rechnen unter der Leitung von Professor Dr. H. Michael Möller (Lehrgebiet Angewandte Mathematik/Numerik) besteht seit Beginn des Sommersemesters 1996; ständiger Mitarbeiter ist seitdem Dipl.-Math. R. Tenberg. Hinzu kommen z. Zt. zwei Diplomanden und ein Mitarbeiter im Rahmen des EU-Projekts "FRISCO" (framework for integrating symbolic and numerical computations). Im Arbeitsgebiet beschäftigen wir uns mit der Untersuchung und Entwicklung von symbolischen und numerischen Algorithmen für Polynome einer und mehrerer Variabler. Schwerpunkte bilden Methoden zur Lösung von algebraischen Gleichungssystemen, insbesondere solche, die Gröbnerbasen oder involutive Basen benutzen, sowie die Untersuchung von singulären Nullstellen. Hierzu gehört sowohl die theoretische Entwicklung und Untersuchung von Algorithmen auf Stabilität und Komplexität als auch die Implementierung von Algorithmen in ComputeralgebraSystemen.
Einige spezifische Arbeitsprojekte sind

- Hermite-Interpolation in mehreren Variablen,
- Bestimmung der Vielfachheit der Lösung algebraischer Systeme,
- Nullstellenisolierung von univariaten Polynomen,
- Beschleunigung der Berechnung involutiver Basen.

Es besteht eine enge Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Professor Dr. E. Becker (Dortmund) LS VI (Algebra), Universität Dortmund, e-mail: `becker@emmy.mathematik.uni-dortmund.de`, FAX: (0)231-755-5307 , mit dem Themenschwerpunkt: *Algorithmen der reellen algebraischen Geometrie.* unter dem zur Zeit die folgenden Teilfragen bearbeitet werden:

- Reelles Radikal und Stellensätze: Algorithmen und Komplexität
- Radikale binomialer Ideale
- Positivität von Polynomen auf semialgebraischen Mengen
- Algorithmen für null-dimensionale Gleichungssysteme Algorithmische algebraische Geometrie über beliebigen Körpern

H. Michael Möller (Dortmund)

Publikationen über Computeralgebra

- Baumann, G., *Mathematica in Theoretical Physics*, Springer Verlag, ISBN 0-387-94424-9, 1996, pp. 348, DM 88,-.
- Beutelsbacher, A., *In Mathe war ich immer schlecht ...*, Vieweg Verlagsges., ISBN 3-528-06783-7, 1996, pp. XII + 147 , DM 28,-.
- Bronstein, M., *Symbolic Integration I*, Springer Verlag, ISBN 3-540-60521-5, 1996, pp. approx. 250, DM 78,-,
- Burkhardt, W., *Erste Schritte mit Maple, 2. korr. u. erw. Aufl.* , Springer Verlag, ISBN 3-540-60880-X, 1996,pp. 143 , DM 36,-.
- Gaylord, R., Kamin, S., Wellin, P., *Introduction to Programming with Mathematica (R)*, Springer Verlag, ISBN 0-387-94434-6, 1996, DM 72,-.

  Das Buch wird in diesem Rundbrief auf Seite 28 besprochen.

- Herzberger, J., Hrsg., *Wissenschaftliches Rechnen, Eine Einführung in das Scientific Computing*, Akademie Verlag , ISBN 3-05-501680-7, 1995, pp. 321.

  Das Buch wird in diesem Rundbrief auf Seite 29 besprochen.

- Heugl, H., Klinger, W., Lechner, J., *Mathematikunterricht mit Computeralgebra-Systemen*, Addison-Wesley, ISBN 3-8273-1082-2, 1996, pp. 312, DM 59,90,

- Hörhager, M., *Maple in Technik und Wissenschaft*, Addison-Wesley, ISBN 3-89319-929-2, 1996, pp. 452, DM 69,90 .

- Pfalzgraf, J., Wang, D., *Automated Practical Reasoning*, Springer Verlag, 1996, oeS 686,-, DM 98,-, US $ 59.00

- Smith, E., *Elementare Berechenbarkeitstheorie*, Springer Verlag, ISBN 3-540-60667-X, 1996, pp. X+166, DM 28,-.

- Werner, W., *Mathematik lernen mit Maple*, dpunkt Verlag, ISBN 3-920993-43-8, 1996, pp. ca 400, ca DM 59,00.

- Winkler F., *Polynomial Algorithms in Computer Algebra*, Springer Verlag, ISBN 3-211-82759-5, pp. 270+viii, 1996, oeS 625,-, DM 89,-, US $ 69.00

Besprechungen zu Büchern der Computeralgebra

• Burkhardt, W., Erste Schritte mit Mathematica, 2. überarb. u. erw. Aufl.

Verlag Springer: Berlin - Heidelberg - New York - London - Paris - Tokyo - Hong Kong, ISBN 3-540-60744-7, 1996, 119 Seiten.

Beim „Büchlein“ *Erste Schritte mit Mathematica, 2. überarb. u. erw. Aufl.* handelt es sich im wesentlichen um eine sehr kompakte Zusammenfassung des *Mathematica* beiliegenden Handbuches. Dies zeigt auch sofort ein Blick in das Inhaltsverzeichnis: Einführung in die Benutzung, Termumformungen, Listen, Tabellen und Funktionen, Lösen von Gleichungen, Lineare Algebra und Gleichungssysteme, Grafiken, Analysis, einfache Programme und Installation auf PC's. Genau wie im Originalhandbuch bildet eine Befehlsübersicht den Abschluß des Buches.

