

Österreichische Akademie der Wissenschaften

Jahresbericht 2014

Johann Radon Institute for Computational and Applied Mathematics (RICAM)

| | |
|-----------------------|---|
| BERICHTSZEITRAUM: | 1.1.2014 – 31.12.2014 |
| INSTITUTSDIREKTOREN : | Prof. Ulrich Langer Prof. Ronny Ramlau |
| ADRESSE | Altenbergerstraße 69 4040 Linz |

Inhalt

1. Mission Statement in Deutsch und Englisch

Das Johann Radon Institute for Computational and Applied Mathematics (RICAM) wurde 2003 mit dem Ziel gegründet, ein international erfolgreiches Forschungsinstitut im Bereich der angewandten Mathematik aufzubauen. Das Mission Statement des Institutes sowie die Vision RICAM 2020 definieren den Anspruch des Institutes wie folgt: Das Johann Radon Institute

- betreibt Grundlagenforschung in computergestützter und angewandter Mathematik auf höchstem internationalen Niveau,
- erhält Motivationen für die Forschungsthemen auch aus anderen Wissenschaftsgebieten und der Industrie,
- betont die interdisziplinäre Zusammenarbeit zwischen den Arbeitsgruppen und ähnlich ausgerichteten Institutionen sowie Universitäten aus aller Welt,
- kooperiert mit anderen Disziplinen im Rahmen von Special Semestern zu Themen von aktuell großer Bedeutung,
- möchte begabte PostDocs aus aller Welt anziehen und ihnen ein Umfeld bieten, das sie auf internationale Karrieren in Wissenschaft oder Industrie vorbereitet,
- kooperiert mit Universitäten durch die Einbeziehung von PhD-Studierenden in Forschungsprojekte und
- promotet durch seine Arbeit und Berichterstattung darüber die Rolle der Mathematik in Forschung, Industrie und Gesellschaft.

Das Mission Statement des Institutes ist langfristig konzipiert und Grundlage der Planungen und Entscheidungen des Institutes. Die Umsetzung erfolgt in den Arbeitsgruppen des Institutes. Die Arbeitsgruppenleiter sind im Regelfall Universitätsprofessoren an österreichischen Universitäten, wodurch eine enge Verflechtung der Forschungsaktivitäten des RICAM und der mathematischen Universitätsinstitute gewährleistet wird.

Das Institut verfügte 2014 über folgende Arbeitsgruppen (AG) & Forschungsprojekte:

- AG „Computational Methods for Direct Field Problems“, Gruppenleiter: Prof. Dr. Ulrich Langer
- AG „Inverse Problems and Mathematical Imaging“, Gruppenleiter: Prof. Dr. Otmar Scherzer
- AG „Symbolic Computation“, Gruppenleiter: Prof. Dr. Josef Schicho
- AG „Optimization and Optimal Control“, Gruppenleiter: Prof. Dr. Karl Kunisch
- AG „Modelling, Analysis and Numerics of PDEs in Cell Biology“, Gruppenleiter: Prof. Dr. Christian Schmeiser
- AG „Mathematical Methods in Molecular and Systems Biology“, Gruppenleiter: Prof. Dr. Philipp Kügler
- Transfergruppe, Gruppenleiter: Prof. Dr. Ronny Ramlau
- Forschungsprojekt „Applied Discrete Mathematics and Cryptography“, Projektleiter: Doz. Dr. Arne Winterhof
- New Frontiers Group (NFG) „Multiscale modeling and simulation of crowded transport in the life and social sciences“, Gruppenleiterin: Dr. Marie-Therese Wolfram
- START-Project "Sparse Approximation and Optimization in High Dimensions", Projektleiter: Prof. Dr. Massimo Fornasier

In 2003 the Johann Radon Institute for Computational and Applied Mathematics (RICAM) was founded with the goal to become an international successful institute in the field of applied mathematics. The mission statement as well as the Vision 2020, which define the standards of the institute, contain following points: The Johann Radon Institute

- carries out basic research in computational and applied mathematics according to highest international standards
- obtains the motivation for its research topics also from challenges in other scientific fields and industry
- emphasizes interdisciplinary cooperation between its workgroups and with institutions with similar scope and universities world-wide
- cooperates with other disciplines in the framework of special semesters on topics of major current interest
- wishes to attract gifted PostDocs from all over the world and to provide an environment preparing them for international careers in academia or industry
- cooperates with universities by involving PhD-students into its research projects
- promotes, through its work and reports about it, the role of mathematics in science, industry and society

The Mission Statement of the institute is based on a long term and it is the basic concept for strategic planning as well as for all decisions which are made at the institute. The implementation takes place in the working groups of the institute. Normally the group leaders are professors at Austrian Universities which lead to strong scientific cooperative projects between RICAM and mathematical university institutes.

In 2014 the institute had following working groups (AG) and projects:

- AG „Computational Methods for Direct Field Problems“, group leader: Prof. Dr. Ulrich Langer
- AG „Inverse Problems und Mathematical Imaging“, group leader: Prof. Dr. Otmar Scherzer
- AG „Symbolic Computation“, group leader: Prof. Dr. Josef Schicho
- AG „Optimization and Optimal Control“, group leader: Prof. Dr. Karl Kunisch
- AG „Modelling, Analysis and Numerics of PDEs in Cell Biology“, group leader: Prof. Dr. Christian Schmeiser
- AG „Mathematical Methods in Molecular and Systems Biology“, group leader: Prof. Dr. Philipp Kügler
- Transfer Group, group leader: Prof. Dr. Ronny Ramlau
- Research projekt „Applied Discrete Mathematics and Cryptography“, project leader: Doz. Dr. Arne Winterhof
- New Frontiers Group (NFG) „Multiscale modeling and simulation of crowded transport in the life and social sciences“, group leader: Dr. Marie-Therese Wolfram
- START-Project "Sparse Approximation and Optimization in High Dimensions", project leader: Prof. Dr. Massimo Fornasier

2. Wissenschaftliche Tätigkeit 2014 (Kurzfassung)

Im Folgenden wird kurz über die wissenschaftliche Tätigkeit der einzelnen Arbeitsgruppen (AG) und Forschungsprojekte am RICAM berichtet.

Die Forschungsarbeiten der **AG „Computational Methods for Direct Field Problems“ (CMG)** konzentrierten sich 2014 auf die Entwicklung, die Analyse sowie die Implementierung neuer effizienter und robuster numerischer Methoden zur Lösung partieller Differentialgleichungen (PDgl). Viele Computersimulationen beruhen auf mathematischen Modellen, die durch PDgl bzw. Systeme von gekoppelten PDgl beschrieben werden. Dazu zählen Diffusionsphänomene in heterogenen Medien wie sie sowohl in der Technik als auch in den Lebenswissenschaften vorkommen. Ähnliches gilt für Fluid-Struktur-Interaktionsmodelle (FSI), die mathematisch auf ein System von gekoppelten PDgl der Strömungs- und Festkörpermechanik führen. FSI Modelle kommen sowohl in technischen Anwendungen als auch der Medizin vor. Rissausbreitung ist ein kompliziertes Phänomen in der Mechanik, deren Simulation filigrane numerische Techniken erfordert. Zu allen diesen Anwendungen hat die AG neue Beiträge geleistet. Schnellere und robustere numerische Verfahren erlauben nicht nur die Simulation von Produkten und Prozessen sondern auch deren effizientere Optimierung. Die AG hat 2014 insbesondere ihre Forschungsarbeiten zur Isogeometrischen Analysis (IgA) vorangebracht und die Ergebnisse im Rahmen mehrerer eingeladener Vorträge auf internationalen Tagungen vorgestellt. IgA ist ein relativ neues, weltweit boomendes Forschungsgebiet sowohl in den Ingenieurwissenschaften als auch in der Mathematik mit einem hohen Impact auf allen Bereichen der Computational Sciences sowie mit vielen Industrieanwendungen. Das IgA Software-Projekt G+SMO ist dabei ein Kooperationsprojekt verschiedener Gruppen im vom FWF geförderten nationalen Forschungsnetzwerk NFN S117 „Geometry & Simulation“. Abbildung 1 zeigt die Spline-Darstellung des NFN Logos in G+SMO und die IgA Lösung eines Diffusionsproblems auf der dargestellten Oberfläche. Die AG ist am neuen, vom FWF geförderten Doktoratskolleg DK W1250 „NanoCell“ und am 2014 erfolgreich zwischenevaluierten DK W1214 "Computational Mathematics“ beteiligt.

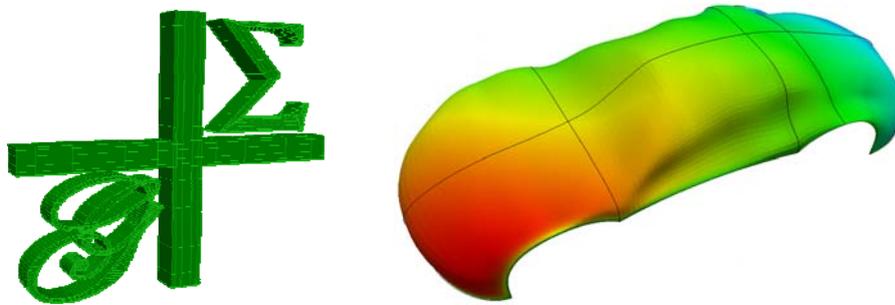
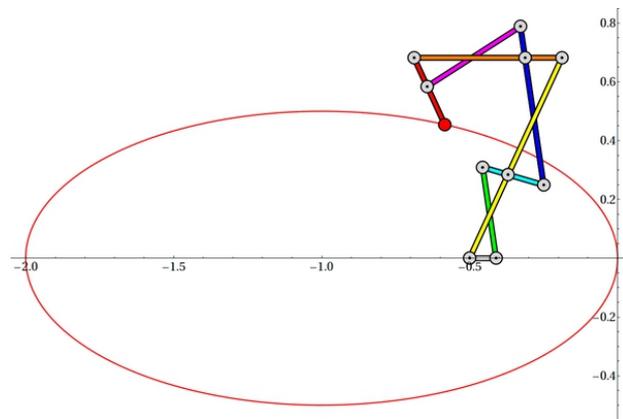


Abbildung 1. NFN Logo (links) und IgA Simulation (rechts)

Die **AG „Inverse Problems and Mathematical Imaging“**, geleitet von **O. Scherzer**, hat 2014 erfolgreich Projekte eingeworben: Dazu zählen ein EU Projekt und vier FWF Projekte. Gemeinsam mit den laufenden Projekten definieren diese nun einen großen Teil unserer wissenschaftlichen Ziele. Im Bereich des sogenannten Machine Learning, wo wir sehr erfolgreich bei der Projektantragstellung waren, beschäftigen wir uns mit der Wahl von Lern- (oder) Regularisierungsparametern und der Analysis der Parameterwahlstrategien, sowie der Anwendung in der molekularen Modellierung und zur Diagnose. Im Bereich des Imaging beschäftigen wir uns mit mathematischen Rekonstruktionsalgorithmen für quantitative hybride Bildgebung – insbesondere mit der Kombination von Optischer Kohärenz-Tomographie und Photoakustischer Bildgebung, sowie der Auswertung von Zellmikroskopiedaten. Kürzlich wurde auch ein Projekt zur Berechnung von großen Wasserwellen bewilligt. Diese Problemstellung lässt sich als ein Inverses Problem formulieren, und erlaubt somit eine Anwendung der Kernexpertise der Gruppe in einem neuen Gebiet.

In der **AG „Symbolic Computation“** geleitet von **J. Schicho**, wurde das Gebiet "Symbolic Functional Analysis" durch die Bewilligung des FWF-Projekts "Algebra and Algorithms for Integro-Differential Equations" gestärkt; es beginnt 2015 unter der Leitung von G. Regensburger. Darüber hinaus setzte Regensburger die Kooperation mit S. Müller (Group Molecular and Systems Biology) an chemischen Reaktionsnetzwerken fort. C. Koutschan und Regensburger gelang es ein Problem zu lösen, welches in einem RICAM Seminar von Kollegen der New Frontiers Group on Crowd Modeling and Simulation gestellt wurde. Koutschan kooperierte außerdem mit verschiedenen externen Kollegen (USA, China, Japan), denen er seine Expertise in der algorithmischen Manipulation von holonomen Funktionen zur Verfügung stellte. Die Zusammenarbeit von N. Villamizar und A. Mantzaflaris (Group Direct Field Problems) an hierarchischen Box-Splines und deren Anwendung in der isogeometrischen Analysis wurde fortgesetzt. H. Ahmadinezhad, Z. Li, und J. Schicho lösten ein Problem von Gelenkgetrieben mit Schraubgelenken durch eine überraschende Anwendung eines Satzes von Ax über transzendente Funktionen. In der Kinematik vereinte die Mehrheit der Gruppe (6 Mitglieder) ihre Kräfte und konstruierten Gelenkgetriebe mit wenig Verbindungen, die einer gegebenen Kurve folgen.