Zu jedem Kapitel gibt es einen Abschnitt mit Übungsbeispielen, die im Anhang gelöst werden. Wie man bedingt durch das kleine Format und die geringe Seitenanzahl vermuten kann, ist der Text (es wurden auch noch viele *Mathematica*-Zellen und Graphiken eingebunden) eher stichwortmäßig gehalten, was jedoch durchaus zur Klarheit der beschriebenen Befehle beiträgt. Manchmal wird dieser Stil aber etwas übertrieben, z.B. wenn die Gleichung $ax + b = 17$ der Reihe nach nach jeder der vorkommenden Variablen gelöst wird und unter jeder dieser 2 Zellen der Satz steht: „Hier wird die Gleichung nach x (a, b) aufgelöst.“ Ich denke, daß dieser Sachverhalt jedem *Mathematica*-User, auch einem Anfänger, hat er sich bis zum Kapitel 4 (Lösen von Gleichungen) durchgearbeitet, bei Ansicht des Befehls **Solve[a x + b == 17,x]** klar ist, ohne daß er den entsprechenden Kommentar lesen muß. Gleich im selben Kapitel beschwert sich der Autor darüber, daß *Mathematica* beim Lösen der Gleichung $11x^3 - 20x^2 - 10x + 22 = 0$ als Lösungen komplexe Zahlen mit Imaginärteilen in der Größenordnung von 10^{-17} bzw. 10^{-16} ausgibt und nicht „intelligent“ genug ist, zu erkennen, daß nur reelle Lösungen vorliegen, schlicht also darüber, daß *Mathematica* „falsch rechnet“ (Zitat!). Er übersieht dabei, daß die Werte im Rahmen der eingestellten Rechengenauigkeit vollkommen korrekt sind, wovon man sich mittels einer Probe leicht überzeugen kann:

In[1]:=
11x^3-20x^2-10x+22==0;
In[2]:=
Solve[%]
Out[2]= ...
In[3]:=
Simplify[%1/.%[[1]]]
Out[3]= **True**

Weiters übersieht er, daß man die ev. störenden Imaginärteile mit **Chop**[] unterdrücken kann und behauptet, daß man die rein reellen Lösungen nur durch Anwendung von **NSolve**[] bekommen kann.

Ein weiterer Kritikpunkt liegt bei der manchmal nicht sehr glücklichen Wahl der Beispiele, die offensichtlich eher nach der Länge der Lösung als nach didaktischen Gesichtspunkten getroffen wurde. So wird z.B. bei der Vorführung der Fähigkeiten von *Mathematica* beim Lösen von Differentialgleichungen (DGL) die DGL der erzwungenen Schwingung gelöst. Dies ergibt einen über eine Seite langen, absolut unübersichtlichen Output, der mehr oder weniger unerklärt bleibt! Sollte hier didaktisch bezweckt werden, einen Anfänger von der Verwendung des Befehls **DSolve**[] zu verschrecken, so ist dies sicher gut gelungen.

Zusammenfassend kann man sagen, daß das Buch eventuell Schülern empfohlen werden kann, die mit *Mathematica* zu arbeiten beginnen. Jedem anderen würde ich die Lektüre des Originalhandbuches nahelegen, aus dem man sich wesentlich mehr Information sozusagen aus „erster Hand"holen kann, der das vorliegende Buch auch nichts hinzufügen kann.

Werner Cyrmon (Bad Fischau, Österreich)

- **Gaylord, Richard J., Kamin, Samuel N., Wellin, Paul R., An Introduction to Programming with Mathematica, 2nd Edition**

Verlag Springer: Berlin - Heidelberg - New York - London - Paris - Tokyo - Hong Kong, ISBN 0-387-94434-6, 1996, 452 Seiten.

An Introduction to Programming with Mathematica, 2nd Edition unterscheidet sich von der 1st Edition in zwei wesentlichen Punkten:

- Zu jedem Abschnitt wurden Übungen und deren Lösungen hinzugefügt, wobei ca. die Hälfte der Lösungen abgedruckt wurde, der Rest der beiliegenden Diskette entnommen werden kann.
- Es gibt ein neues Kapitel *Applications* („Anwendungen"), das über einen weit gestreuten Bereich zeigt, wie man Mathematica in der Praxis einsetzen kann.

Wie bei der 1st Edition ist es das Ziel der Autoren, Wissenschaftern (Technikern, Mathematikern,...) das Programmieren in Mathematica so zu erläutern, daß sie dieses Computeralgebra-System danach mit maximaler Effektivität in Lehre und Forschung einsetzen können. Für die Lektüre sind keinerlei Vorkenntnisse über Mathematica oder andere Programmiersprachen notwendig.

Der leicht verständliche (obwohl in englischer Sprache), gut gegliederte Text kann zum Selbststudium oder aber in der Lehre, z.B. für einen Universitätskurs über Programmieren in Mathematica, verwendet werden und deckt einen weiten Bereich der Fähigkeiten von Mathematica ab. So beginnen die Autoren, indem sie zeigen, wie man das Mathematica-Frontend benutzt, wie Ausdrücke eingegeben werden etc. Der „Kern" des Buches beginnt in Kapitel 3. Hier wird gezeigt, wie man mit einem der wichtigsten Datentypen von Mathematica, den *Listen*, programmiert. Diesem Kapitel folgen Abschnitte über Funktionen sowie deren Evaluation, bedingte Funktionsausführung, Rekursion, Iteration, Numerik sowie die Programmierung und Nutzung der graphischen Fähigkeiten von Mathematica. Den Abschluß bildet das bereits erwähnte Kapitel über Anwendungen sowie eine ausführliche Besprechung, wie man selbst *Packages* erstellen kann (*„Contexts"*).

Besonderer Wert wurde in allen Abschnitten darauf gelegt zu zeigen, wie man Mathematica *„funktional"* und *„rule-based"* programmiert, was, besonders Umsteigern von anderen Programmiersprachen, oft Probleme bereitet. Mathematikern kommt dieser Programmierstil sehr entgegen, weil er im wesentlichen die „natürliche" Schreibweise der Mathematik wiedergibt. Immer wieder wird an vergleichenden Beispielen gezeigt, wie man ein bereits erstelltes Programm noch verbessern bzw. effizienter gestalten kann. Teilweise werden bereits Fähigkeiten von Mathematica V3.0 gezeigt, das ja im Sommer 1996 erschienen ist.

Das Buch kann jedem Anfänger mit Mathematica, aber auch dem fortgeschrittenen Benutzer, der sich einige Tricks und Tips daraus holen kann, nur an's Herz gelegt werden.

Werner Cyrmon (Bad Fischau, Österreich)

- **Hehl, F.W., Puntigam, R.A., Ruder, H. (Eds.), Relativity and Scientific Computing – Computeralgebra, Numerics, Visualization**

Springer-Verlag, ISBN 3-540-60361-1, 1995, pp. 389.