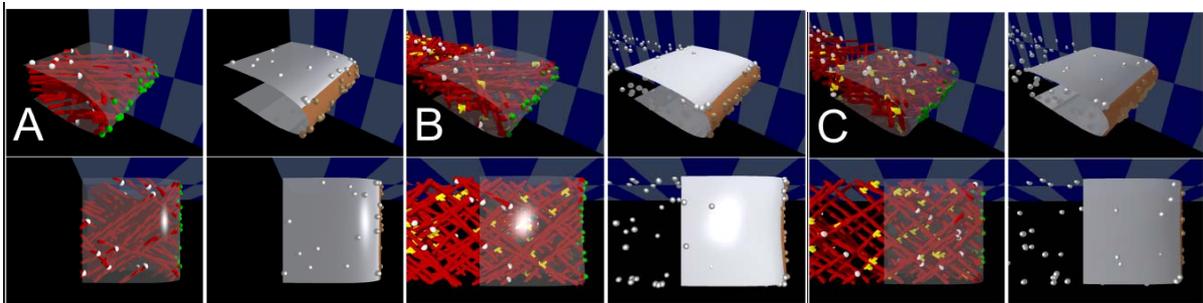
Ein Gelenkgetriebe mit 8 Gliedern und 10 Drehgelenken zur Zeichnung einer Ellipse, welche durch unseren neuen Zugang erzeugt wurde. Die klassische Konstruktion von Kempe benötigt 158 Glieder und 235 Drehgelenke.

Der Schwerpunkt der Forschung der **AG „Optimization and Optimal Control“** geleitet von **K. Kunisch**, liegt auf der optimalen Steuerung bei partiellen Differentialgleichungen, wobei analytische und numerische Forschungsarbeiten von gleichrangiger Bedeutung sind. Wesentliche Fortschritte wurden auf dem Gebiet der Stabilisierung zu zeitabhängigen Trajektorien bei Navier-Stokes Gleichungen erzielt. Bisher wurde diese Fragestellung immer im Zusammenhang mit Stabilisierung zu stationären Ruhelagen untersucht. Wir hoffen diese Techniken in Zukunft für Reaktion-Diffusionsgleichungen mit komplexer Dynamik einsetzen zu können. Eine weitere, von unserer Gruppe mitinitiierte Thematik ist sparsity control. Hierbei müssen optimale Zustände mit Kontrollen, welche möglichst kleine temporäre und/oder räumliche Träger haben, erreicht werden. Hier gilt es einerseits effiziente numerische Methoden für die Lösung nicht-glatte unendlich-dimensionaler Optimierungsprobleme zu entwickeln, und andererseits die zugrunde liegenden partiellen Differentialgleichungen mit maßwertigen Kontrollen zu analysieren. Diese Thematik wird auch in unsere Forschung zur Bidomain-Gleichung, welche die elektrophysiologische Beschreibung des Herzens darstellt, einfließen. Erst Resultate für Defibrillierungsstudien liegen bereits vor. Während wir uns bisher überwiegend mit open loop Kontrolle beschäftigen, wurden auch erste Anstrengungen für closed loop Kontrolle auf der Basis der Hamilton Jacobi Bellman Gleichungen unternommen. Um dem ‚Fluch der Dimensionalität‘ Rechnung zu tragen, werden Spektraltechniken eingesetzt und die Struktur der zugrunde liegenden partiellen Differentialgleichung ausgenutzt.

Der Schwerpunkt der Arbeit der AG **“Modelling, Analysis and Numerics of PDEs in Cell Biology”** geleitet von **C. Schmeiser** lag bei der mathematischen Beschreibung des Lamellipodiums, einer flachen Zellausstülpung, die eine wesentliche Funktion in der Zellmobilität besitzt.

Dabei wurde in zwei Richtungen gearbeitet. Mit Hilfe von dreidimensionalen mikroskopischen Modellen, in denen die Bestandteile des Zytoskeletts und die Zellmembran detailliert beschrieben werden, wurde versucht die flache Form des Lamellipodiums zu erklären. Ein wesentlicher Aspekt hierbei ist die Wechselwirkung zwischen der Deformation der Membran und der Dynamik des Zytoskeletts. Neben der Modellierung ist hier die numerische Simulation eine Herausforderung, bei der die Minimierung eines geometrischen Funktionals für die Zellmembran mit der stochastischen Evolution des Zytoskeletts gekoppelt wurde.

Die zweite Stoßrichtung ist die Modellierung der Dynamik ganzer Zellen mit Hilfe von kontinuumsmechanischen Modellen, deren Herleitung auf der oben erwähnten mikroskopischen Beschreibung beruht. Auf diese Art kann die Morphologie kriechender Zellen in verschiedenen Situationen beschrieben werden, z.B. die Anregung durch chemotaktische Signale oder die Bewegung auf Substraten mit variierenden Adhäsionseigenschaften.



Time series of a simulation with the microscopic lamellipodium model with cytoskeleton filaments in red and the cell membrane (pushed by the filaments) in silver. The flat shape is not prescribed but a result of the evolution.

In Kooperation mit dem Institut für theoretische Biologie der Humboldt Universität Berlin hat die AG **„Mathematical Methods in Molecular and Systems Biology“**, geleitet von **P. Kügler**, in Kooperation mit dem Institut für theoretische Biologie der Humboldt Universität Berlin die zeitliche Organisation von Stoffwechselwegen mittels “Insilico Evolution” und die Maximierung von Biosynthese unter Berücksichtigung von kinetischer Information untersucht. Das Resultat, wonach optimale Lösungen elementare Flussmoden sind, erlaubt die Vorhersage diskreter metabolische Übergänge und erklärt das Auftreten von Stoffwechselwegen mit niedriger Ausbeute. Gemeinsam mit der Symbolic Computation Group wurden auch Gleichgewichte chemischer Netzwerke mit verallgemeinerter Massenwirkungskinetik studiert. Algebraisch gesprochen hat die Gruppe eine konstruktive Charakterisierung positiver Lösungen polynomialer Gleichungen mit reellen und symbolischen Koeffizienten erzielt. Zusammen mit Pharmakologen der Uni Wien hat die Gruppe zudem Spannungssensor-Poren-Transduktionen und deren Modulation durch Kalziumkanalliganden quantifiziert. Auf methodischer Seite wurde an der Parameteridentifikation mittels Varianzanalyse für Ionenkanalmodelle sowie inversen Bifurkationstechniken zum Studium wirkstoff-induzierter Arrhythmien in Aktionspotentialen von Kardiomyozyten gearbeitet. Schließlich hat die Gruppe gemeinsam mit der School of Mathematical Sciences, Fudan University, die Bestimmung des Austauschkoefizienten von Karst-Grundwasserleitern untersucht.

Der Schwerpunkt der Arbeit der **Transfer-Gruppe**, geleitet von **R. Ramlau**, liegt in der Entwicklung und Anwendung von modernen mathematischen Methoden auf Problemstellungen aus anderen Wissenschaften und der Industrie. Die Arbeiten werden in Kooperation mit dem Industrial Mathematics Competence Center (IMCC) und den Firmenpartnern durchgeführt. Insbesondere wurden 2014 die folgenden Themen und Projekte bearbeitet:

In Kooperation mit der Firma AVL (Graz) arbeiteten wir an der Entwicklung von Simulationsverfahren für die Automobilindustrie (Simulation von Multi-Physics-Systemen). Dabei wurden z.B. hocheffiziente Gleichungssysteml6ser entwickelt, um die Rechenzeit der Gesamtsimulationen signifikant zu verringern. Darüber hinaus wurde z.B. im Rahmen der Simulationsumgebung EXCITE ein Riemtriebmodell, das die gesamte Bewegung des Bandes einschlieÙlich der lateralen Auslenkungen simulieren kann, weiterentwickelt.

Im Bereich Finanzmathematik wurden Arbeiten zusammen mit der MathConsult und der uni software plus zur Entwicklung von Verfahren zur Simulation und Bewertung von Finanzinstrumenten durchgeföhrt. Insbesondere wurden in der Gruppe Modelle entwickelt, mit denen die derzeit auftretenden negativen Zinssätze oder auch negative Inflationsraten behandelt werden können.

Darüber hinaus wurden im Forschungsbereich Adaptive Optik weitere Arbeiten durchgeföhrt, die im Abschnitt *Highlights* näher beschrieben sind.

Der Schwerpunkt des Projektes „**Discrete Mathematics and Cryptography**“ geleitet von **A. Winterhof**, lag 2015 auf der Analyse und Erzeugung von Pseudozufallszahlen und Gleichverteilung, Kryptografie, Kodierungstheorie, Kommunikationsmathematik, Diophantischer Analysis, additiver Kombinatorik und angewandter Algebra und Zahlentheorie. Die Forschungsergebnisse wurden in 28 referierten Zeitschriftenartikeln und 3 Beiträgen in Sammelbänden publiziert. Außerdem wurden vier Bücher über angewandte Algebra und Zahlentheorie, algebraische Kurven und endliche Körper und ihre Anwendungen einschlieÙlich Kryptografie, Folgen und ihre Anwendungen und Gleichverteilung und quasi-Monte Carlo Methoden herausgegeben.

Volker Ziegler nahm einen Ruf auf eine Assistenzprofessur der Universität Salzburg an. Arne Winterhof trat zwei weiteren Herausgebergremien des Journal of Uniform Distribution und des International Journal of Computational Mathematics bei. Außerdem war er Programmchef der Tagung SETA 2014 (Sequences and Their Applications).

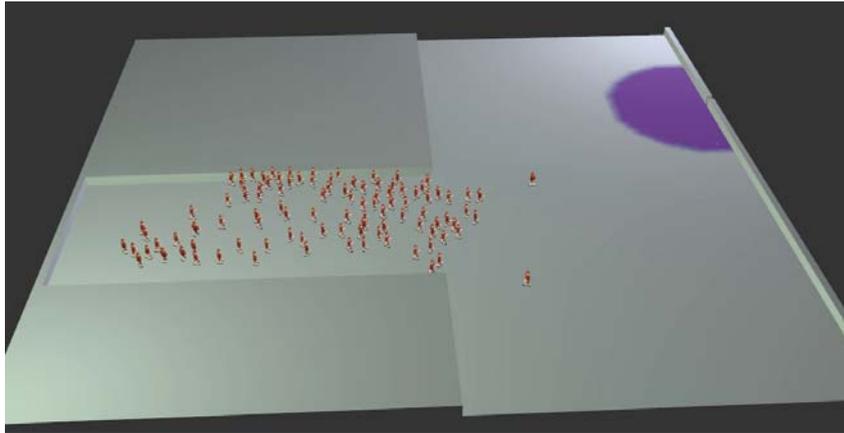
Zwei FWF Projekte wurden genehmigt: Zur Hierarchie von Pseudozufallsmaßen als Teil eines Sonderforschungsbereiches über quasi-Monte Carlo Methoden und Anwendungen (Projektleiter: A. Winterhof, 01.02.2014-31.01.2018, 1 PostDoc, 1 Doktorand) und eine Lise-Meitner Stelle für Professor Wilfried Meidl (Sabanci Universität Istanbul) mit dem Titel Funktionen mit speziellen Walsh Transformationen (01.02.2015-31.01.2017).

Im Juni wurde ein Workshop über Anwendungen von Algebra und Zahlentheorie zur Feier von Harald Niederreiters siebzigten Geburtstag in Linz mit 55 Teilnehmern veranstaltet.

Forschungsschwerpunkte der **New Frontiers Group (NFG)** „**Multiscale modeling and simulation of crowded transport in the life and social sciences**“, geleitet von **M.-T. Wolfram** im letzten Jahr waren die Beschreibung und Analyse von nichtlinearen Transportgleichungen, welche die Bewegung von Fußgängern oder auch die Preisdynamik eines gehandelten Produkts beschreiben. Hierbei wurden verschiedene Modellierungsansätze gewählt; wie etwa nichtlineare partielle Differentialgleichungen, kinetische Gleichungen oder sogenannte Mean-field Games. In all diesen Gleichungen treten komplexe Phänomene auf, welche wir mit analytischen als auch numerischen Methoden zu verstehen versuchen.

Im Bereich der Fussgängerdynamik arbeiten Helene Ranetbauer als auch Sabine Hittmeir an einem nichtlinearen partiellen Differentialgleichungssystem, welches die entgegen gesetzte Bewegung zweier Gruppen beschreibt. Es basiert auf einfachen mikroskopischen Interaktionen. Erste numerische Simulationen zeigen die Entstehung von 'Richtungsfahrbahnen' bei der Bewegung zweier Gruppen in verschiedenen Richtungen. Dieses Verhalten würde speziellen stationären Lösungen entsprechen, welche wir im nächsten Schritt auch analytisch konstruieren und verstehen wollen. Weitere Projekte beschäftigen sich mit optimalen Steuerungsmethoden für Fussgänger (in Zusammenarbeit mit Adriano Festa und Dante Kalise), der Analyse kinetischer Gleichungen für Zellbewegung (Kooperation von Sabine Hittmeir, Christian Schmeiser und Angelika Manhardt) als auch der automatischen Herleitung von partiellen Differentialgleichungen mit Methoden aus dem Bereich 'Symbolic Computation' (mit Georg Regensburger und Christoph Koutschan).