Der Band enthält Ausarbeitungen von Vorträgen, die im Rahmen des 152. WE-Heraeus-Seminars „Relativität und Wissenschaftliches Rechnen" stattfanden. Ziel war es daher, eine für Studenten (oder sonstige Neulinge) geeignete *Einführung* in das behandelte Gebiet zu geben. Dieses Ziel ist hervorragend erreicht worden. Der Band ist entsprechend der drei Teilaspekte Computeralgebra, Numerik und Visualisierung organisiert. Zu jedem gibt es ein oder zwei allgemeine Übersichtsartikel mit ausführlichen Literaturangaben. Dazu kommen einige speziellere Beiträge, die hin zur aktuellen Forschung führen. Im Bereich Computeralgebra sieht das wie folgt aus. Ein Übersichtsartikel von Hartley beschreibt die allgemeinen Probleme und die verfügbaren Systeme im Bereich Computeralgebra und Relativität. Die Beiträge von Soleng sowie von Tsantilis *et al.* demonstrieren Pakete zur Tensoranalysis sowie deren praktische Anwendung auf realistische Probleme. Wolf und noch einmal Hartley beschäftigen sich in ihren Aufsätzen mit den in der Relativitätstheorie auftretenden Differentialgleichungen (bzw. äußeren Differentialsystemen) und deren symbolische Behandlung. Abgerundet wird das Kapitel durch einen Artikel von Vulcanov über symbolisches Rechnen im Hamiltonschen Zugang zur Relativitätstheorie sowie durch einen Beitrag von van de Ven über Zwei-Schleifen-Rechnungen in der Quantengravitation. Mit Ausnahme der Klassifikation von Lösungen der Einstein-Gleichungen sind damit alle wesentlichen Teilgebiete abgedeckt.

Leider stehen die Teilaspekte Computeralgebra, Numerik und Visualisierung völlig getrennt nebeneinander. Als einziger Hinweis auf eine Verbindung wird in zwei Aufsätzen erwähnt (nicht diskutiert), daß aufgrund der Komplexität der Einstein-Gleichungen entsprechende FORTRAN-Programme häufig mit Computeralgebrasystemen erzeugt werden. Dies ist allerdings kein Fehler des vorliegenden Buchs, sondern spiegelt einfach die Realität wieder. Während es zwischen Numerik und Visualisierung viele Berührungspunkte gibt, hat die Computeralgebra leider immer noch eine ziemliche Außenseiterrolle im Bereich des Wissenschaftlichen Rechnens.

Werner M. Seiler (Karlsruhe)

- **Herzberger, J. (Ed.), Wissenschaftliches Rechnen: Eine Einführung in das Scientific Computing**

Akademie Verlag Berlin, ISBN 3-05-501 680-7 Pb / ISBN 3-05-501 694-7 Pp, 1995, pp. 321

Mit der sehr erfolgreichen Entwicklung des Zweiges der Mathematik, der heute gemeinhin als Wissenschaftliches Rechnen bezeichnet wird, nehmen natürlich auch die diesem Anliegen gewidmeten Buchproduktionen zu. Zehn auf speziellen Gebieten der Numerischen Mathematik ausgewiesene, kompetente Fachleute haben sich nun zusammengefunden, um vorrangig einige neuere Teilbereiche der computerorientierten Numerik vorzustellen, die im letzten Jahrzehnt in der praktischen Anwendung und im Zusammenwirken mit den Möglichkeiten von Computeralgebrasystemen an Bedeutung gewonnen haben. Der Untertitel des Buches „Eine Einführung in das Scientific Computing" erscheint dabei gemessen an der Stoffauswahl und dem wissenschaftlichen Anspruch der Stoffvermittlung etwas irreführend.

Das Buch beginnt mit einer sehr gelungenen Einführung in die beim numerischen Rechnen auf Computern auftretenden Probleme und einer Übersicht über vorhandene Standardisierungen der Computerarithmetik (G. Bohlender, Chr. Ullrich). Für den Leser dürften dabei vor allem auch die mit der Einführung von Standards verbundenen praktischen Schwierigkeiten und die vergleichende Wertung der verschiedenen Ansätze von großem Interesse sein. Aus der Sicht des symbolischen Rechnens verdient das zweite Kapitel, das dem automatischen Differenzieren gewidmet ist, besondere Beachtung (H. Fischer). Automatisch differenzieren heißt allerdings in diesem Kontext, Algorithmen, die Ableitungswerte numerisch bestimmen, systematisch zu erzeugen und anzuwenden. Eine Reihe effizienter Vorgehensweisen werden mathematisch aufbereitet und die daraus abgeleiteten Algorithmen hinsichtlich Praktikabilität und Komplexität bewertet.

Der überwiegende Teil des Buches ist computerorientierten numerischen Verfahren mit aktuellem Anspruch aus der Hochleistungsrechentechnik und großer Bedeutung für viele relevante Anwendungsgebiete gewidmet. Das betrifft einerseits wichtige Forschungsergebnisse der letzten Jahre, die hier in einer geschlossenen Sicht vorgestellt werden, andererseits Methodenbereiche, die schon seit längerer Zeit aktuell sind, in der Standardliteratur aber zu kurz kommen:

Isolierung reeller Nullstellen von Polynomen (W. Krandick), Einschließungsverfahren (G. Alefeld, G. Mayer), parallele asynchrone Iterationen (A. Frommer), Analysis und Numerik linearer differenziell-algebraischer Gleichungen (P. Kunkel, V. Mehrmann), Berechnung der Konvergenzordnung von Folgen bei iterativen Prozessen (J. Herzberger).

Die einzelnen Kapitel sind in sich abgeschlossen und jeweils am Ende mit einer umfangreichen aktuellen Bibliographie für weiterführendes Studium und Detailfragen versehen. Jedes Kapitel führt leicht verständlich in die entsprechende Aufgabenklasse mit den anstehenden Problemen ein. Die vorgestellten Algorithmen werden mathematisch exakt mit wissenschaftlicher Strenge fundiert und hinsichtlich ihrer Eigenschaften und ihres Rechenaufwandes bewertet. Für alle mathematischen Aussagen sind die Beweise angegeben. In Abhängigkeit von der Aufgabenklasse veranschaulichen unterschiedlich viele Beispiele die Leistungsfähigkeit der Algorithmen.

Das Buch hebt sich wohltuend von der großen Anzahl bereits verfügbarer Rezeptbücher zum Programmieren numerischer Algorithmen ab. Es ist gut verständlich geschrieben und übersichtlich gegliedert. Studenten der Angewandten Mathematik kann es bei der Vertiefung ihrer Kenntnisse im Bereich des numerischen Rechnens ein willkommenes Hilfsmittel sein, allen mit der Anwendung leistungsfähiger numerischer Verfahren in den unterschiedlichen Anwendungsbereichen Beschäftigten vermittelt es viele neue Anregungen und stellt es sofort nachnutzbare Hilfsmittel zur Verfügung.