Das **START Project "Sparse Approximation and Optimization in High Dimensions"**, geleitet von **M. Fornasier**, fokussiert auf das Thema „sparse“ Optimierung und Anwendungen für die Dimensionsreduzierung in komplexen Problemen. Die Gruppe beschäftigt sich mit der Entwicklung effizienter Algorithmen, mit denen es möglich ist, auch in höher dimensionalen Fragestellungen optimale dünn besetzte Ergebnisse zu erhalten. In einem zweiten Schritt sollen die dadurch gewonnenen Werkzeuge zur Lösung partieller Differentialgleichungen und Variationsproblemen auf großen Gebieten eingesetzt werden. Darüber hinaus beschäftigen wir uns mit der Anwendung der entwickelten Verfahren in der Bildverarbeitung und in freien Randwertproblemen. Außerdem hat sich die Gruppe mit neuen Anwendungen in innovativen Gebieten wie dem automatisierten Lernen und optimalen Steuerung von hochdimensionalen dynamischen Systemen beschäftigt.



Sparse control of a crowd to optimally address it to an emergency exit

3. Highlights 2014

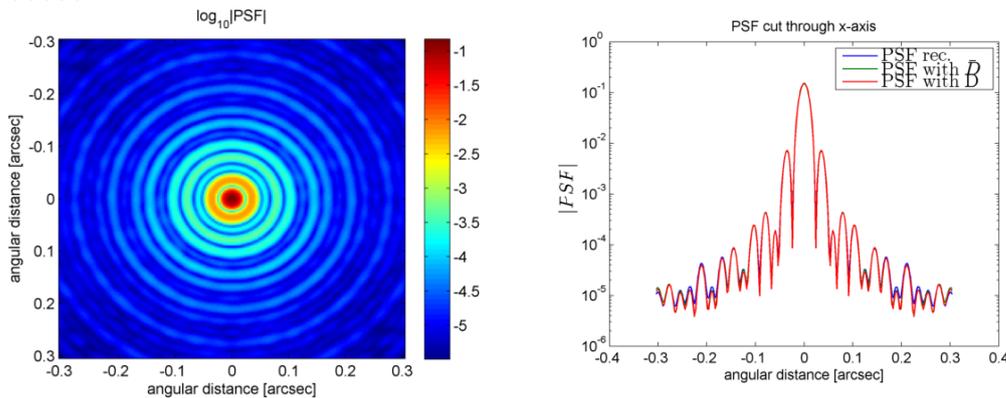
Das Doktoratskolleg DK W1214 "Computational Mathematics: Numerical Analysis and Symbolic Computation", an dem 4 RICAM-Gruppenleiter beteiligt sind, wurde nach 2 Förderperioden exzellent zwischenevaluert und wird vom FWF für weitere 3 Jahre (2015-2017) gefördert. RICAM ist auch mit einem Doktoratsprojekt am vom FWF neu bewilligten DK W 1250 „NanoCell“ beteiligt. Damit ermöglichen die beteiligten Gruppenleiter ihren DoktoratsstudentInnen direkt bzw. durch Assoziierung eine exzellente strukturierte Ausbildung.

Von Oktober bis Dezember 2015 wurde das Special Semester „New Trends in Calculus of Variations“ am RICAM durchgeführt. Es führte etwa 250 Wissenschaftler aus 15 Nationen, darunter eine große Anzahl von Doktoranden und Post-Docs, zusammen. Das Special Semester bestand aus vier Workshops und zwei Intensivkursen, die von deren Leitern höchst interessant und erfolgreich gestaltet wurden. Die exzellente wissenschaftliche Atmosphäre wurde von allen Teilnehmern geschätzt. Aus dem Special Semester heraus werden zwei Bücher entstehen, welche in Radon Series on Computational and Applied Mathematics zur Veröffentlichung angenommen wurden.

RICAM hat die 6. International Konferenz „Computational Methods in Applied Mathematics“ (CMAM6) mit 125 Teilnehmern aus 26 Länder von 5 Kontinenten organisiert. Die CMAM6 hat nicht nur die Visibility unseres Institutes gefördert, sondern auch zu neuen internationalen Kooperationen geführt. Ausführliche Informationen findet man auf der CMAM6 Web-Site <http://www.ricam.oeaw.ac.at/events/conferences/cmam6/>

Im Forschungsbereich Adaptive Optik beteiligt sich die Transfer-Gruppe an der Entwicklung von zwei Instrumenten (MICADO und METIS) für das European Extremely Large Telescope (E-ELT). Dabei führten wir unter anderem Entwicklungsarbeiten zu einem Algorithmus durch,

bei dem aus Daten des Adaptiven Optik - Systems des Instruments seine Pointspread-Funktion (PSF) berechnet werden kann. Mit der dann bekannten PSF lässt sich in einem nachfolgenden Prozess die Qualität der aufgenommenen Teleskopbilder signifikant verbessern.



Rekonstruierte Pointspread-Funktion des E-ELT

4. Scientific Activity 2014 (Abstract)

In the following we are going to report about the scientific activities of the working groups and research projects at RICAM.

The research of the group „**Computational Methods for Direct Field Problems**“ led by **U. Langer**, (CMG) has focused on the development, analysis and implementation of novel fast and robust computational methods for Partial Differential Equations (PDEs). Many computer simulations are based on mathematical models which are given by PDEs or systems of coupled PDEs. We have studied diffusion phenomena in heterogeneous media which are arising in technical applications as well as life sciences. Similarly, Fluid-Structure-Interaction (FSI) models lead to a system of coupled PDEs coming from fluid and structure mechanics. FSI models again play an important role in both technical applications and medicine. Crack propagation is another complicated phenomenon in mechanics, where the computer simulation requires sophisticated numerical techniques. The CMG contributes to the applications mentioned above. Fast and robust numerical methods allow not only the efficient simulation of products and processes but also their efficient optimization.

The CMG has made important contributions to Isogeometric Analysis (IgA). The results were presented in several invited talks on international conferences. IgA is a relatively new research direction that already has a major impact on all Computational Sciences and Industrial Applications, whereas the mathematical foundation is at the very beginning. Two research projects on IGA were supported by the FWF. The IGA software project G+SMO is a collaborative effort of several research groups within the NFN S117 on “Geometry & Simulation”, which is a longterm research network. Figure 1 shows the spline representation of the NFN logo in G+SMO and the IgA solution of a diffusion problem on the surface of a car. The CMG is involved in the new FWF-granted doctoral program DK W1250 „NanoCell“ and in the doctoral program DK W1214 „Computational Mathematics“, which was excellently evaluated by the FWF in November 2014.