Obwohl im Vorwort das symbolische Rechnen explizit als wichtige Komponente im Bereich des Wissenschaftlichen Rechnens angesprochen wird, ist in den einzelnen Kapiteln wenig davon zu spüren. Es dominiert überwiegend das numerische Rechnen. Dabei wird völlig außer acht gelassen, daß der Bereich des Wissenschaftlichen Rechnens in Verbindung mit der Hochleistungscomputertechnik wesentlich komplexer zu sehen ist und auch andere Teilbereiche von Mathematik und Informatik zu integrieren sind.

Karl Hantzschmann (Rostock)

- **Hörhager, Markus, Maple in Technik und Wissenschaft**

Addison-Wesley Publ. Co., Bonn, ISBN 3-89319-929-2, 1996, pp. 452, DM 69,90.

Maple in Technik und Wissenschaft gibt eine Einführung in Maple unter Verwendung konkreter Fragestellungen aus Technik und Physik. Es werden folgende Themen behandelt: Differential- und Integralrechnung, Maple-Programmierung, Statistik, Interpolation, Ausgleichsrechnung und Curvefitting, Gewöhnliche Differentialgleichungen, Differenzengleichungen, Lineare Algebra und Vektoranalysis, Randwertprobleme, Partielle Differentialgleichungen sowie Integralgleichungen.

Dieses Buch kann Technikern und Physikern wärmstens empfohlen werden. Es enthält unglaublich viele Fallbeispiele, die mit Maple durchgeführt werden. Dabei kommen Maple-Details nicht zu kurz. Das Buch wird mit einer CD-ROM ausgeliefert, die die vorgestellten Maple-Berechnungen als Maple-Dokumente enthält, und zwar für die Versionen V.3 und V.4.

Der ausgezeichnete Gesamteindruck wird eigentlich nur durch einige Druckfehler (falsche Trennungen beispielsweise auf S. 71, 170, 191, manche falsche Verwendung des Apostrophs, Kommafehler bereits im zweiten Satz der Einleitung) sowie die teilweise völlig überdimensionierten Summen- und Produktzeichen bei mathematischen Formeln (besonders „schön" auf den Doppelseiten S. 148/149 und 186/187 zu sehen) und die aus mehreren nicht zueinander passenden Teilen zusammengesetzten geschweiften Klammern (beispielsweise Doppelseite 50/51) getrübt. Aber darüber werden die Leser aufgrund der Qualität des wissenschaftlichen Materials wohl hinwegsehen.

Wolfram Koepf (Berlin)

- ## Hörhager, Markus, Partoll, Heinz, Problemlösungen mit Mathcad für Windows

Addison-Wesley Publ. Co., Bonn, ISBN 3-89319-728-1, 1995, pp. 336, DM 59,90.

In *Problemlösungen mit Mathcad für Windows* wird Mathcad verwendet, um Probleme aus den Bereichen Mathematik, Physik, Qualitätssicherung, Biologie und Chemie, Volks- und Betriebswirtschaft, Maschinenbau, Elektronik und Elektrotechnik, Nachrichtentechnik sowie Impuls- und Regeltechnik zu lösen. Jedem dieser Themen ist ein eigenes Kapitel gewidmet. Das Buch wird mit einer Diskette ausgeliefert, die die Mathcad-Worksheets zu den behandelten Themen enthält.

Leider ist dieses Buch nicht so gelungen wie Hörhagers oben besprochenes Buch über Maple.

Zunächst einmal ist der von Mathcad erzeugte und in das Buch integrierte Output qualitativ eher dürftig. Beispielsweise werden alle Indizes und Exponenten mit einem viel zu großen Abstand dargestellt, etwa wie auf S. 86

$$\frac{d^2}{d\,t^2}\,\varphi \quad + \gamma \,\cdot\!\left(\frac{d}{dt}\varphi \;\right) + \left(\omega \quad {}_0{}^2 + \frac{\gamma^{\;\;2}}{4}\right)\!\cdot sin(\varphi \quad) {=} a \cdot cos\!\left(\omega \quad {}_e \cdot t\right) .$$

Solche Formeln lassen sich nur sehr schwer lesen. Auch die grafischen Darstellungen des Buchs entsprechen in ihrer Qualität nicht heutigen Ansprüchen.

Das Buch bleibt an vielen Stellen unvollständig, die Darstellung wird abgebrochen, und es wird auf die beiliegende Diskette verwiesen, beispielsweise auf S. 123: „Nähere Einzelheiten entnehmen Sie bitte dem Mathcad-Dokument `PENDEL.MCD` auf Ihrer Beispieldiskette." Verwendet man nun die Beispieldiskette, so muß man leider feststellen, daß nicht alle Mathcad-Dateien vollständig sind und ihre interaktive Ausführung nicht gelingt.

Aber auch inhaltlich bin ich mit dem Buch nicht immer einverstanden. Ich möchte meine Kritik an einem Beispiel darstellen, das auch sehr instruktiv die Grenzen von Mathcad (s. auch folgende Besprechung) aufzeigt.

Auf S. 94 des Buchs versucht der Autor, die ersten Legendre-Polynome

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^k}{2^n} \binom{n}{k} \binom{2n-2k}{n} x^{n-2k}$$

zu berechnen. In Maple kann man beispielsweise einfach definieren

```
P:=proc(n,x)
local k:
sum((-1)^k/2^n*binomial(n,k)*binomial(2*n-2*k,n)*x^(n-2*k),k=0..n/2)
end:
```

Dies entspricht direkt der oben gegebenen Definition und ist (zur symbolischen Berechnung der Polynome) schon recht effizient. Man kann dann in wenigen Augenblicken beispielsweise $P_{100}(x)$ (mit riesigen rationalen Koeffizienten) berechnen. Leider kann man in Mathcad nicht direkt auf Binomialkoeffizienten zugreifen. Ersetzt man diese durch Fakultäten, so gibt es bei der Numerik sehr schnell Überlauf, und eine Berechnung ist nicht mehr möglich. Als generelle Funktion (ohne Festsetzung der einzusetzenden x-Werte) kann man mit einem solchen Objekt leider ohnehin nicht in Mathcad arbeiten. Daher eignet sich die gegebene Darstellung in Mathcad überhaupt nicht zur Berechnung des n-ten Polynoms, nicht einmal für kleine n.