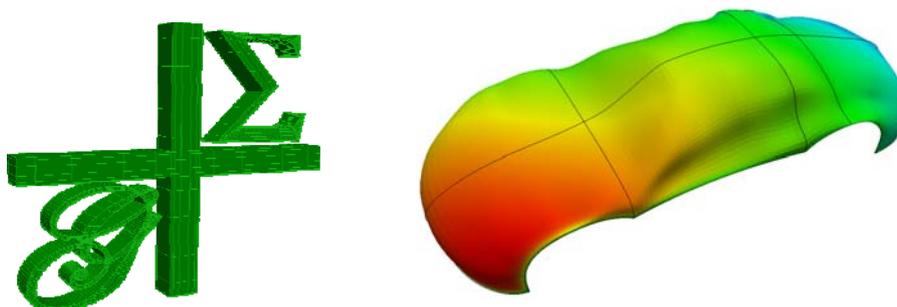
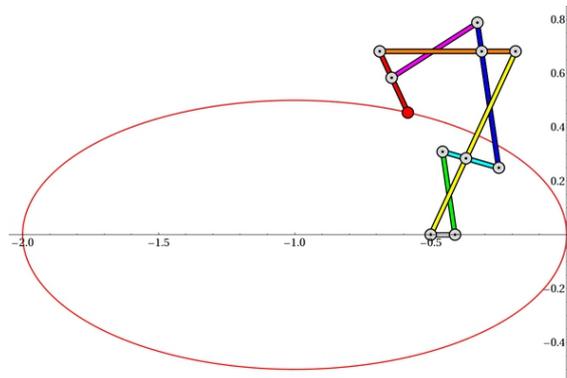


Figure 1. NFN Logo (left) and IgA Simulation (right)

The group “**Inverse Problems and Mathematical Imaging**”, led by **O. Scherzer**, has been successful in acquiring several grants, in particular one EU project and four FWF projects. Together with the ongoing projects they are now determining the intermediate research goals. In the field of Machine Learning, where we have been very successful with grant applications, we are concerned with the choice of the regularization (learning) parameters and the analysis of the parameter choice strategies. Aside from the theoretical aspects we are also dealing with solving practical problems with those techniques, such as molecular modeling and medical diagnosis. In the field of imaging we have been concerned with mathematical reconstruction algorithms for quantitative hybrid imaging - in particular the combination of optical coherence tomography and photoacoustic imaging, and the evaluation of cell microscopy data. Recently we also have been granted a project for the computation of large amplitude water waves. This problem can be formulated as an Inverse Problem, and therefore allows to transfer the main expertise of the group to a new field.

In the group “**Symbolic Computation**”, led by **J. Schicho**, the topic Symbolic Functional Analysis was strengthened by the acceptance of the FWF project "Algebra and Algorithms for Integro-Differential Equations", which will start in 2015, lead by G. Regensburger. In addition, Regensburger also continued his cooperation with S. Müller (Group Molecular and Systems Biology) on chemical reaction networks. Koutschan and Regensburger could solve a problem raised in a RICAM seminar by colleagues from the New Frontiers Group on Crowd Modeling and Simulation. Koutschan also cooperated with various external colleagues (USA, China, Japan) by providing his expertise on algorithmic manipulation of holonomic functions. The cooperation of N. Villamizar and A. Mantzaflaris (Group Direct Field Problems) on hierarchical box splines and their application in isogeometric analysis was also continued. H. Ahmadinezhad, Z. Li, and J. Schicho solved a problem on linkages with helical joints by a surprising application of a theorem by Ax on transcendental functions. In kinematics, the majority of the group (6 colleagues) joined their efforts and produced linkages with small numbers of links that follow a given curve.



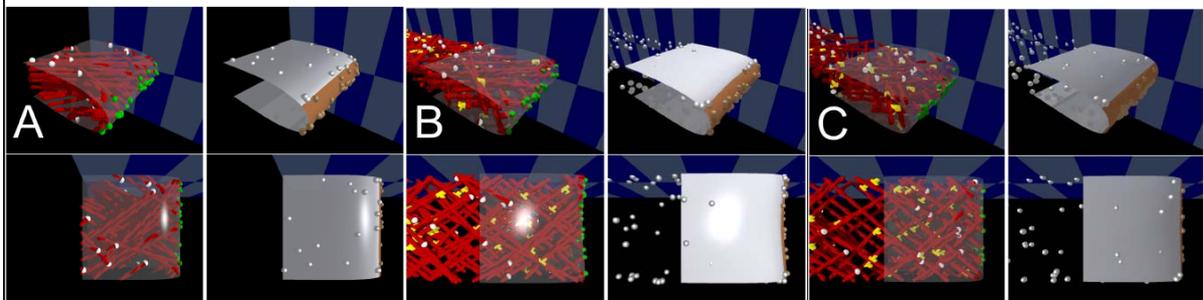
A mechanical linkage with 8 links and 10 rotational joints drawing an ellipse, constructed by our new approach. The classical construction by Kempe requires 158 links and 235 joints.

The group „**Optimization and Optimal Control**, led by **K. Kunisch** focuses on control and optimal control of partial differential equation, with equal interest on analytical and computational topics. Major advances were achieved on the topic of stabilization to time dependent trajectories for the Navier Stokes equations. So far only stabilization to steady states has been analyzed. In the future we hope to be able to extend these concepts to reaction diffusion equations with complicated dynamical systems behavior. Another topic, co-initiated by our group, is open loop control with sparsity constraints. The problem consists in reaching optimal states while employing the actions of the control in as small temporal or spatial domains as possible. This leads to nonsmooth infinite dimensional optimization problems for which the use of semi-smooth Newton methods was proposed and justified. It also requires investigating the underlying partial differential equation with measure-valued forcing functions. This topic will be of interest in the context of optimal control of the bidomain equations which are the well-accepted models for the electro-physiologic description of the heart. First results corresponding to optimal defibrillation studies have already been obtained.

While most of our work is concerned with open loop control we also started to investigate closed loop control on the basis of the Hamilton Jacobi Bellman equations. To cope with the curse of the dimensionality we used spectral elements and exploited the structure of the underlying partial differential equation.