So also muß man es also verstehen, wenn nun der Autor sagt: „Die schnellste Art die Legendre Polynome $P_l(x)$ mit Mathcad zu bestimmen, erfolgt mittels Reihenentwicklung der erzeugenden Funktion." Dies ist vom theoretischen Standpunkt eine der ineffizientesten Methoden, und es liegt nur an der Konzeption von Mathcad, daß dies die „schnellste" Art hergibt. Zur graphischen Darstellung der ersten Legendre-Polynome verwendet der Autor dann eine Integraldarstellung: welch absurde Situation.

Ich finde es an dieser Stelle höchst bedauerlich, daß sich die Autoren bei der Darstellung mathematischen Wissens stärker an dem benutzten Programmpaket orientieren als an der zugrundeliegenden Mathematik. Hier wird der Leser meines Erachtens in die Irre geführt.

Zusammenfassend möchte ich also sagen, daß ich dieses Buch für unfertig halte. Eine sorgfältige Überarbeitung könnte es allerdings durchaus auf ein ähnliches Niveau bringen wie Hörhagers oben besprochenes Buch über Maple.

Wolfram Koepf (Berlin)

- ## Kayser, Hans-Jürgen, Analysis mit DERIVE

Dümmlerbuch 4523, Ferd. Dümmlers Verlag, Bonn, ISBN 3-427-45231-X, 1996, pp. 157, DM 29,80.
Diskette zum Buch, ISBN 3-427-45242-5, 1996, DM 36,00.

Analysis mit DERIVE ist wohl das erste Buch im deutschen Sprachraum, in dem versucht wird, den Unterrichtsstoff der 11. Gymnasialklasse unter Zuhilfenahme eines Computeralgebrasystems, nämlich DERIVE, zu präsentieren. Dies gelingt dem Autor im großen und ganzen sehr schön.

Extremwertprobleme werden an einem Musterbeispiel (Optimierung einer Schachtel) zunächst ohne Differentialrechnung behandelt. Dasselbe Problem wird dann zur Definition der Ableitungsfunktion verwendet. Nach der Ableitung wird auch die Krümmung am Beispiel der Planung einer Autobahnauffahrt behandelt. Dies ist ein sehr instruktives Beispiel. Die Krümmungsformel wird hierbei allerdings vom Autor angegeben und verwendet, ohne näher auf sie einzugehen. Das ist ein bißchen schade, denn auch für die Interpretation dieser Formel (etwa als Kehrwert des Krümmungsradius) bietet sich ein Werkzeug wie DERIVE geradezu an.

Das immer wieder auftretende Nullstellenproblem (*reelle* Nullstellen einer Funktion bzw. *reelle* Nullstellen der Ableitungsfunktion usw.) wird genauso wie die generelle Kurvendiskussion (Nullstellen, Extremwerte, Wendepunkte, Symmetrieeigenschaften) mit DERIVE automatisiert. Naturgemäß wird auch von den graphischen Fähigkeiten von DERIVE vielfach Gebrauch gemacht.

Schade ist, daß die Diskette, die der Autor verfaßt hat und die zur Arbeit mit dem Buch benötigt wird, dem Buch nicht beiliegt. Sie muß für teures Geld extra gekauft werden. Zwar sind Auszüge aus den DERIVE-Dateien im Anhang dokumentiert, aber dies sind eben nur Auszüge, und zum anderen ist die manuelle Eingabe naturgemäß sehr mühselig. Daher ist jeder Käufer auf die Diskette angewiesen. Dies senkt den Wert des Buchs erheblich, m. E. macht ein separater Verkauf wenig Sinn.

Überrascht hat mich ferner, daß der Autor nicht die deutsche DERIVE-Version mit den deutschen Menünamen verwendet. Ich bin zwar selbst kein besonderer Freund hiervon (wem die englischen Menünamen und Hotkeys geläufig sind, dem fällt der Wechsel schwer), es ist aber nicht von der Hand zu weisen, daß dieses deutschsprachige Menü auf die Forderung deutschsprachiger Lehrer eingeführt worden ist.

Es liegt aber dennoch ein alles in allem schönes Buch vor, mit dem ich die Hoffnung verbinden möchte, daß derartige Bücher den Einzug von Computeralgebra ins mathematische Schulcurriculum vorbereiten helfen.

Wolfram Koepf (Berlin)

- ## Mathcad 6.0, Studentenversion

International Thomson Publ. Co., ISBN 3-8266-0238-2, 1995, DM 99,00.

Um die Studentenversion von *Mathcad 6.0* für den Rundbrief der Computeralgebra-Fachgruppe zu referieren, habe ich naturgemäß besonderes Gewicht auf die symbolischen Fähigkeiten dieser Software gelegt. Da *Mathcad* von sich aus gar keine symbolischen Fähigkeiten hat, kam es mir also vor allem darauf an zu untersuchen, inwieweit die Integration einer abgespeckten Mapleversion gelungen ist.

Um es gleich vorweg zu sagen: Dies gibt vermutlich all denjenigen ein verfälschtes Bild, die dieses Produkt ausschließlich zu numerischen Zwecken verwenden wollen. Aber ich halte diese Vorgehensweise im vorliegenden Fall für gerechtfertigt.

Ohne Zweifel stellt die Bereitstellung symbolischer Rechnungen wie Differentiation, Integration, Taylorpolynome etc. eine Bereicherung von *Mathcad* dar. Es wird den Studentinnen und Studenten mit *Mathcad 6.0* gelingen, viele Übungsaufgaben aus Schul- und Universitätsmathematik zu lösen. Dafür ist das Produkt also gut geeignet. Da das Interface mit seinen WYSIWYG-Editiermöglichkeiten bei weitem ausgereifter ist als das der momentan auf dem Markt befindlichen Computeralgebrasysteme (vielleicht bis auf Theorist), und da der Preis moderat ist, stellt es für den einen oder anderen sicherlich eine Alternative zu einem Computeralgebrasystem dar.

Auf der anderen Seite ist die Integration von Maple nur teilweise gelungen. Einer der Gründe liegt in der Grundkonzeption von *Mathcad*. Als numerisch konzipiertes System hat es einige „hart” eingebaute Fallen für symbolisches Rechnen. Beispielsweise ist ∞ bei *Mathcad* definiert als 10^{307}. Man kann gleichfalls nicht einfach Funktionen hinschreiben, ohne die einzusetzenden Variablenwerte vorher festzusetzen: solcher Input ist nicht zulässig und wird mit einer Fehlermeldung bestraft. Für einen „symbolisch denkenden” Benutzer ist dies eine mehr als hinderliche Einschränkung.

Ferner würde ich gerne auf wesentliche Algorithmen der Computeralgebra und insbesondere der Polynomarithmetik, wie beispielsweise gcd-Berechnungen, zugreifen können. Leider sind diese Algorithmen nicht im Lieferumfang enthalten. Das reduziert den Anwendungsbereich des Produkts für symbolisch interessierte Anwender erheblich.

Schließlich kann es geschehen, daß beim symbolischen Rechnen sehr umfangreiche Resultate entstehen. Diese Resultate werden dann von *Mathcad 6.0* in das vorliegende Worksheet aufgenommen, es wird aber kein Zeilenumbruch vorgenommen. Solche Ausdrücke lassen sich nur schwer lesen und weiterbearbeiten, da sie nicht auf die entsprechende Seite des Worksheets passen, und zum Drucken eignen sich solche Dokumente dann natürlich auch nicht mehr.

Als eine Besonderheit wirbt *Mathcad* damit, daß *Mathcad*-Dokumente immer lebendige interaktive Worksheets darstellen: Ändert man den Wert einer der Variablen im bearbeiteten Dokument, so wird automatisch die ganze Seite unter Berücksichtigung des neuen Variablenwerts neu berechnet und entsprechend umgestaltet, sofern man diesen interaktiven Modus nicht abstellt. So nett dieser Effekt im Prinzip ist, habe ich des öfteren seine negative Seite kennengelernt: Enthält das Dokument komplizierte graphische Darstellungen oder Integrale, so werden diese – ob der Benutzer will oder nicht – sofort neu berechnet. Das kann dazu führen, daß das Worksheet (bei versehentlich ungeschickten (komplizierten) Eingaben) unter Umständen hart abgebrochen werden muß.

Mathcad gibt an, ein „echtes Windows Programm” zu sein, mit der Möglichkeit, Informationen mit anderen Windows-Programmen auszutauschen. Leider ist es mir allerdings nicht gelungen, mit dem üblichen Windows-Mechanismus Mathcad-Output in ein Maple- oder REDUCE-Worksheet zu kopieren. Daß diese Kommunikation scheitert, ist natürlich schade.

Abschließend möchte ich noch ein Ergebnis bemerken, auf das ich beim zufälligen Probieren gestoßen bin. Während das Integral

$$\int_0^\infty x\,e^{-x}\,dx$$

symbolisch korrekt zu 1 berechnet wird, liefert die numerische Rechung den Wert 0.

Es bleibt also festzuhalten, daß *Mathcad 6.0* ein numerisches Softwareprodukt ist, das mit einigen symbolischen Zusatzfähigkeiten ausgestattet ist. Wem das reicht, der hat an der Software vermutlich seine Freude.

Wolfram Koepf (Berlin)

Lehrveranstaltungen über Computeralgebra im WS 1996/97

- **Rheinisch–Westfälische Technische Hochschule Aachen**
  Einige algorithmische Methoden der Gruppentheorie, J. Neubüser, B. Eick, V2 + Ü2
  Einführungspraktikum in das Formelmanipulationssystem MAPLE, J. Neubüser, U. Klein, V. Dietrich, P2
  Praktikum Programmieren in MAPLE, J. Neubüser, U. Klein, P4

- **Technische Universität Berlin**
  Seminar Algorithmische Zahlentheorie, M. Pohst, S2

- **Universität Bonn**
  Computeralgebra II, A. Schönhage, V4
  Ausgewählte Kapitel der Audiosignalverarbeitung, M. Clausen, V4 + 2Ü
  Seminar: Wavelets und ihre Anwendungen in der Signalverarbeitung, M. Clausen, H. Meier-Reinhold, S2
  Projektgruppe: Digitale Audiosignalverarbeitung, M. Clausen, H. Meier-Reinhold, PG2

- **Technische Hochschule Darmstadt**
  Zahlentheorie, J. Buchmann, V2
  Faktorisierung ganzer Zahlen, V. Müller, V2 + Ü2
  Electronic Cash, T. Zieschang, V2 + Ü2
  Programmieren von und mit LiPS, T. Setz, V2 + Ü1
  Praktikum Weiterentwicklung von LiDIA, J. Buchmann, M. Maurer, P4
  Praktikum Weiterentwicklung von LiPS, J. Buchmann, T. Setz, P4
  Oberseminar am Lehrstuhl Buchmann, J. Buchmann, S2

- **Universität Erlangen-Nürnberg**
  Computeralgebra, H. Meyn, V4
  Übungen zu Computeralgebra, U. Weigand, Ü2
  Analyse von Algorithmen, V. Strehl, V3 + Ü1

- **Universität Greifswald**
  Lie-Theorie und Differentialgleichungen - Computeranwendungen, G.Czichowski, H.Schlosser, S2
  Computeralgebra und ganzrationale Funktionen, H.Schlosser, V2, S2

- **Universität Halle**
  Lösung von Differentialgleichungen mit Computeralgebraprogrammen, H.Benker, H.Dietrich, V4
  Mathematik mit Mathcad, H.Benker, V2

- **Universität Heidelberg**
  Einführung in die Computeralgebra, G. Hiß, V4 + Ü2
  Algorithmen der algebraischen Zahlentheorie, B. H. Matzat, S2

- **Universität Kaiserslautern**
  Lineare Algebra und Mathematica, G. Pfister, Ü4
  Seminar Singularitätentheorie/Algebraische Geometrie/Computeralgebra, G.-M. Greuel, S2
  Seminar Codierungstheorie, G. Pfister, S2

- **Pädagogische Hochschule Karlsruhe**
  Grundlagen: Algorithmen und Informatik I, J. Ziegenbalg, V2