The focus of our work in the group “**Modelling, Analysis and Numerics of PDEs in Cell Biology**”, led by **C. Schmeiser**, is on the mathematical description of the lamellipodium, a flat cell protrusion with an important role in cell motility. The work is split in two main directions. With the help of three-dimensional microscopic models including detailed descriptions of elements of the cytoskeleton and of the cell membrane, we tried to explain the flat shape of the lamellipodium. An important aspect is the interaction of membrane deformation and cytoskeleton dynamics. Major challenges are not only the modeling, but also the numerical simulation, where minimization of a geometric functional for the cell membrane is coupled with the stochastic evolution of the cytoskeleton.

The second approach is towards modeling of whole cells with the help of continuum mechanical models, whose derivation is based on the above mentioned microscopic descriptions. In this way the morphology of crawling cells can be described in various situations, such as under the influence of chemotactic signals or an adhesive substrates with varying adhesion properties.



Time series of a simulation with the microscopic lamellipodium model with cytoskeleton filaments in red and the cell membrane (pushed by the filaments) in silver. The flat shape is not prescribed but a result of the evolution.

In collaboration with the Institute for Theoretical Biology, Humboldt University Berlin, the group “**Mathematical Methods in Molecular and Systems Biology**”, led by **P. Kügler**, analyzed the temporal organization of metabolic pathways using insilico evolution and the maximization of biosynthesis using kinetic information. The finding that optimal solutions are elementary flux modes allows the prediction of discrete metabolic switches and explains the occurrence of low-yield pathways. Joint with the Symbolic Computation Group, complex-balancing equilibria of chemical networks with generalized mass-action kinetics were further studied. In algebraic terms, the group provided a constructive characterization of positive solutions of polynomial equations with real and symbolic exponents. Together with pharmacologists at the University of Vienna, the group also quantified voltage sensor – pore transductions and their modulation by calcium channel ligands. With respect to methodology, the group worked on parameter identification via variance fitting for ion channel models as well as on inverse bifurcation techniques for the study of drug-induced arrhythmias in action potentials of cardiomyocytes. Finally, joint with the school of mathematical sciences at Fudan university the group investigated the determination of the exchange coefficients of karst aquifers.

The **Transfer Group** led by **R. Ramlau** focuses on the development and application of modern mathematical methods for industry and applied sciences. The work is carried out in close cooperation with the Industrial Mathematics Competence Center (IMCC) and industrial partners. In particular we worked on the following topics and projects in 2014:

In cooperation with AVL (Graz) we develop simulation methods for the automotive industry (i.e., simulation of multi-physics systems). For example, in the framework of the simulation tool EXCITE, the elastic multi-body system was extended by a continuous moving belt model which is capable of simulating the entire movement of the belt, including the lateral deflections. Additionally, highly efficient solvers for linear systems were developed in order to shorten the computational times for the simulation.

In finance, in cooperation with MathConsult and uni software plus we carried out work toward the development of methods for the simulation and evaluation of financial instruments. In particular we have been working on models that are able to handle negative interest rates and models working with negative inflation rates.

Further work has been carried out in the research area of Adaptive Optics, for details see the section *Highlights*.

In 2014, the project “**Applied Discrete Mathematics and Cryptography**”, led by **A. Winterhof**, focused on pseudorandom number analysis and generation and uniform distribution, cryptography, coding theory, mathematics of communications, Diophantine analysis, additive combinatorics, and applied algebra and number theory. The research results were published in 28 peer-reviewed journal articles and 3 contributions in collections. Moreover, four books were edited on applied algebra and number theory, algebraic curves and finite fields and their applications including cryptography, sequences and their applications, and uniform distribution and quasi-Monte-Carlo-methods.

Volker Ziegler accepted a call as associate professor from the University of Salzburg. Arne Winterhof joined two more editorial boards of the Journal of Uniform Distribution and of the International Journal of Computational Mathematics. Moreover, he was program chair of the conference SETA 2014 (Sequences and Their Applications).

Two FWF grants were approved: On the hierarchy of measures of pseudorandomness which is part of the special research area quasi-Monte-Carlo-Methods and Applications (leader: A. Winterhof, 01.02.2014 - 31.01.2018, 1 postdoc, 1 PhD-student) and a Lise-Meitner position for Professor Wilfried Meidl (Sabanci University Istanbul) entitled functions with special Walsh transforms (01.02.2015 - 31.01.2017).

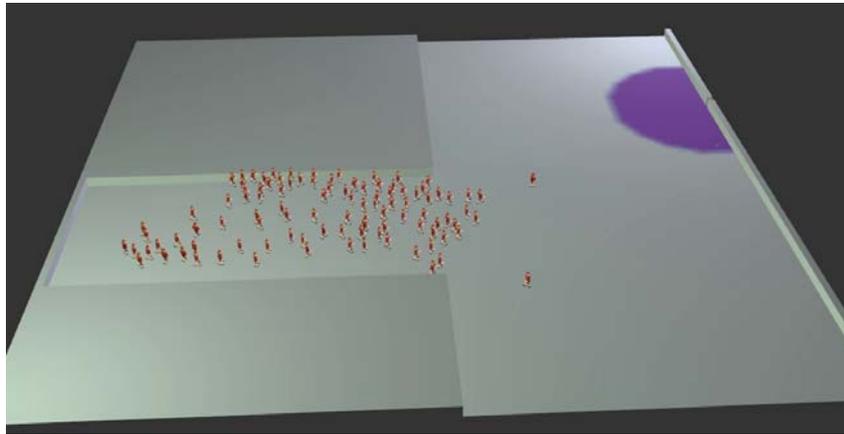
In June a workshop on applications of algebra and number theory on the occasion of Harald Niederreiter's 70th birthday with 55 participants was organized in Linz.

The research focus of the **New Frontiers Group (NFG) „Multiscale modeling and simulation of crowded transport in the life and social sciences”**, led by **M.-T. Wolfram** lies in the mathematical description and analysis of non-linear transport equations, which describe, e.g., pedestrian or price dynamics. We use different approaches such as non-linear partial differential equations, Boltzmann-type equations or so-called mean field games. All these equations exhibit complex phenomena, which we analyse with different numerical and analytical techniques.

In the last year Helene Ranetbauer and Sabine Hittmeir worked on a nonlinear PDE system, which describes the evolution of two pedestrian groups walking in opposite direction. The equations are derived from simple interaction rules, but first numerical simulations confirm the formation of directional lanes. We postulate that this phenomena corresponds to special stationary solutions, which we shall investigate in more detail in the next step. Other projects focus on optimal control approaches for pedestrian dynamics (joint work with Adriano Festa and Dante Kalise), analytic properties of kinetic equations describing cell motility (cooperation of Sabine Hittmeir, Christian Schmeiser and Angelika Manhardt) as well as the automatic derivation of partial differential equations using symbolic methods (cooperation with Georg Regensburger and Christoph Koutschan).