- **Universität Karlsruhe**
  Symbolisches Rechnen (Computeralgebra), J. Calmet, K. Homann, C. Zenger, V3 + Ü1
  Differentialgeometrie und Computeralgebra, W. M. Seiler, V2
  Entwurf von Computeralgebrasystemen, J. Calmet, K. Homann, P4
  Rechnen mit Welle und Teilchen, Th. Beth, M. Grassl, J. Müller-Quade, S2
  Konkrete Mathematik, C. Zenger, S2

- **Universität Leipzig**
  Kodierungstheorie, J. Apel, V2
  Mechanisches Theorembeweisen in der Geometrie, H.-G. Gräbe, V2
  Computeralgebra – Primtests und Faktorisierung, H.-G. Gräbe, V2

- **Universität Linz, Research Institute for Symbolic Computation**
  Einführung in die Computeralgebra, F. Winkler, V2 + Ü1
  SW-Systeme für Computeralgebra und Computer-Geometrie, E. Blurock, PR2
  Computer-Analysis, F. Winkler, V2
  Diskrete algorithmische Geometrie II, S. Stifter, V2
  Automatisches Beweisen A, T. Jebelean, V2
  Algebraic Constraint Solving, H. Hong, V2
  Mathematikunterricht mit DERIVE, B. Kutzler, V2

- **Universität Mannheim**
  Seminar Computeralgebra, H. Kredel, M. Schlichenmaier, W. Seiler, S2

- **Technische Universität München**
  Computeralgebra I, M. Kaplan, V4

- **Universität-Gesamthochschule Paderborn**
  Mathematik am Computer, F. Schwarz, V2 + Ü2
  Computeralgebra I, K.H. Kiyek, V4 + Ü2
  Workshop Computational Number Theory, Indlekofer und Jarai, V2+ Ü2
  MuPAD Seminar , B. Fuchssteiner und MuPAD Gruppe, S2

- **Universität Passau**
  Computeralgebra, V. Weispfenning, V3
  Oberseminar Computeralgebra, V. Weispfenning, S1

- **Universität Rostock**
  Rewrite-Systeme, A. Widiger, V2
  Arbeiten mit Maple, O. Becken, V1 + Ü1

- **Universität Tübingen**
  Algebraische Gleichungssysteme und Anwendungen, B. Amrhein, O. Gloor, V2+Ü1
  Termersetzungssysteme, R. Bündgen, V3+Ü1
  Algorithmische Geometrie, K-J. Lange, R. Klein, V2
  Einführung in die Computer Algebra, R. Loos, V2+Ü2
  Computer im Unterricht, B. Amrhein, G. Bitsch, S2+Ü2

- **Universität Ulm**
  Mathematica in der Theoretischen Physik, G. Baumann, V2
  Einführung in Maple, F. Gleisberg, V2

- **ETH Zürich**
  Computer Algebra I, T. Mulders, V2 + Ü1
  Einführung in die Mathematische Software, E. Engeler, D. Mall, V2+P1
  Numerisches und Symbolisches Rechnen, M. Bronstein, V3 + Ü2

Kurze Mitteilungen

- **Ehrenpromotion der Universtität Tübingen für George E. Collins**

  Auf Initiative von Prof. Dr. Rüdiger Loos hat die Fakultät für Informatik der Universität Tübingen Prof. Dr. George Collings die Ehrendoktorwürde verliehen. Damit wurden die vielfältigen Verdienste von George Collings auf dem Gebiet der Computeralgebra gewürdigt. Der Festakt fand am 12. Juni

1996 in Tübingen statt. Nach der Begrüßung durch Dekan Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Straßer hielt Prof. Dr. Bruno Buchberger vom RISC Linz zum Thema *Die Zukunft der Computeralgebra*. In der Laudatio ging Prof. Dr. Rüdiger Loos auf das wissenschaftliche Werk, insbesondere seine Arbeiten zur Quantorenelimination, Subresultanten und die SAC-Library ein. Nach der Überreichung der Urkunde durch den Rektor Prof. Dr. Hans-Werner Ludwig beschloß ein Konzert den Festakt.

Johannes Grabmeier (Heidelberg)

- **Formally Reviewed Articles in the SIGSAM Bulletin**

  If you receive the SICSAM Bulletin then you may already know that starting next issue there will be a section containing articles. We believe that the reviewing standards of this section are high - the current review process involves members of the ISSAC '96 Program Committee - and it is our intent to keep them high even though the section will evolve.

  The Bulletin will continue to publish completely unreviewed articles as well, in the Timely Communications section.

- **MapleTech – Special Issues**

  Two special issues to be published in early 1997:

  - **Maple in the Mathematical Science**
    The editor is James Herod of the Georgia Institut of Technology, Email: `herod@math.gatech.edu`.
  - **Maple in the Physical Science**
    The editor is Jonathan Borwein of the center of experimental and constructive Mathematics, Simon Fraser University, Email: `jborwein@cecm.sfu.edu`.

- **Solve – Newsletter für** AXIOM

  Im Rahmen des Support Service für AXIOM wird von NAG Ltd. jetzt regelmäßig ein neuer technischer Rundbrief herausgegeben.

- **Mailing-Listen und neue Homepage für OpenMath**

  This is to announce the creation of two new email groups ("mailing lists") following the recent OpenMath workshop in Zurich.
  openmath-sgml: for typesetting/SGML/HTML matters
  openmath-sym: for matters relating to OpenMath symbols and "content dictionaries".

  To subscribe to either of these email groups please send email to majordomo@can.nl with an empty subject, and the body containing either `subscribe openmath-sgml` or `subscribe openmath-sym`

  The new URL is `http://www.can.nl/~abbott/OpenMath/index.html`

- **Neue Buchreihe des RISC-Linz in Kooperation mit dem Springer Verlag Wien**

  Let me please draw you attention to a new book series which the RISC Institute starts to publish in cooperation with Springer Vienna - New York. The series is called "Texts and Monographs in Symbolic Computation". Below are the first four books that already appeared in this series

  - B. Sturmfels, Algorithms in Invariant Theory. DM 59,-, approx. US $ 39.50
  - W. Wu, Mechanical Theorem Proving in Geometries. DM 98,-, approx. US $ 69.00
  - J. Pfalzgraf, D. Wang, Automated Practical Reasoning. oeS 686,-, DM 98,-, US $ 59.00
  - F. Winkler, Polynomial Algorithms in Computer Algebra. oeS 625,-, DM 89,-, US $ 69.00

  and 3 more books which will appear in the next months.

  - J.R. Johnson, B. Caviness (eds.) Quantifier Elimination and Cylindrical Algebraic Decomposition.
  - N. Kajler (ed.) Human Interaction in Symbolic Computing.
  - A. Miola, M. Temperini (eds.) Advances in the Design of SC Systems

  Each year 2 - 3 more titles will appear. Information is also accessible on the Internet at
  `http://www.springer.co.at/catalogues/ScBooks/RISCMono/index.html`

- **Short term research position (inverse problems) in Linz,Austria**

  We might have money available for funding an additional postdoctoral research position in inverse problems at the Johannes Kepler Universität in Linz, Austria, for about six months starting this October or November. We are interested in researchers whose interests and experience match ours closely enough for successful joint research to be possible within this relatively short period. We are currently mostly interested in regularization methods for nonlinear ill-posed inverse problems (also large scale, in combination with efficient solvers for the direct problems; see our WWW-page, address below, for details). Those who are interested and match these criteria should contact me with details about their interest and experience urgently by E-Mail.

  Prof.Dr.Heinz W. Engl, Industriemathematik, Institut für Mathematik, Johannes-Kepler-Universitaät, Altenbergerstrasse 69, A-4040 Linz, Österreich / Austria, E-Mail: `engl@indmath.uni-linz.ac.at`, or `na.engl@na-net.ornl.gov` secretary: `nikolaus@indmath.uni-linz.ac.at` Phone: +43-(0)732-2468; ext.9219 or 693, secretary: 9220; home: +43-(0)732-245518, Fax: +43-(0)732-2468855, Telex: 2-2323 uni li a, World Wide Web: `http://www.indmath.uni-linz.ac.at/` .

- **Research Positions in Welding Engineering at the Technical University in Clausthal.**

  Research positions are available immediately at the Institute of Welding Technology (ISAF) of the Technical University in Clausthal.

  Successful candidates have experience in one or more of the areas welding technology, materials science, automation of processes, mathematics and information sciences.

  Work will be done in research projects of fusion welding and cladding with automated welding techniques including the numerical simulation and control of processes.

  The salary is regulated by the German BAT contract. The appointment will be nonpermanent. Women and handicapped persons are especially encouraged to apply.

  Application, including curriculum vitae, relevant certificates and an outline of scientific background should be sent to:

  Dr.-Ing. B. Bouaifi, ISAF, TU Clausthal, Im Schleeke 112, D-38640 Goslar, Tel: (05321) 3470-0, Fax: (05321) 3470-40, E-mail: `stbb@isaf-gs.tu-clausthal.de`, WWW homepage: `http://www.isaf.tu-clausthal.de` .

Aufnahmeantrag für Mitgliedschaft in der Fachgruppe Computeralgebra

(Im folgenden jeweils Zutreffendes bitte im entsprechenden Feld [ ] ankreuzen bzw. ____________ ausfüllen.)

Name: ______________________________ Vorname: ______________

Akademischer Grad/Titel: ______________________________

Privatadresse

Straße/Postfach: ______________________________

PLZ/Ort: ______________________________ Telefon: ______________

e-mail: ______________________________ Telefax: ______________

Dienstanschrift

Firma/Institution: ______________________________

Straße/Postfach: ______________________________

PLZ/Ort: ______________________________ Telefon: ______________

e-mail: ______________________________ Telefax: ______________

Gewünschte Postanschrift: [ ] Privatadresse [ ] Dienstanschrift

1. Hiermit beantrage ich zum 1. Januar 200__ die Aufnahme als Mitglied in die Fachgruppe

   Computeralgebra (CA) (bei der GI: 0.2.1).

2. Der Jahresbeitrag beträgt DM 15,00 bzw. DM 18,00. Ich ordne mich folgender Beitragsklasse zu:

   [ ] **15,00 DM**. für Mitglieder einer der drei Trägergesellschaften

   [ ] GI Mitgliedsnummer: ______________

   [ ] DMV Mitgliedsnummer: ______________

   [ ] GAMM Mitgliedsnummer: ______________

   Der Beitrag zur Fachgruppe Computeralgebra wird mit der Beitragsrechnung der Trägergesellschaft in Rechnung gestellt. (Bei Mitgliedschaft bei mehreren Trägergesellschaften wird dies von derjenigen durchgeführt, zu der Sie diesen Antrag schicken.) [ ] Ich habe dafür bereits eine Einzugsvollmacht erteilt. Diese wird hiermit für den Beitrag für die Fachgruppe Computeralgebra erweitert.

   [ ] **15,00 DM**. Ich bin aber noch nicht Mitglied einer der drei Trägergesellschaften. Deshalb beantrage ich gleichzeitig die Mitgliedschaft in der

   [ ] GI [ ] DMV [ ] GAMM.

   und bitte um Übersendung der entsprechenden Unterlagen.

   [ ] **18,00 DM** für Nichtmitglieder der drei Trägergesellschaften. [ ] Gleichzeitig bitte ich um Zusendung von Informationen über die Mitgliedschaft in folgenden Gesellschaften:

   [ ] GI [ ] DMV [ ] GAMM.

3. Die in dieses Formular eingetragenen Angaben werden elektronisch gespeichert. Ich bin damit einverstanden, daß meine Postanschrift durch die Trägergesellschaften oder durch Dritte nach Weitergabe durch eine Trägergesellschaft wie folgt genutzt werden kann (ist nichts angekreuzt wird c. angenommen).

   [ ] a. Zusendungen aller Art mit Bezug zur Informatik, Mathematik bzw. Mechanik.

   [ ] b. Zusendungen durch wissenschaftliche Institutionen mit Bezug zur Informatik, Mathematik bzw. Mechanik.

   [ ] c. Nur Zusendungen interner Art von GI, DMV bzw. GAMM.

Ort, Datum: ______________ Unterschrift: ______________________

Zurück an:

Gesellschaft für Informatik e.V. (GI)
Wissenschaftszentrum
Ahrstraße 45
53175 Bonn
Tel.: 0228-302-149, Fax.: -167
e-mail: gs@gi-ev.de

oder

Deutsche Mathematiker-Vereinigung e.V. (DMV)
Mohrenstraße 39, 10117 Berlin
Tel.: 030-20377-306, Fax.: -307
e-mail: dmv@wias-berlin.de

oder

Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik e.V. (GAMM)
NWF I – Mathematik, Univ. Regensburg
Universitätsstr. 31, 96053 Regensburg