The **START Project "Sparse Approximation and Optimization in High Dimensions"**, led by **M. Fornasier** focused on the topic of sparse optimization for dimensionality reduction in

complex problems. Our group first addresses the problem of designing efficient algorithms which allow us to achieve sparse optimization in high-dimensions. Secondly, the tools which we are developing for achieving adaptive dimensionality reductions are subsequently used as building blocks for solving large-scale partial differential equations or variational problems arising in various contexts. Finally, we will apply the whole machinery to interesting applications in image processing, numerical simulation, and we are now exploring new applications in innovative fields such as automatic learning of dynamical systems.



Sparse control of a crowd to optimally address it to an emergency exit

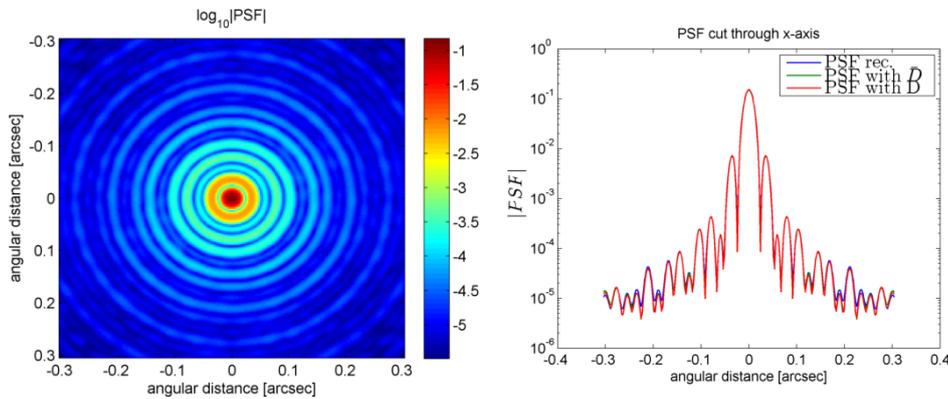
5. Highlights 2014

The Doctoral Program DK W1214 "Computational Mathematics: Numerical Analysis and Symbolic Computation", in which 4 RICAM group leaders are participating, was excellently evaluated, and will be granted by the FWF for further 3 years (2015 – 2017). RICAM is also participating in the new DK W1250 „NanoCell“ with one PhD project. The participating group leaders enable their PhD students an excellent PhD training via direct participation or association.

The special semester on „New trends in Calculus of variations“ took place at RICAM from October to December 2015. It gathered about 250 researchers from 15 countries, including many doctoral students and post-docs. The special semester was composed of four workshops and two 3-day schools. Each workshop was differently organized: some were based on only a few talks giving ample time for discussions, others included mini–courses, and others large poster sessions. The scientific environment has been greatly appreciated. The semester will finally result in publication of two books that have been accepted in the Radon Series on Computational and Applied Mathematics.

RICAM has hosted the 6th International Conference on Computational Methods in Applied Mathematics“ (CMAM6) with 125 participants from 26 countries and 5 continents. The CMAM6 has not only increased the visibility of our institute but also led to new international cooperations. More information can be found on the CMAM6 web site <http://www.ricam.oeaw.ac.at/events/conferences/cmam6/>

In the research area of Adaptive Optics the group continues to participate in the development of two instruments (MICADO and METIS) for the European Extremely Large Telescope (E-ELT). We have further developed an algorithm that allows for the reconstruction of the point spread function (psf) of the instrument based on data obtained from the Adaptive Optics system. Using the reconstructed psf, an image postprocessing of the obtained science data may lead to a significant improvement of the images.



Reconstructed Point spread function of the E-ELT

6. Ausgewählte Publikationen 2014

J. Kraus, M. Lybery, S. Margenov: Auxiliary space multigrid method based on additive Schur complement approximation. *Numerical Linear Algebra with Applications*. 2014, Published first online in Wiley Online Library at URL

M. Fornasier, V. Naumova, and S. V. Pereverzyev, Parameter Choice Strategies for Multipenalty Regularization, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2014, Vol. 52, No. 4 : pp. 1770-1794.

A. Kröner, K. Kunisch, and H. Zidani. Optimal feedback control of undamped wave equations by solving a HJB equation. *ESAIM: Control, Optimisation and Calculus of Variations*, 2014. doi:10.1051/cocv/2014033

S. Müller, G. Regensburger, R. Steuer (2014, online: 2013) Enzyme allocation problems in kinetic metabolic networks: Optimal solutions are elementary flux modes. *Journal of Theoretical Biology*, Bd. 347, S. 182-190.

J. Müller, J. Pfanzer, C. Winkler, A. Narita, C. LeClainche, M. Nemethova, M.-F. Carlier, Y. Maeda, M.D. Welch, T. Ohkawa, C. Schmeiser, G.P. Resch, J.V. Small, Electron tomography and simulation of baculovirus actin comet tails support a tethered filament model of pathogen propulsion, *PLoS Biol* 12 (2014), e1001765.

H. Ahmadinezhad, (2014), Singular del Pezzo Fibrations and Birational Rigidity. *Automorphisms in Birational and Affine Geometry Lecture Notes in Mathematics*, Springer, Bd. 79, S. 3-15. Citation Information: *Journal für die reine und angewandte Mathematik (Crelles Journal)*. ISSN (Online) 1435-5345, ISSN (Print) 0075-4102, DOI: 10.1515/crelle-2014-0095, October 2014

M. Yudytskiy, T. Helin, R. Ramlau (2014) Finite element-wavelet hybrid algorithm for atmospheric tomography. *Journal of the Optical Society of America A*, Bd. 31 (3), S. 550-560.

A. Winterhof, (2014, online: 2014) *Applied Algebra and Number Theory: Essays in Honour of Harald Niederreiter (on the occasion of his 70th birthday)*.; Cambridge: Cambridge University Press.

M. Fornasier, B. Piccoli, F. Rossi, Mean-field sparse optimal control. *Philos. Trans. R. Soc. Lond. Ser. A Math. Phys. Eng. Sci.* 372 (2014), no. 2028, 20130400

M. Burger, M. Di Francesco, P.A. Markowich, M.T. Wolfram, Mean field games with nonlinear mobilities in pedestrian dynamics, *Discrete and Dynamical Systems - B*, 19(5):1311-1333, 2014